



CEMES-CNRS:

<https://www.cemes.fr/gns/#thematique>

NOM DE L'EQUIPE DE RECHERCHE : NanoSciences Group (GNS)

NOMS DES ENCADRANTS : Téo Cucuiet, Claire Kammerer and Gwénaél Rapenne

Courriel des encadrants : tecucuiet@cemes.fr ; kammerer@cemes.fr ; rapenne@cemes.fr

Synthèse d'engrenages moléculaires chiraux avec rotation unidirectionnelle

Un projet en cours du groupe NanoSciences du CEMES vise à obtenir des molécules agissant comme des engrenages capables de transmettre leur mouvement de rotation les unes aux autres,^[1-2] à l'instar de mécanismes tels que les horloges ou les transmissions automobiles. À cet égard, notre groupe a établi un record mondial en réalisant le transfert de rotation à travers une chaîne de trois molécules, en utilisant des molécules en forme d'hélice assemblées en surface.^[3]

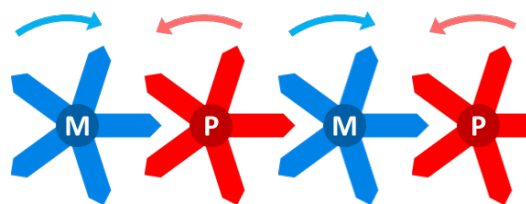


Fig. 1. Transfert de rotation dans un train

Increasing Augmenter ce nombre nécessite un contrôle précis du sens de rotation des engrenages sur la surface, car il est nécessaire d'alterner des engrenages aux sens de rotation opposés (Fig. 1). Dans cette optique, notre groupe a démontré que des complexes métalliques dotés de ligands en forme d'hélice adoptent des conformations chirales lorsqu'ils sont déposés sur des surfaces métalliques, ce qui induit un mouvement de rotation unidirectionnel des ligands.^[4] Toutefois, on obtient alors un mélange d'engrenages présentant les deux chiralités. Ce projet vise à aller plus loin en synthétisant des engrenages moléculaires à base de ruthénium (Ru) intégrant de nouveaux ligands d'ancrage, permettant l'introduction de chaînes latérales chirales (Fig. 2). Ces chaînes devraient favoriser une conformation chirale spécifique du ligand d'ancrage sur les surfaces, nous permettant ainsi de sélectionner le sens de rotation souhaité.

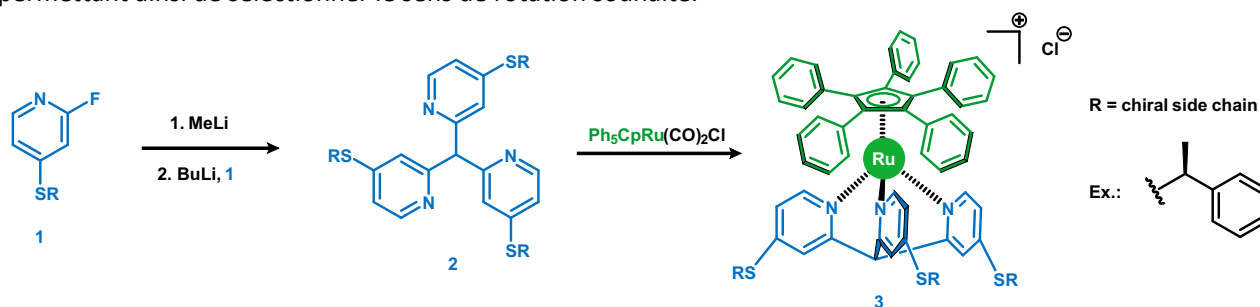


Fig. 2. Stratégie de synthèse pour un moteur moléculaire intégrant une nouvelle unité d'ancrage.

Il s'agit d'un projet de synthèse ouvrant la voie à des systèmes plus complexes, visant à réaliser le transfert de rotations moléculaires à longue distance. L'étudiant devra développer des compétences en synthèse, purification et caractérisation de molécules organiques et de complexes de coordination.

[1] **Molecular gears from solution to surfaces.** Y. Gisbert, S. Abid, C. Kammerer, G. Rapenne, *Chem. Eur. J* **2021**, 27, 12019–12031.

[2] **Gearing up molecules on surfaces.** T. A. Hector, G. Rapenne, C. Kammerer, *Trends Chem.* **2025**, 7, 350–353.

[3] **Transmitting Stepwise Rotation among Three Molecule-Gear on the Au(111) Surface.** K. H. A. Yeung, T. Kühne, F. Eisenhut, M. Kleinwächter, Y. Gisbert, R. Robles, N. Lorente, G. Cuniberti, C. Joachim, G. Rapenne, C. Kammerer, F. Moresco, *J. Phys. Chem. Lett.* **2020**, 11, 6892–6899.

