

ピリジニウムアミド基をもつシクロデキストリン誘導体による水中でのアニオン認識機構に関する研究

(筑波大理工¹・阪大院理²・北里大理³・KISTEC⁴・筑波大数理物質⁵) ○高柳 駿斗¹・中畑 雅樹²・渡辺 豪^{3,4}・中村 貴志⁵

Research on Anion Recognition Mechanism in Water by Cyclodextrin Derivatives Bearing Pyridinium Amide Groups (¹*School of Science and Engineering, University of Tsukuba*, ²*Graduate School of Science, Osaka University*, ³*School of Science, Kitasato University*, ⁴*Kanagawa Institute of Industrial Science and Technology*, ⁵*Faculty of Pure and Applied Sciences, University of Tsukuba*) ○Hayato Takayanagi,¹ Masaki Nakahata,² Go Watanabe,^{3,4} Takashi Nakamura⁵

Cyclodextrin derivatives possessing amide groups directly attached to 5 position of each pyranose ring recognizes anions by multipoint hydrogen bonds with the amide groups.¹⁻³⁾ Aiming at anion recognition in water, we have designed amide cyclodextrin derivative **1**⁷⁺ bearing *N*-methyl pyridinium groups, and have synthesized it as a trifluoromethanesulfonate salt. **1**(OTf)₇ formed a 1:1 complex with an anion such as phenylphosphonate by encapsulating it in the cavity of cyclodextrin's macrocyclic framework. Meanwhile, **1**(OTf)₇ was found to show selectivity, as it did not bind phenylsulfonate or benzoate ions. We will discuss the anion recognition mechanism of **1**(OTf)₇ based on various experimental results in the presentation.

Keywords : Molecular Recognition; Amide; Cyclodextrin; Supramolecule; Hydrogen Bond

各ピラノース環の 5 位に直接結合したアミド基をもつシクロデキストリン誘導体は、アミド基からの多点水素結合でアニオンを認識する¹⁻³⁾。我々は、水中でのアニオン認識を目指して、*N*-メチルピリジニウム基を導入したアミドシクロデキストリン誘導体 **1**⁷⁺を設計し、これをトリフルオロメタンサルホン酸塩として合成した。**1**(OTf)₇はフェニルリン酸などのアニオンを水中でシクロデキストリン環状骨格の内孔に包接して 1:1 複合体を形成した。一方で、**1**(OTf)₇はフェニルスルホン酸イオンや安息香酸イオンとは結合せず、選択性をもつことが明らかとなった。発表では、種々の実験結果に基づき、**1**(OTf)₇のアニオン認識機構について議論する。

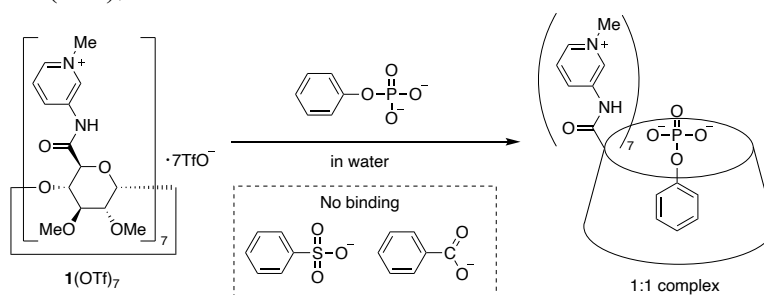


Figure. Structure of amide cyclodextrin derivative **1**⁷⁺ and its anion recognition in water

- 1) T. Nakamura, S. Yonemura, T. Nabeshima, *Chem. Commun.* **2019**, 55, 3872.
- 2) S. Yonemura, T. Nakamura, T. Nabeshima, *Chem. Lett.* **2020**, 49, 493.
- 3) T. Nakamura, S. Yonemura, S. Akatsuka, T. Nabeshima, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, 60, 3080.