

多数のカルボキシ基をもつシクロデキストリン誘導体によるカチオン認識と超分子形成

(筑波大数理物質¹・筑波大 TREMS²) ○桑原 正宗¹・中村 貴志^{1,2}・鍋島 達弥^{1,2}
 Cation Recognition and Supramolecular Formation of Cyclodextrin Derivatives Bearing Multiple Carboxy Groups (¹*Faculty of Pure and Applied Sciences, University of Tsukuba*,
²*Tsukuba Research Center for Energy Materials Science (TREMS), University of Tsukuba*)
 ○Masamune Kuwabara,¹ Takashi Nakamura,^{1,2} Tatsuya Nabeshima^{1,2}

A cyclodextrin derivative **1** possessing carboxy groups directly attached to the 5 position of each pyranose ring forms a dimer by hydrogen bonds between the carboxy groups in its crystal structure (**Figure a**).¹⁾ Thus, molecular recognition utilizing the cavity and formation of supramolecular structures are expected. We have found that the cyclodextrin derivative bearing multiple carboxy groups interacts with secondary ammoniums in organic solvents. ROESY and DOSY analysis suggested the formation of a [3]pseudorotaxane formed from two molecules of **1** as ring components and one molecule of a secondary ammonium as an axle component (**Figure b**). In this presentation, we discuss the details of the molecular recognition mechanisms and the supramolecular structures.

Keywords : Molecular Recognition; Carboxy Group; Cyclodextrin; Supramolecule; Hydrogen Bond

各ピラノース環の 5 位に直接結合したカルボキシ基をもつシクロデキストリン誘導体 **1** は、結晶構造中でカルボキシ基同士の水素結合により 2 量体を形成することが知られており (**Figure a**)¹⁾、その内孔を活かした分子認識や超分子形成が期待される。我々は、多数のカルボキシ基をもつこのシクロデキストリン誘導体が 2 級アンモニウムと有機溶媒中で相互作用することを見出した。ROESY や DOSY による解析の結果、輪成分として 2 分子の **1** と軸成分として 1 分子の 2 級アンモニウムから構成される [3]擬ロタキサンの形成が示唆された (**Figure b**)。発表では、分子認識挙動や形成する超分子構造の詳細について議論する。

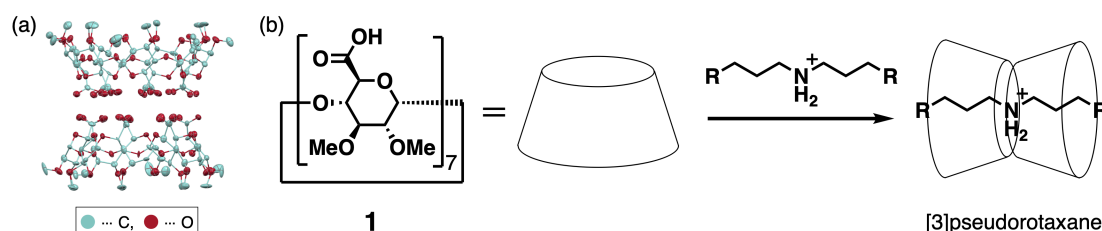


Figure. (a) Structure of dimer of **1** determined by X-ray crystallography.¹⁾

(b) [3]pseudorotaxane formed from *per*-carboxy-cyclodextrin **1** and a secondary ammonium.

1) T. Nakamura, S. Yonemura, T. Nabeshima, *Chem. Commun.* **2019**, 55, 3872.