

## イオン移動度質量分析によるクリプタンド[2.2.2]錯体の異性体分離

(東北大理<sup>1</sup>・東北大院理<sup>2</sup>) ○角田 健吾<sup>1</sup>・何 西<sup>2</sup>・美齊津 文典<sup>2</sup>・大下 慶次郎<sup>2</sup>  
 Isomer Separation of Cryptand[2.2.2] Complexes by Ion Mobility-Mass Spectrometry  
 (<sup>1</sup>Faculty of Science, Tohoku University, <sup>2</sup>Graduate School of Science, Tohoku University)  
 ○Kengo Tsunoda,<sup>1</sup> Xi He,<sup>2</sup> Fuminori Misaizu,<sup>2</sup> Keijiro Ohshimo<sup>2</sup>

Cryptand[2.2.2](C222) has a cavity in the molecule, which encapsulates an ion to form various complexes. The size of the cavity in C222 is almost equal to the diameter of  $K^+$ . Previous X-ray structural analysis has shown that when the ion which is smaller than  $K^+$  is encapsulated in C222, the coordination number to the ion changes. In addition, various isomers of  $H^+(C222)$  have been observed in the liquid phase. In the present study, from arrival time distributions (ATDs) of ion mobility-mass spectrometry (IM-MS), we studied the structures and isomer separation of  $Na^+$ ,  $Ag^+$ ,  $H^+(C222)$  in the gas phase. By fitting the observed ATDs with Gaussian functions, it was found that each ATD consisted of two peaks, which indicates the presence of at least two isomers for each complex.

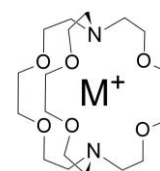
**Keywords :** Ion mobility-mass spectrometry; Host guest chemistry; Cryptand

クリプタンド[2.2.2] (C222) 分子はイオンを内包する空孔を持ち、様々な錯体を形成する (Fig. 1)。C222 の空孔の大きさは  $K^+$  の直径とほぼ一致するため、 $K^+(C222)$  錯体は特に安定である。一方、 $K^+$  よりも小さいイオンを内包する場合、 $K^+(C222)$  と比べ、イオンへの配位数が減少することが X 線結晶構造解析により知られている<sup>1)</sup>。また  $H^+(C222)$  は、液相で様々な異性体が観測されている<sup>2)</sup>。本研究では、 $K^+$  よりも小さい  $Na^+$ ,  $Ag^+$  と C222 の錯体及び  $H^+(C222)$  の気相における構造と異性体分離を、イオン移動度質量分析(IM-MS)を用いて調べた。

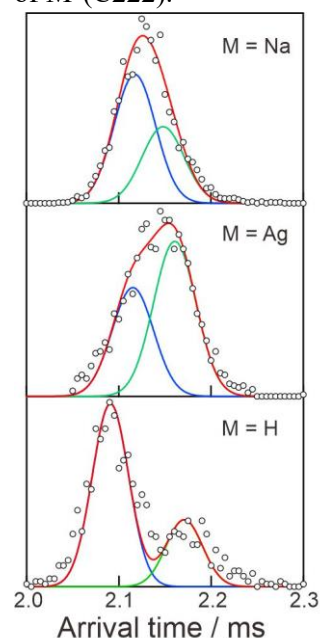
Fig. 2 に IM-MS で得られた到達時間分布 (ATD) を示す。装置分解能で決まる幅をもつガウス関数で ATD をフィッティングしたところ、それぞれの ATD が 2 本のガウス関数で再現された。よって、各錯体には少なくとも 2 種類の異性体が共存することが分かった。

1) I. A. Guzei *et al.*, *Acta Crystallogr., Sect.B: Struct. Sci.* **2007**, 63, 93.

2) P. B. Smith *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **1981**, 103, 6044



**Fig.1.** Schematic drawing of  $M^+(C222)$ .



**Fig. 2.** ATDs of  $M^+(C222)$   
 M = Na, Ag, H.