

## 5,15-bis(2,3,5,6-tetrafluoro-4-(dimethylamino)phenyl)-10,20-bis(pentafluorophenyl)porphyrinの構造解析

藤井 なり美・赤司 治夫

岡山理科大学フロンティア理工学研究所

2021年12月15日受理

5,15-bis(2,3,5,6-tetrafluoro-4-(dimethylamino)phenyl)-10,20-bis(pentafluorophenyl)porphyrin ( $H_2TFPP-(NMe_2)_2$ ) の単結晶を用いて、その結晶構造を明らかにした。結晶学的データは次の通り: crystal system monoclinic, space group  $P2_1/c$  (#88), Lattice parameters;  $a=13.5839(4)$  Å,  $b=11.4816(3)$  Å,  $c=16.0057(6)$  Å,  $V=2460.20(14)$  Å<sup>3</sup>,  $Z=2$ ,  $R1=0.0933$ ,  $wR=0.2437$ .  $H_2TFPP-(NMe_2)_2$ は、 $H_2TFPP$ のポルフィリン環に結合している4つのペンタフルオロフェニル基のうち、対面した2つが、テトラフルオロ-N,N-ジメチルアニリンに置換された構造をとっている。

### 1. Introduction

我々は、フッ素化ポルフィリン5,10,15,20-tetrakis(pentafluorophenyl)porphyrin(= $H_2TFPP$ )、およびフッ素化クロリン5,10,15,20-tetrakis(pentafluorophenyl)(*N*-methyl)iminomethano)chlorin(= $H_2TFPC$ )等の光機能性を有する有機化合物やそれらの誘導体を合成し、それらの応用に関する研究を行ったり、合成した有機分子を配位子とする金属錯体の合成と機能性に関する研究を行ったりしている。例えば、 $H_2TFPC$ に糖を連結した水溶性のフッ素化クロリン誘導体が、先端癌治療法として注目を集めている光線力学療法の光増感剤として優れた特性(腫瘍細胞に選択的に取り込まれること、可視光の照射により、腫瘍細胞に対する強い細胞毒性を発現すること、また暗所においては毒性を発現しないこと等)を有していることを報告したり、<sup>1)</sup>  $H_2TFPC$ を配位子とする亜鉛錯体が、空気中の酸素を酸化剤とするアミンの光酸化反応の触媒となることを報告したりしている。<sup>2)</sup>

本論文では、5,15-bis(2,3,5,6-tetrafluoro-4-(dimethylamino)phenyl)-10,20-bis(pentafluorophenyl)porphyrin( $H_2TFPP-(NMe_2)_2$ )の単結晶構造解析の結果を報告する。 $H_2TFPP-(NMe_2)_2$ は、 $H_2TFPP$ の4つのペンタフルオロフェニル基のうち、対面する位置にあるペンタフルオロフェニル基のpara位のフッ素原子をジメチルアミノ基に置換した配位子である。

### 2. Experimental

$H_2TFPP$ をDMF中で還流して得られた赤色粉末を、クロロホルム/DMSOより再結晶して、赤色板状結晶

を得た。この結晶をFOMBLIN OILでコーティングし、Cryoloop(HAMPTON RESEARCH社製)に固定した。測定は、Rigaku Saturn724自動X線回折計上で、Graphite monochromatorにより単色化したMoK $\alpha$ 線を用いて行った。測定中は、吹付低温装置を用いて、結晶を-180°Cに保った。構造解析は直接法(SHELXL)<sup>3)</sup>を用いて初期構造を決定した後、Full matrix最小二乗法とD合成を繰り返し、水素原子を除くすべての原子位置を決定した。水素原子は、幾何学的計算(C-H 0.95 Å)によりその位置を決定した後、riding model(水素原子が結合している炭素原子に対して、 $U_{iso}(H)=1.2U_{eq}$ )を用いて原子位置の精密化を行った。最終的に行ったD合成の結果から、化学的に意味のあるピークは発見されなかった。すべての計算はProgram package Olex<sup>2)</sup>を用いて行った。<sup>4)</sup>

### 3. Results and discussion

今回、単結晶構造解析に用いた $H_2TFPP-(NMe_2)_2$ の単結晶(赤色板状)は、 $H_2TFPP$ をDMF中で還流して得られた赤色粉末を、クロロホルム/DMSOから再結晶して合成した。<sup>5)</sup>

