

低温イオン移動度質量分析によるアルキルアンモニウム–ジベンゾクラウンエーテル錯体の構造研究

(東北大理¹・東北大院理²) ○岸 天翔¹・渡辺 喬介²・伊藤 亮佑²・大下 慶次郎²・美齊津 文典²

Structural study on dibenzo-crown ether complexes with alkylammonium using cryogenic ion mobility-mass spectrometry

(¹Faculty of Science, Tohoku University, ²Graduate School of Science, Tohoku University)

○Tensho Kishi,¹ Kyosuke Watanabe,² Ryosuke Ito,² Keijiro Ohshimo,² Fuminori Misaizu²

Crown ethers have a cyclic polyether structure and are representative compounds that form host-guest complexes. We already studied the conformation of complexes of dibenzo-crown ethers with ions such as K^+ , Ca^{2+} , NH_4^+ , $(CH_3)_xNH_{4-x}^+$ ($x = 1-4$) using cryogenic ion mobility-mass spectrometry and reported several conformational isomers coexist¹⁻³). In this study, we determined the structures of dibenzo-crown ether complexes with various alkylammonium molecules. The open, closed, and boat structures with different benzene-benzene distances were observed for the complexes with dimethylammonium, while only the boat structure was observed with dipropylammonium. These results suggest that the bulky alkyl chains restrict the conformation of the complexes.

Keywords : Host-guest complexes; Crown ethers; Ion mobility-mass spectrometry

クラウンエーテルは環状ポリエーテル構造を有し、ホスト–ゲスト錯体を形成する代表的な化合物である。これまで我々は、低温イオン移動度質量分析を用いてジベンゾクラウンエーテルと K^+ , Ca^{2+} , NH_4^+ , $(CH_3)_xNH_{4-x}^+$ ($x = 1-4$)などのイオンとの錯体の立体配座を研究し、2つのベンゼン環の間の距離が長い open 構造、短い closed 構造、中間程度の boat 構造など複数の異性体が共存することを報告した¹⁻³)。本研究では、数種類のアルキルアンモニウムイオンとジベンゾクラウンエーテルとの錯体について、低温イオン移動度質量分析と量子化学計算を併用することによりその構造を同定した。ジメチルアンモニウムとの錯体では open 構造と closed 構造に加えて boat 構造などが観測されたのに対して、ジプロピルアンモニウムとの錯体では boat 構造のみが観測された (Fig. 1)。これによって、かさ高いアルキル鎖が錯体の立体配座を限定することが示唆された。

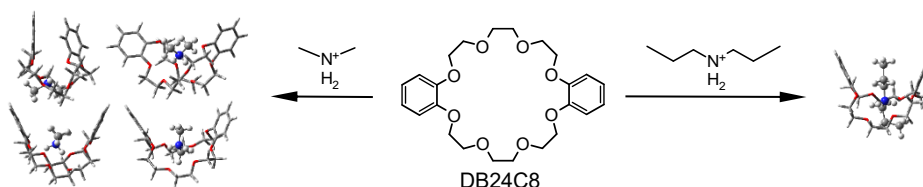


Fig. 1 The structures of dibenzo-24-crown-8 complexes with dimethylammonium and dipropylammonium.

- 1) K. Ohshimo *et al.*, *EPJ Techn. Instrum.* **10**, 11 (2023).
- 2) R. Ito *et al.*, *J. Phys. Chem. A* **126**, 4359 (2022).
- 3) K. Watanabe *et al.*, The 104th CSJ Annual Meeting, A1455-2am-05 (2024).