

スルホン基を有する前駆体を利用したフラーレン誘導体 (PCBM) 合成の検討

(大阪技術研) ○伊藤 貴敏・隅野 修平・松元 深・岩井 利之

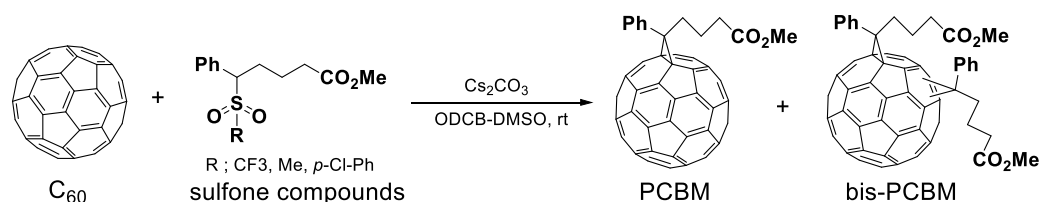
Optimization of reaction conditions for the synthesis of fullerene derivatives (PCBM) using sulfone compounds as precursors.

(Osaka Research Institute of Industrial Science and Technology) ○Takatoshi Ito, Shuhei Sumino, Fukashi Matsumoto, Toshiyuki Iwai

Fullerene derivatives are important as electron acceptor materials, and the development of an efficient method for derivatizing fullerenes is desirable. However, fullerene molecules have many highly symmetric double bonds, making it generally difficult to introduce substituents selectively and efficiently. In this study, we were able to synthesize PCBM of fullerene derivatives in good yield by using a newly developed precursor containing a sulfone group. We report on the investigation of the optimal reaction conditions.

Keywords : *methanofullerene ; selective reaction ; electron acceptor ; addition–elimination reaction*

フラーレン誘導体は、電子アクセプター材料として重要であり、効率的なフラーレン誘導体化法の開発が望まれている。しかしながら、フラーレン分子には対称性の高い多数の二重結合を有することで、選択的、及び、効率的な置換基導入は一般に困難である。我々は以前にスルホニウム塩を前駆体とした硫黄イリドの反応にて **phenyl-C₆₁-butyric acid methyl ester (PCBM)** を得る方法を報告した¹⁾。また、脱離基となる構造をスルホンとした前駆体においても PCBM 合成に利用できることを見出した。そこで今回、スルホン化合物を前駆体とする PCBM 合成の反応条件を詳細に検討した。その結果、反応はスルホンの硫黄原子にトリフルオロメチル基が置換した前駆体が効率的であった。また、溶媒はオルトジクロロベンゼン (ODCB) 溶媒のみでは反応は遅く、共溶媒として極性溶媒を添加することで反応が促進された。共溶媒の種類や量比に反応が影響を受け、DMSO の添加が最適であることがわかった。最適条件におけるフラーレン C₆₀ との反応において 68% の化学収率でモノ付加体の PCBM を得ることができた。本発表では、その反応条件検討の詳細を報告する。



1) T. Ito, T. Iwai, F. Matsumoto, K. Hida, K. Moriwaki, Y. Takao, T. Mizuno, T. Ohno, *Synlett*, **2013**, 24, 1988., T. Ito, Y. Inoue, T. Iwasawa, S. Sumino, F. Matsumoto, T. Iwai, K. Moriwaki, Y. Takao, T. Mizuno, T. Ohno, *Synlett*, **2017**, 28, 1457.