$H_2TFPP-(NMe_2)_2$ の結晶学的パラメーターおよび結晶精密化のパラメーターをTable 1に示した。

$H_2TFPP-(NMe_2)_2$ では、 $H_2TFPP$ の4つのペンタフルオロフェニル基のうち、対面する2つのペンタフルオロフェニル基のpara位のフッ素原子がジメチルアミノ基で置換された構造を取っていることが明らかになった。 $H_2TFPP-(NMe_2)_2$ の構造をFigure 1に示した。また、この構造解析の結果、今回の構造解析に用いた

$\text{H}_2\text{TFPP}-(\text{NMe}_2)_2$ の結晶には、再結晶に用いたジメチルスルホキシドの分子が $\text{H}_2\text{TFPP}-(\text{NMe}_2)_2$ の1分子あたり2分子、結晶構造中に含まれていることが明らかになった。

$\text{H}_2\text{TFPP}$ の4つのペンタフルオロフェニル基すべてにジメチルアミノ基を導入した5, 10, 15, 20-tetrakis(2,3,5,6-tetrafluoro-4-(dimethylamino)phenyl)-porphyrin (=  $\text{H}_2\text{TFPP}-(\text{NMe}_2)_4$ )の構造はSomanらによって報告されている。<sup>6)</sup>  $\text{H}_2\text{TFPP}-(\text{NMe}_2)_2$ の構造を、 $\text{H}_2\text{TFPP}-(\text{NMe}_2)_4$ の構造と比較しても、それらの構造に大きな差はなかった。すなわち、部分的にジメチルアミノ基を導入してもポルフィリン環の構造はほとんど変化しない。

$\text{H}_2\text{TFPP}-(\text{NMe}_2)_2$ のポルフィリン環の中心に結晶学的2回回転軸が存在しているため、Figure 1に示した原子の半分のみが結晶学的に独立な原子であり、対称操作により発生した原子には元素名のラベルの右肩に1を付して対称操作を示している。水素を除く各原子の座標および、原子変位パラメーター (Atomic coordinates and  $B_{\text{eq}}$ ) をTable 2, 水素を除く各原子の異方性原子変位パ

ラメーター (Anisotropic displacement parameters) をTable 3に示した。各原子間の結合距離をTable 4 (Bond lengths (Å)), 結合角をTable 5 (Bond angles ( $^\circ$ ))にそれぞれまとめた。水素原子の座標および、原子変位パラメーター (Hydrogen atomic coordinates and  $B_{\text{eq}}$ ) をTable 6に示した。

#### 4. References

- 1) K. Moriwaki, T. Sawada, M. Akiyama, A. Ikeda, J. Kikuchi, T. Matsumura, S. Yano, H. Kataoka, M. Inoue, and H. Akashi, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **2018**, *91*, 230-236.
- 2) K. Marui, A. Nomoto, H. Akashi, A. Ogawa, *Synthesis* **2016**, *48*(1), 31-42.
- 3) Sheldrick, G. M., *Acta Cryst.*, **2008**, *A64*, 112-122.
- 4) Dolomanov Oleg V., Bourhis Luc J., Gildea Richard J., Howard Judith A. K., Puschmann Horst, **2009**, *J. Appl. Cryst.*, *42*(2), 339-341.
- 5) 藤井なり美, **2020**, 岡山理科大学理学研究科化学専攻修士論文.
- 6) R. Soman, S. Sujatha, S. De, Vallyanga C. R., P. Parameswaran, B. Varghese, C. Arunkumar, *Eur. J. Inorg. Chem.*, **2014**, *2014*(16), 2653-2662.

