

双方向ゲスト包接型スピロボラートシクロファン複合体の溶液構造

○川幡 正俊¹, 角本 久美子¹, 細川 明日香¹, 檀上 博史², 山口 健太郎¹ (¹徳島文理大香川薬, ²甲南大理工)

【緒言】 我々はピナフチル骨格を有する双方向ゲスト包接型スピロボラートシクロファン化合物の研究を行っており、カチオン認識能を評価する目的で、**1**とアンモニウム、ピリジニウムとの複合体の結晶を調製し、その結晶構造について今までに報告している。今回新たにこれら複合体の溶液中での挙動をNMR、質量分析をもちいて解析したのでその結果について発表する。

【方法・結果】 2, 2', 3, 3'-テトラヒドロキシピナフチルとホウ酸をDMF中、加熱還流下、反応させることでほぼ定量的に環化3量化する**1**・**3 a**をサイズ、形の異なるアンモニウム(**b**, **c**)、ビスピリジニウム(**d**)塩と反応させ、カチオン交換されたそれぞれ**1**・**3 b**, **1**・**3 c**, **1**・**a**・**d**の結晶を適当な溶媒に溶解させ、Diffusion-Ordered NMR (DOSY NMR), Cold Spray Ionization MS (CSI-MS)にてその溶液中での挙動について解析した。

その結果、結晶中と同様、溶液中でも**1**と各種カチオンとの間で相互作用を有する複合体を形成していることが示唆された。