[4] **A chiral molecular propeller designed for unidirectional rotations on a surface.** Y. Zhang, J. P. Calupitan, T. Rojas, R. Tumbleson, G. Erbland, C. Kammerer, T. M. Ajayi, S. Wang, L. A. Curtiss, A. T. Ngo, S. E. Ulloa, G. Rapenne, S. W. Hla, *Nat. Commun.* **2019**, 10, 3742.

CEMES-CNRS:
<https://www.cemes.fr/gns/#thematique>

NAME OR THE RESEARCH TEAM: NanoSciences Group (GNS)

NAMES OF SUPERVISORS: Teo Cucuiet, Claire Kammerer and Gwénaél Rapenne

Email address of the supervisors: tecucuiet@ceemes.fr ; kammerer@ceemes.fr ; rapenne@ceemes.fr

Synthesis of chiral molecular gears with unidirectional rotation

A current project of the NanoSciences Group at CEMES aims to obtain gear-like molecules that can transfer their rotary motion from one to another,^[1-2] in a similar way to mechanical mechanisms such as clocks and car transmissions. To this end, our group achieved the world record, consisting in the transfer of rotation along three molecules, by using propeller-shaped molecules assembled on surface.^[3]

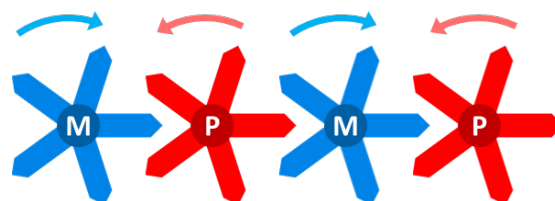


Fig. 1. Rotation transfer between adjacent gears.

Increasing this number requires precise control of the gear rotation direction on the surface, as gears of opposite rotation senses need to be alternated (Fig. 1). To this end, our group has shown that metal complexes containing propeller-shaped ligands adopt chiral conformations when deposited on metallic surfaces, resulting in unidirectional rotational motions of the ligands.^[4] However, in this case, a mixture of gears of both chiralities are obtained. In this project, we aim to go advance the topic by synthesizing Ru-based molecular gears containing new anchor ligands, that will allow the introduction of chiral side chains (Fig. 2). These chains should favorize a specific chiral conformation of the anchor ligand on surfaces, allowing us to select the desired direction of rotation.

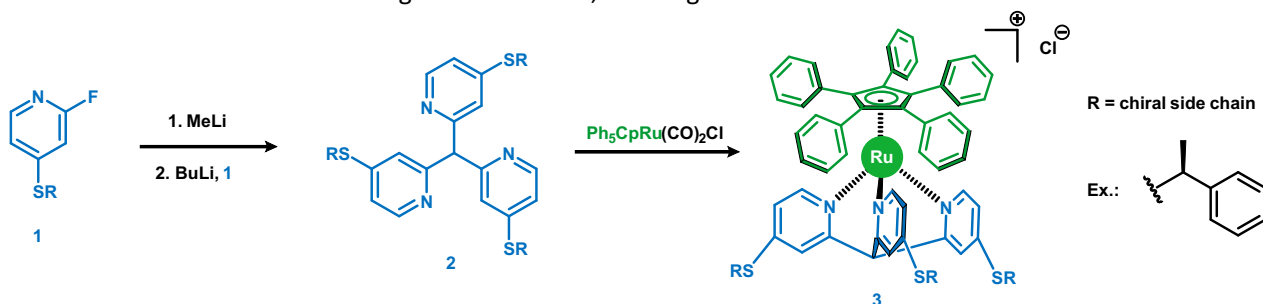


Fig. 2. Synthesis strategy for a molecular motor containing a new anchor unit.

This is a synthesis project that paves the way towards more complex systems, aimed at achieving long-range transfer of molecular rotations. The student is expected to develop aptitudes in the synthesis, purification and characterization of organic molecules and coordination complexes.

[1] **Molecular gears from solution to surfaces.** Y. Gisbert, S. Abid, C. Kammerer, G. Rapenne, *Chem. Eur. J* **2021**, 27, 12019–12031.

[2] **Gearing up molecules on surfaces.** T. A. Hector, G. Rapenne, C. Kammerer, *Trends Chem.* **2025**, 7, 350–353.

[3] **Transmitting Stepwise Rotation among Three Molecule-Gear on the Au(111) Surface.** K. H. A. Yeung, T. Kühne, F. Eisenhut, M. Kleinwächter, Y. Gisbert, R. Robles, N. Lorente, G. Cuniberti, C. Joachim, G. Rapenne, C. Kammerer, F. Moresco, *J. Phys. Chem. Lett.* **2020**, 11, 6892–6899.

[4] **A chiral molecular propeller designed for unidirectional rotations on a surface.** Y. Zhang, J. P. Calupitan, T. Rojas, R. Tumbleson, G. Erbland, C. Kammerer, T. M. Ajayi, S. Wang, L. A. Curtiss, A. T. Ngo, S. E. Ulloa, G. Rapenne, S. W. Hla, *Nat. Commun.* **2019**, 10, 3742.