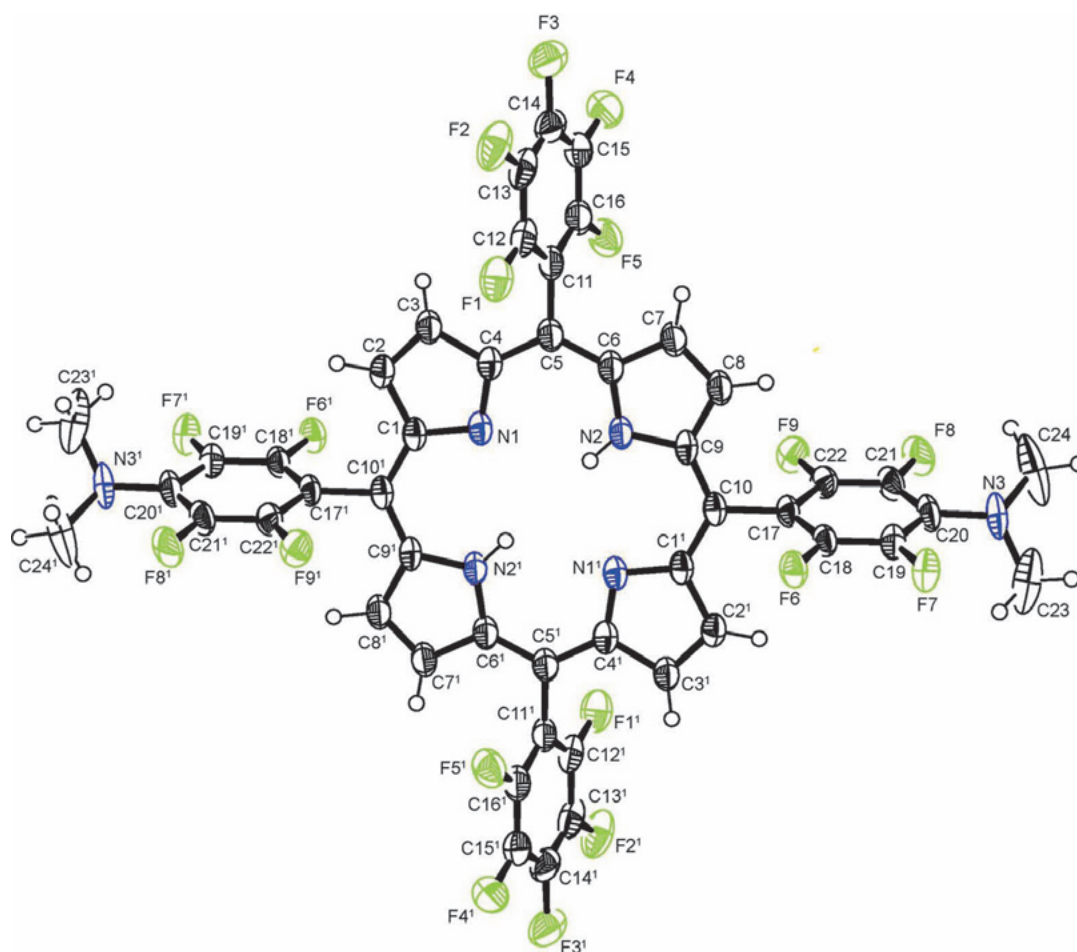


Figure 1. ORTEP drawing of  $\text{H}_2\text{TFPP}-(\text{NMe}_2)_2$ . Solvent molecules are omitted for clarity. The thermal ellipsoids are shown at 50% probability level. Symmetry cords: (1)  $-x+1, -y+1, -z+1$ .

Table 1. Crystal data and structure refinement parameters for H<sub>2</sub>TFPP-(NMe<sub>2</sub>)<sub>2</sub>.

Empirical formula	C <sub>52</sub> H <sub>34</sub> F <sub>18</sub> N <sub>6</sub> O <sub>2</sub> S <sub>2</sub>
Formula weight	1180.97
Temperature/K	93
Crystal system	monoclinic
Space group	P2 <sub>1</sub> /c
a/Å	13.5839(4)
b/Å	11.4816(3)
c/Å	16.0057(6)
β°	99.760(3)
Volume/Å <sup>3</sup>	2460.20(14)
Z	2
μ/mm <sup>-1</sup>	0.227
F(000)	1196.0
Crystal size/mm <sup>3</sup>	0.07 × 0.05 × 0.04
Radiation	Mo Kα (λ = 0.71073)
2θ range for data collection/°	4.388 to 63.098
Index ranges	-19 ≤ h ≤ 18, -16 ≤ k ≤ 16, -23 ≤ l ≤ 23
Reflections collected	46940
Independent reflections	7856 [R <sub>int</sub> = 0.0410, R <sub>sigma</sub> = 0.0267]
Data/restraints/parameters	7856/0/365
Goodness-of-fit on F <sup>2</sup>	1.030
Final R indexes [I ≥ 2σ (I)]	R <sub>1</sub> = 0.0933, wR <sub>2</sub> = 0.2437
Final R indexes [all data]	R <sub>1</sub> = 0.1243, wR <sub>2</sub> = 0.2656
Largest diff. peak/hole / e Å <sup>-3</sup>	1.01/-1.21

Table 2. Fractional Atomic Coordinates (× 10<sup>4</sup>) and Equivalent Isotropic Displacement Parameters (Å<sup>2</sup> × 10<sup>3</sup>).

