

トリスポルフィリン自己集合四量体により構築される高い空孔率をもつ多孔性結晶

(広島大院先進理工¹・持続可能性に寄与するキラルノット超物質拠点²) ○児玉 知輝^{1,2}・久野 尚之¹・灰野 岳晴^{1,2}

High Porosity Crystal Formed by Self-Assembled Tetramer of Trisporphyrin (¹Graduate School of Advanced Science and Engineering, Hiroshima University, ²WPI-SKCM², Hiroshima University) ○Tomoki Kodama,^{1,2} Naoyuki Hisano,¹ Takeharu Haino^{1,2}

We have demonstrated that a cleft-shaped bisporphyrin connected with pyridinedicarboxamide formed a self-complementary dimer. In this study, we synthesized a layered tris(zinc-porphyrin) molecule with two binding cavities. A tris(zinc-porphyrin) is in equilibrium between the closed form and the open form, which are self-assembled in the solid state to form unique porous crystals with a huge void of 49625 Å³ per unit cell (56% of the cell volume). In this presentation, I will present the structural characteristics of the porous crystals that are produced by the self-assembly of the tris(zinc-porphyrin) molecule.

Keywords : molecular recognition, self-complementary, porphyrin

分子の自己相補的集合は、多くの生命現象に代表されるように、単体の分子では成し得ない高度な機能を生み出す。生命現象の理解というだけでなく、新たな機能性分子開発といった観点から、人工分子においても会合体の形態制御が試みられてきた。当研究室は、二つのポルフィリンを架橋したクレフト型ビスポルフィリンが自己相補的に会合し、二量体を形成することを報告している^[1,2]。本研究では、三つのポルフィリンを積層型に連結したトリス亜鉛ポルフィリン **1** を合成した(Figure 1a)。**1** はポルフィリンに囲まれた包接空孔と架橋部位を二つずつ有している。単結晶 X 線構造解析により、**1** は空孔に架橋部位を包接することで四量体を構築しており、さらに単位格子あたり 49625 Å³(56 %)の巨大な空孔を有していた(Figure 1b)。この結晶は、安定で堅く巨大な四量体構造を基本骨格としており、幅約 2 nm の空孔を備えていることから、タンパク質などの大きな分子の吸着への応用が期待される。

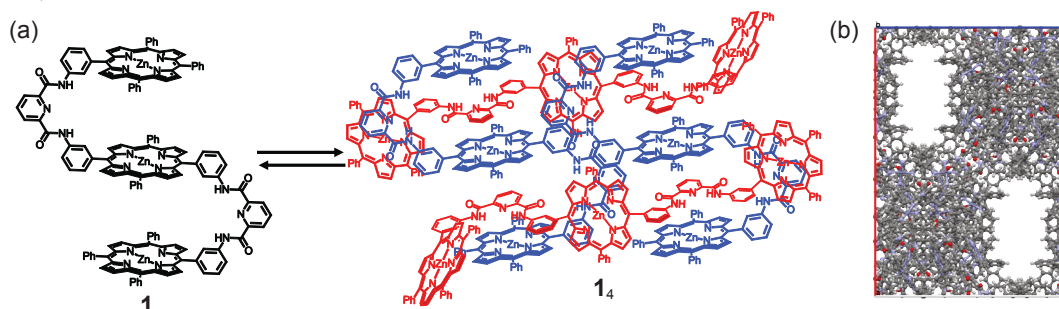


Figure 1. (a) Molecular structure and self-assemble behavior of **1**. (b) Crystal structure of **1**. View along b-axis.

[1] Haino, T.; Fujii, T.; Fukazawa, Y. *J. Org. Chem.* **2006**, *71*, 2572.

[2] Hisano, N.; Hirao, T.; Haino, T. *Chem. Lett.* **2021**, *50*, 1844-1847.