

分子内グルコース運動による  $\gamma$ -シクロデキストリン二量体の合成と物性

(埼大院理工) ○大山 井郷・松田 望・石丸 雄大

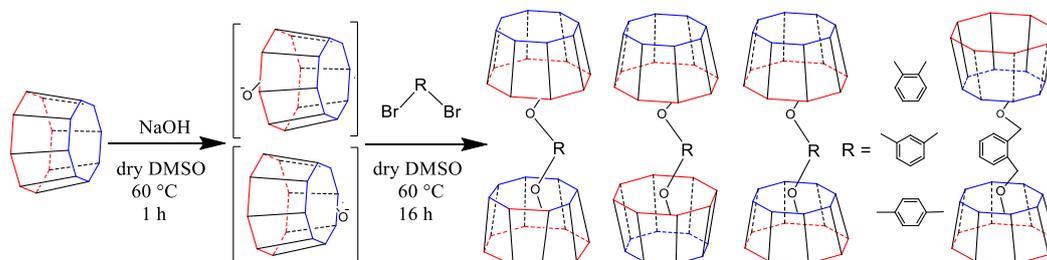
Synthesis of  $\gamma$ -cyclodextrin dimer by intramolecular glucose rotation (*Graduate School of Science and Engineering, Saitama University*) ○Isato Ohyama, Nozomu Matsuda, Yoshihiro Ishimaru

The syntheses and characterization of CD dimer were attract much attention for the artificial molecular design. The evaluation of several CD-dimers to guest molecule were determined by isothermal titration calorimetry analysis. In this study, the reactions of  $\gamma$ -CD with *o*-xylene dibromide at 60 °C were occurred. At 60 °C, four type of  $\gamma$ -CD dimers were detected by TOF-MS analysis. The detail of the molecular structures of obtained  $\gamma$ -CD-dimer will be discussed.

*Keywords* : Cyclodextrin dimer; Hydrophobic cavity; Molecular recognition

シクロデキストリン(CD)は、円筒状の立体構造をとる環状オリゴ糖である。1分子中に存在するグルコース単位の数により、それぞれ  $\alpha$ -CD(6 単位)、 $\beta$ -CD(7 単位)、 $\gamma$ -CD(8 単位)と呼ばれている。また、 $\alpha$ -CD、 $\gamma$ -CD は二級水酸基同士の分子内水素結合が部分的であるため、 $\beta$ -CD とは反応性が異なることが知られている。本発表では、 $\gamma$ -CD とキシレンジブロミドをリンカーとした新規二量体の合成を行ったのでその詳細を発表する。

$\gamma$ -CD 二量体の合成は、DMSO 中で  $\gamma$ -CD の水酸基を過剰な NaOH で脱プロトン化し、*p*-, *m*-, *o*-キシレンジブロミドをリンカーとして 60°Cの反応温度で 16 時間行った。

Scheme 1 Synthesis of  $\gamma$ -CD

その後、反応液を中和、透析、濃縮、再結晶を行い、HPLC を用いて  $\gamma$ -CD 二量体の単離精製を試みた。分離した化合物を TOF-MS および NMR により構造の確認を行ったところ、2 位間で結合をした Head-to-Head 型 CD 二量体と、2 位間で結合して分子に対称性のない擬 Head-to-Tail 型  $2,6^R$ -CD 二量体、2 位と 6 位が結合した Head-to-Tail 型  $2,6$ -CD 二量体の 3 種類の二量体を確認した。また、*o*-キシレンジブロミドを用いた場合のみ、6 位間で結合した Tail-to-Tail 型  $6,6$ -CD 二量体も合成されることを確認したので反応機構の詳細について報告する。