Atom	x	y	z	U(eq)
S(1)	10026.4(11)	6480.0(12)	7375.6(8)	81.1(5)
O(1)	10156(2)	7679(3)	7735.7(19)	60.5(7)
C(25)	10889(6)	5550(5)	8038(4)	104(2)
C(26)	8930(6)	5871(7)	7694(4)	126(3)
F(1)	3952.5(16)	2579(2)	7652.5(16)	58.9(6)
F(2)	3985.6(18)	1995(2)	9282.6(19)	71.9(7)
F(3)	5229(2)	3134(2)	10547.4(16)	74.1(8)
F(4)	6474.3(19)	4793(2)	10131.8(15)	68.0(7)
F(5)	6433.1(15)	5385(2)	8506.9(15)	57.9(6)
F(6)	7869.1(12)	1674.3(16)	4252.2(12)	43.0(4)
F(7)	9736.1(14)	974.1(19)	4344.8(15)	55.1(5)
F(8)	10842.8(14)	4350(2)	5945.7(15)	58.6(6)
F(9)	8995.5(14)	4997.6(19)	5858.3(13)	51.0(5)
N(1)	4114.1(17)	5275(2)	5880.7(17)	37.7(5)
N(2)	6074.9(17)	4253(2)	5926.5(17)	37.8(5)
N(3)	11344.4(19)	2209(3)	5155(3)	61.7(9)
C(1)	3188.4(19)	5776(3)	5760(2)	35.7(6)
C(2)	2780(2)	5789(3)	6535(2)	39.5(6)
C(3)	3467(2)	5285(3)	7134(2)	41.6(7)
C(4)	4291(2)	4955(3)	6713(2)	38.5(6)
C(5)	5143(2)	4365(3)	7116(2)	41.2(7)
C(6)	5965(2)	4049(3)	6745(2)	40.4(6)
C(7)	6843(2)	3460(3)	7143(2)	45.3(7)
C(8)	7458(2)	3332(3)	6562(2)	43.5(7)
C(9)	6972.5(19)	3815(3)	5783(2)	37.3(6)
C(10)	7323.5(19)	3809(3)	5019(2)	35.5(6)
C(11)	5183(2)	4015(3)	8020(2)	42.6(7)
C(12)	4574(2)	3138(3)	8246(2)	47.3(8)
C(13)	4595(3)	2831(3)	9095(3)	54.1(9)

C(14)	5228(3)	3395(3)	9722(2)	53.2(9)
C(15)	5849(3)	4241(4)	9519(2)	52.6(9)
C(16)	5819(2)	4542(3)	8678(2)	47.1(8)
C(17)	8359.9(18)	3367(3)	5047.4(19)	35.6(6)
C(18)	8601.8(19)	2354(3)	4668.3(19)	36.5(6)
C(19)	9576(2)	1997(3)	4707(2)	42.2(7)
C(20)	10385(2)	2636(3)	5137(2)	46.3(8)
C(21)	10135(2)	3639(3)	5523(2)	44.3(7)
C(22)	9162(2)	3987(3)	5484(2)	40.5(6)
C(23)	11674(4)	2051(6)	4338(5)	105(2)
C(24)	12164(3)	2695(5)	5804(5)	111(3)

$$\text{Beq} = 8/3 \pi^2 (U_{11}(aa^*)^2 + U_{22}(bb^*)^2 + U_{33}(cc^*)^2 + 2U_{12}(aa^*bb^*) \cos \gamma + 2U_{13}(aa^*cc^*) \cos \beta + 2U_{23}(bb^*cc^*) \cos \alpha)$$
Table 3. Anisotropic Displacement Parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ).

