

極低温・気相分光による超分子化学の研究

(広島大院・理) 井口 佳哉

y-inokuchi@hiroshima-u.ac.jp

気相分光は、溶媒効果などスペクトルをブロード化させる要因を可能な限り排除することで、原子、分子やその集合体のエネルギー状態を高い分解能で決定できる特長がある。我々は、気相分光によりホスト-ゲスト化合物、超分子化合物の高分解能スペクトルを観測し解析することにより、これらの化合物が発揮する特殊な機能（分子認識、ゲスト選択性など）の分子科学的な起源を明らかにしたいと考え、研究を進めてきた。本講演では、ホスト分子の中でも特に有名なクラウンエーテルについて我々が最近得た結果を示す[1-4]。すでに膨大な研究例があり手垢にまみれた感のあるクラウンエーテルについて、気相分光によりどんな新しい知見が得られるかを紹介したい。

図1に我々が開発した極低温・気相分光のための装置図を示す。我々は主にイオンをゲストとした錯イオンを研究対象としている。孤立気相状態とした錯イオンの吸収スペクトルは、光吸収に伴う解離を利用したアクションスペクトルとして観測する。錯イオンはエレクトロスプレーイオン源で生成させ、真空中で溶媒蒸発管などを經由して Paul 型極低温イオントラップ (~4 K) に導入される。ここで錯イオンは気体（孤立状態）のまま冷却される。その結果、溶媒効果や熱振動によるスペクトルのブロード化が抑制される。冷却した錯イオンに紫外レーザを照射し、錯イオンがその光を吸収すると解離イオンが生じる。この解離イオンを飛行時間型質量分析計により検出する。紫外レーザの波長に対して、解離イオンの収量をプロットすることにより、錯イオンの吸収（光解離）スペクトルを得ることができる。また、もう一台の紫外レーザあるいは赤外レーザを併用することにより、異性体分離した紫外・赤外スペクトルの観測も可能である。

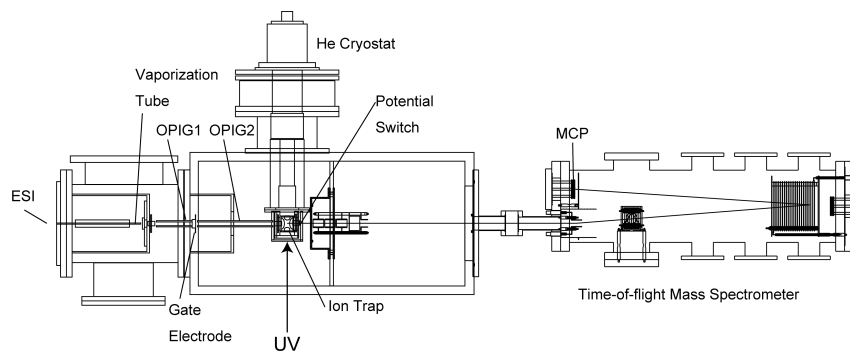


図1 極低温・気相分光装置

我々はこの装置を用いて、クラウンエーテルの金属イオン錯体[1, 2, 4]や擬ロタキサン[3]の極低温・気相条件下での光解離スペクトルを得た。講演ではこれらのスペクトルを示し、超分子化合物の幾何（配座）構造、電子構造や、構造と機能の関係などについて、スペクトルの解析により得られた知見を紹介する。

○参考文献
[1] 井口佳哉, 化学と工業, **2017**, *70*, 892. [2] Kida et al., ChemPhysChem, **2018**, *19*, 1331 (Cover Features). [3] Kida et al., Phys. Chem. Chem. Phys., **2018**, *20*, 18678. [4] Inokuchi et al., J. Am. Chem. Soc., **2011**, *133*, 12256.

○参考文献

[1] 井口佳哉, 化学と工業, **2017**, *70*, 892. [2] Kida et al., ChemPhysChem, **2018**, *19*, 1331 (Cover Features). [3] Kida et al., Phys. Chem. Chem. Phys., **2018**, *20*, 18678. [4] Inokuchi et al., J. Am. Chem. Soc., **2011**, *133*, 12256.