

NanoESI-MS/MSによる 分子間相互作用の新規評価

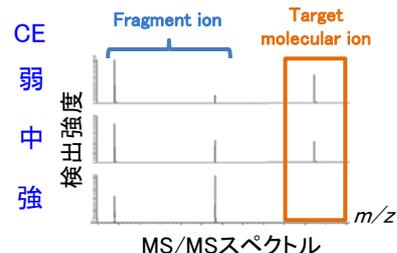
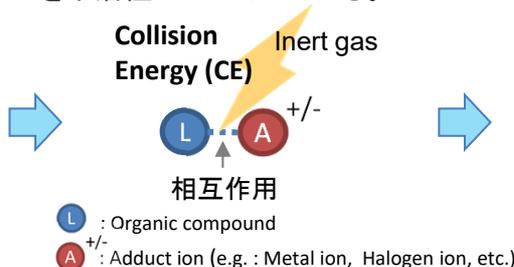
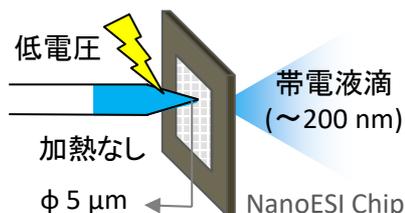
分子間、分子-原子間の相互作用は、時として製品の性能や品質に大きな影響を与えることから、相互作用の評価は製品開発やトラブル解決に有効な手段となる。東レリサーチセンターではNanoESI-MS/MSを用いて実試料で相互作用を測定できる新手法を開発した。ここではその評価事例を紹介する。

相互作用を評価する原理

NanoESIは非常にソフトなイオン化法、不安定な化合物でもイオン化可能。

NanoESI-MSでの検出対象イオンを不活性ガスと衝突させる。

MS/MSにてCE値の増加により対象イオンを解離させ、相互作用を解消する。



MS/MS測定に用いたCE値および、対象の分子イオンまたはフラグメントイオンの検出強度により相互作用を評価。

評価事例

➤ 対象: 銀-アミン錯体

銀ナノ粒子インクの製造原料である銀-アミン錯体において、Ag⁺とアミンの相互作用の強さが製品の導電性に大きく寄与する。相互作用バランスの良い構造の理解が重要となる。

単座配位子錯体

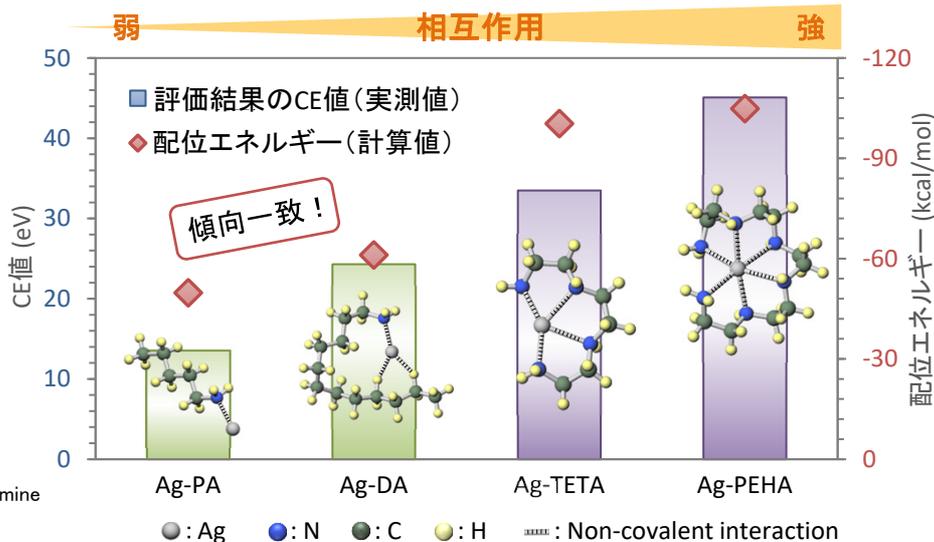
- Ag-PA (Pentylamine, Ag-C₅H₁₃N)
- Ag-DA (Dodecylamine, Ag-C₁₂H₂₇N)

多座配位子錯体

- Ag-TETA (Ag-C₆H₁₈N₄)
- Ag-PEHA (Ag-C₁₀H₂₈N₆)

TETA: Triethylenetetramine, PEHA: Pentaethylenhexamine

相互作用の評価結果 & 量子化学計算による検証



評価結果に関する考察

➤ 銀-アミン単座配位子錯体

アルキル基が長くなると、構造の柔軟性によりAg⁺がN原子, H原子と相互作用する(折りたたみ構造)。^[1]

⇒ Ag⁺とアミンの相互作用が強くなる。

[1] Duez, Quentin, et al. *Int. J. Mass Spectrom.* 2019, 435, 34–41

➤ 銀-アミン多座配位子錯体

アミンのアミノ基が多くなると、Ag⁺とアミノ基との配位座数が多くなる。

⇒ Ag⁺とアミンの相互作用が強くなる。

☆ NanoESI-MS/MSを用いて分子-分子(原子)間の相互作用の実測が可能!

本方法のメリット

- ✓ 有機金属錯体に限らず、ハロゲンイオン、金属イオン、溶媒イオン等の様々なイオンと分子との相互作用を有する実試料でも評価可能!
- ✓ 複数の成分が共存する場合や、微量の試料量でも評価可能!
- ✓ 製品開発時の材料選択や添加剤の作用機構の調査などに適用可能!