Atom	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{23}$	$U_{13}$	$U_{12}$
S(1)	95.4(9)	89.8(9)	68.2(7)	-37.0(6)	42.7(6)	-56.5(7)
O(1)	49.5(14)	62.4(16)	68.1(17)	-16.5(14)	5.9(12)	-10.5(12)
C(25)	175(7)	53(3)	107(4)	9(3)	88(5)	4(3)
C(26)	139(6)	167(7)	85(4)	-47(4)	52(4)	-112(6)
F(1)	42.6(10)	53.0(12)	83.3(16)	1.2(11)	16.7(10)	-5.4(9)
F(2)	61.7(14)	55.9(13)	109(2)	27.5(13)	46.2(14)	12.0(11)
F(3)	89.5(18)	76.4(16)	63.9(14)	24.7(12)	34.7(13)	42.4(14)
F(4)	62.7(14)	83.1(17)	55.4(13)	-5.8(12)	1.7(11)	17.2(12)
F(5)	41.6(10)	67.2(14)	62.1(13)	5.3(11)	1.1(9)	-8.0(10)
F(6)	28.3(8)	43.3(10)	55.6(11)	-7.4(8)	1.5(7)	-3.3(7)
F(7)	37.4(9)	49.9(11)	79.0(15)	-2.4(10)	13.1(9)	10.9(8)
F(8)	28.7(9)	75.6(15)	66.8(13)	-2.2(11)	-5.7(8)	-16.8(9)
F(9)	38.3(9)	56.2(12)	58.0(12)	-15.6(9)	7.2(8)	-11.4(8)
N(1)	22.8(10)	41.3(13)	48.4(14)	2.8(11)	4.8(9)	0.6(9)
N(2)	23.9(10)	42.5(13)	47.0(14)	4.9(11)	5.8(9)	5.0(9)
N(3)	19.6(11)	70(2)	93(2)	4.5(18)	2.7(13)	12.6(12)
C(1)	22.4(11)	35.5(14)	48.8(16)	-2.8(12)	4.7(10)	-1.7(10)
C(2)	25.3(12)	44.0(16)	49.5(16)	-3.3(13)	7.5(11)	0.2(11)
C(3)	27.8(12)	47.8(17)	48.8(17)	1.4(13)	5.8(11)	2.8(11)
C(4)	25.4(12)	42.4(15)	47.9(16)	0.2(13)	6.3(11)	-0.7(10)
C(5)	29.0(13)	45.4(16)	48.8(17)	4.7(13)	5.8(11)	3.7(11)
C(6)	27.3(12)	44.5(16)	49.4(17)	5.9(13)	6.8(11)	3.6(11)
C(7)	29.4(13)	54.2(19)	52.5(18)	12.4(15)	7.0(12)	7.7(12)
C(8)	26.1(12)	51.1(17)	53.1(18)	7.8(14)	6.2(11)	5.3(12)
C(9)	20.2(11)	40.6(14)	51.2(16)	1.5(12)	5.7(10)	0.7(10)
C(10)	20.8(10)	36.0(13)	49.0(16)	-1.2(12)	3.6(10)	-0.8(9)
C(11)	28.1(12)	48.1(17)	52.6(18)	9.4(14)	9.6(12)	8.1(12)
C(12)	33.2(14)	44.7(17)	68(2)	6.5(15)	19.0(14)	8.0(12)
C(13)	45.1(17)	44.8(18)	80(3)	17.1(17)	31.7(17)	16.5(14)
C(14)	57(2)	55(2)	51.9(19)	12.6(16)	21.3(16)	26.1(17)
C(15)	43.5(17)	61(2)	54(2)	2.4(17)	8.9(15)	20.5(16)
C(16)	32.9(14)	53.2(19)	56.0(19)	7.9(15)	9.5(13)	7.1(13)
C(17)	18.6(10)	43.6(15)	43.7(15)	0.4(12)	2.9(9)	-1.6(10)
C(18)	21.1(11)	44.2(15)	42.9(15)	1.8(12)	2.0(10)	-0.4(10)
C(19)	28.3(12)	45.0(16)	53.7(18)	4.4(14)	8.7(12)	5.7(11)
C(20)	19.9(11)	57.1(19)	60.2(19)	11.8(16)	1.6(11)	4.3(12)
C(21)	22.0(11)	56.9(19)	51.3(18)	4.6(14)	-0.9(11)	-7.7(12)
C(22)	26.0(12)	48.3(17)	46.3(16)	-2.7(13)	3.9(11)	-6.6(11)
C(23)	47(2)	88(4)	188(7)	-14(4)	45(3)	12(2)
C(24)	34.4(19)	64(3)	214(8)	1(4)	-35(3)	6.0(19)

Table 4. Bond Lengths.

