

[5, 10, 15, 20-テトラキス(4-アセチルフェニル)-ポルフィナト]ニッケル(II)  
と C<sub>60</sub> との共結晶の合成

○土岐幸資<sup>1</sup>・佐藤暢洋<sup>2</sup>・豊田良順<sup>2</sup>・千葉湧太<sup>2</sup>・北山拓<sup>2</sup>・井口弘章<sup>3</sup>・坂本良太<sup>2</sup>  
(東北大理<sup>1</sup>、東北大院理<sup>2</sup>、名大院工<sup>3</sup>)

Synthesis of cocrystal of [5,10,15,20-tetrakis(4-acetylphenyl)-porphinato]nickel(II) and C<sub>60</sub>

○Kosuke Toki<sup>1</sup>, Nobuhiro Sato<sup>2</sup>, Ryojun Toyoda<sup>2</sup>, Yuta Chiba<sup>2</sup>, Taku Kitayama<sup>2</sup>, Hiroaki Iguchi<sup>3</sup>,  
Ryota Sakamoto<sup>2</sup>

(Faculty of Science, Tohoku Univ.<sup>1</sup> Graduate School of Science, Tohoku Univ.<sup>2</sup> Graduate School of  
Engineering, Nagoya Univ.<sup>3</sup>)

Abstract: It is known that porphyrins and fullerenes form cocrystals. In this study, we synthesized a cocrystal of [5,10,15,20-tetrakis(4-acetylphenyl)-porphinato]nickel(II) and C<sub>60</sub>. In this presentation, we will report the results of various analyses, including the single crystal X-ray structure analysis.

Keywords: Porphyrin, Buckminsterfullerene, Intermolecular Interaction, Cocrystal, Liquid-Liquid Interfacial Precipitation Method

分子性結晶は、酸や塩基に対して安定であるという点や、細孔の形や大きさを変えられるという点から、新たな多孔質材料として注目されている。我々は先に、[5,10,15,20-テトラキス(4-エチニルフェニル)-ポルフィナト]ニッケル(II)とバックミンスターフラーレンとの共結晶を合成し、単結晶 X 線構造解析や粉末 X 線回折、窒素吸着特性といった分析結果を報告した<sup>[1]</sup>。また、この共結晶を濃塩酸中で加熱還流することにより、末端のエチニル基がアセチル基へと、結晶性を保ったまま、定量的に変換されることも見出している。

本研究は、末端の官能基が変換されることによってポルフィリンとフラーレンとの相互作用がどう変化するか確かめることを目的としている。具体的には、液-液界面析出法によって変換後の共結晶を直接合成し、単結晶 X 線構造解析などの分析を行った。

変換前の共結晶は液-液界面析出法によって効率良く得られたのに対し、変換後の共結晶を液-液界面析出法によって合成したときは、共結晶のほかに不純物が析出したり、収率が変換前のものと比べて低下したりするといったことが見られたため、分子間相互作用が小さくなっていると考えられる。

[1] *Precis. Chem.* 2024, 2, 9, 480–487