Atom	Atom	Length /Å	Atom	Atom	Length /Å
S(1)	O(1)	1.491(3)	C(3)	C(4)	1.452(4)
S(1)	C(25)	1.793(7)	C(4)	C(5)	1.400(4)
S(1)	C(26)	1.795(5)	C(5)	C(6)	1.400(4)
F(1)	C(12)	1.325(4)	C(5)	C(11)	1.495(5)
F(2)	C(13)	1.334(4)	C(6)	C(7)	1.423(4)
F(3)	C(14)	1.354(4)	C(7)	C(8)	1.360(5)
F(4)	C(15)	1.343(5)	C(8)	C(9)	1.421(4)
F(5)	C(16)	1.336(4)	C(9)	C(10)	1.385(4)
F(6)	C(18)	1.349(3)	C(10)	C(17)	1.490(4)
F(7)	C(19)	1.344(4)	C(11)	C(12)	1.390(5)
F(8)	C(21)	1.352(4)	C(11)	C(16)	1.382(5)
F(9)	C(22)	1.343(4)	C(12)	C(13)	1.399(5)
N(1)	C(1)	1.366(3)	C(13)	C(14)	1.370(6)
N(1)	C(4)	1.363(4)	C(14)	C(15)	1.361(6)
N(2)	C(6)	1.363(4)	C(15)	C(16)	1.384(5)
N(2)	C(9)	1.374(3)	C(17)	C(18)	1.376(4)
N(3)	C(20)	1.389(4)	C(17)	C(22)	1.387(4)
N(3)	C(23)	1.464(8)	C(18)	C(19)	1.376(4)
N(3)	C(24)	1.496(6)	C(19)	C(20)	1.401(5)
C(1)	C(2)	1.442(4)	C(20)	C(21)	1.376(5)
C(1)	C(10) <sup>1</sup>	1.405(4)	C(21)	C(22)	1.371(4)
C(2)	C(3)	1.350(4)			

Symmetry Operators: <sup>1</sup>1-X, 1-Y, 1-Z

Table 5. Bond Angles.

Atom	Atom	Atom	Angle /°	Atom	Atom	Atom	Angle /°
O(1)	S(1)	C(25)	107.4(3)	F(1)	C(12)	C(11)	119.9(3)
O(1)	S(1)	C(26)	107.4(3)	F(1)	C(12)	C(13)	118.7(3)
C(25)	S(1)	C(26)	95.2(4)	C(11)	C(12)	C(13)	121.4(4)
C(4)	N(1)	C(1)	104.9(2)	F(2)	C(13)	C(12)	119.2(4)
C(6)	N(2)	C(9)	110.0(2)	F(2)	C(13)	C(14)	120.8(4)
C(20)	N(3)	C(23)	116.9(4)	C(14)	C(13)	C(12)	120.0(3)
C(20)	N(3)	C(24)	118.0(4)	F(3)	C(14)	C(13)	120.5(4)
C(23)	N(3)	C(24)	111.2(4)	F(3)	C(14)	C(15)	119.5(4)
N(1)	C(1)	C(2)	111.3(3)	C(15)	C(14)	C(13)	120.0(3)
N(1)	C(1)	C(10) <sup>1</sup>	125.0(3)	F(4)	C(15)	C(14)	120.2(4)
C(10) <sup>1</sup>	C(1)	C(2)	123.7(3)	F(4)	C(15)	C(16)	120.2(4)
C(3)	C(2)	C(1)	106.6(3)	C(14)	C(15)	C(16)	119.6(4)
C(2)	C(3)	C(4)	106.0(3)	F(5)	C(16)	C(11)	119.5(3)
N(1)	C(4)	C(3)	111.2(3)	F(5)	C(16)	C(15)	117.6(3)
N(1)	C(4)	C(5)	125.1(3)	C(11)	C(16)	C(15)	122.9(3)
C(5)	C(4)	C(3)	123.6(3)	C(18)	C(17)	C(10)	124.7(2)
C(4)	C(5)	C(11)	117.9(3)	C(18)	C(17)	C(22)	115.4(2)
C(6)	C(5)	C(4)	126.0(3)	C(22)	C(17)	C(10)	119.9(3)
C(6)	C(5)	C(11)	116.1(3)	F(6)	C(18)	C(17)	119.7(2)
N(2)	C(6)	C(5)	126.0(3)	F(6)	C(18)	C(19)	118.2(3)
N(2)	C(6)	C(7)	107.0(3)	C(19)	C(18)	C(17)	122.1(3)
C(5)	C(6)	C(7)	127.0(3)	F(7)	C(19)	C(18)	117.8(3)
C(8)	C(7)	C(6)	108.1(3)	F(7)	C(19)	C(20)	119.9(3)
C(7)	C(8)	C(9)	108.1(3)	C(18)	C(19)	C(20)	122.3(3)
N(2)	C(9)	C(8)	106.8(3)	N(3)	C(20)	C(19)	118.8(3)
N(2)	C(9)	C(10)	126.7(3)	C(21)	C(20)	N(3)	126.0(3)
C(10)	C(9)	C(8)	126.5(3)	C(21)	C(20)	C(19)	115.2(3)
C(1) <sup>1</sup>	C(10)	C(17)	117.7(3)	F(8)	C(21)	C(20)	121.4(3)
C(9)	C(10)	C(1) <sup>1</sup>	126.1(2)	F(8)	C(21)	C(22)	116.4(3)
C(9)	C(10)	C(17)	116.1(3)	C(22)	C(21)	C(20)	122.2(3)

C(12)	C(11)	C(5)	121.4(3)	F(9)	C(22)	C(17)	119.4(3)
C(16)	C(11)	C(5)	122.4(3)	F(9)	C(22)	C(21)	117.7(3)
C(16)	C(11)	C(12)	116.2(3)	C(21)	C(22)	C(17)	122.8(3)

Symmetry Operators: <sup>1</sup>1-X, 1-Y, 1-Z

Table 6. Hydrogen Atom Coordinates ( $\text{\AA} \times 10^4$ ) and Isotropic Displacement Parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ).

Atom	x	y	z	U(eq)
H(25A)	11572.91	5747.23	7969.3	156
H(25B)	10750.57	4736.11	7874.16	156
H(25C)	10815.45	5658.37	8631.21	156
H(26A)	9000.58	5893.8	8313.13	190
H(26B)	8848.36	5062.5	7498.83	190
H(26C)	8343.07	6325.46	7443.04	190
H(2)	5635.2	4612.34	5546.16	45
H(2A)	2150.23	6093.97	6609.72	47
H(3)	3420.76	5169.59	7714.13	50
H(7)	6975.67	3202.43	7715.06	54
H(8)	8100.77	2980.85	6659.9	52
H(23A)	11104.16	1815.69	3910.79	157
H(23B)	12189.93	1446.77	4390.95	157
H(23C)	11947.61	2785.66	4165.87	157
H(24A)	12398.97	3430.4	5596.31	166
H(24B)	12718.62	2138.66	5906.1	166
H(24C)	11912.28	2835.04	6333.51	166

## X-ray structure determination of 5,15-bis(2,3,5,6-tetrafluoro-4-(dimethylamino)phenyl)-10,20-bis(pentafluorophenyl)porphyrin

Narimi FUJII and Haruo AKASHI

*Institute of Frontier Science and Technology, Okayama University of Science*

Crystal structure of 5,15-bis(2,3,5,6-tetrafluoro-4-(dimethylamino)phenyl)-10,20-bis(pentafluorophenyl)porphyrin ( $\text{H}_2\text{TFPP}-(\text{NMe}_2)_2$ ) has been determined by the X-ray structure analysis. Crystallographic data: crystal system monoclinic, space group  $\text{P2}_1/\text{c}$  (#88), Lattice parameters;  $a = 13.5839(4) \text{ \AA}$ ,  $b = 11.4816(3) \text{ \AA}$ ,  $c = 16.0057(6) \text{ \AA}$ ,  $V = 2460.20(14) \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 2$ ,  $RI = 0.0933$ ,  $wR = 0.2437$ .  $\text{H}_2\text{TFPP}-(\text{NMe}_2)_2$  has the structure in which the two of the four pentafluorophenyl groups attached to the porphyrin ring of  $\text{H}_2\text{TFPP}$  are replaced by tetrafluoro-N,N-dimethylaniline moiety. X-ray diffraction analysis of  $\text{H}_2\text{TFPP}-(\text{NMe}_2)_2$  revealed that the two tetrafluoro-N,N-dimethylaniline moieties are located in opposite positions each other.