

$O_2^{\cdot -}$ とベンゼントリオールの反応機構へ OH 基の位置が及ぼす影響の検証

(京都工繊大 分子化学) 小畑 瑠美・土屋 昂輝・中野 涼汰・○三宅 祐輔・田嶋 邦彦・金折 賢二

Investigation for effects of the position of OH groups on the reaction mechanism of $O_2^{\cdot -}$ and benzenetriols (*Faculty of Molecular Chemistry and Engineering, Kyoto Institute of Technology*) Rumi Kobata, Kouki Tsuchiya, Ryota Nakano, ○Yusuke Miyake, Kunihiro Tajima, Kenji Kanaori

A benzenetriol with OH groups at 1,2,4 positions and $O_2^{\cdot -}$ were rapidly mixed in DMSO and observed directly by stopped-flow ESR and absorption spectroscopy. Structures of the radical species in the reaction intermediate and the reaction mechanism were determined on the change in the spectra due to the mixing ratio. We will discuss the effects of substitution positions of OH groups on reactions with $O_2^{\cdot -}$ by comparison of the reaction mechanism for benzenetriol with OH groups at the 1,2,3 positions (pyrogallol).

Keywords : Stopped-flow ESR spectroscopy, Benzenetriol (Polyphenol), superoxide radical, Antioxidant reaction, Radical reaction mechanism

ポリフェノールは OH 基を複数有するベンゼンを基本骨格とする化合物の総称であり、高い抗酸化能を示すため、様々な疾患の原因となる活性酸素種の失活、材料劣化や副反応を防ぐ重合禁止剤としての利用等、幅広い分野において注目される。その抗酸化能は OH 基の個数、構造の違いにより大きく変化するため、抗酸化能の評価、活性酸素種との反応機構の解明、それらの因果関係の追求に関する研究が進められている。¹⁾ 本研究では 1,2,4 位に OH 基を有するベンゼントリオールに着目し、酸素の一電子還元で生じる活性酸素種 $O_2^{\cdot -}$ との反応機構の解明を目指した。両者を急速混合させることで生じる短寿命ラジカル種をストップフロー ESR および吸収分光法によって観測し、1,2,3 位に OH 基を有するベンゼントリオール²⁾では見られなかった中性ラジカル種由来の信号検出に至った。 $O_2^{\cdot -}$ とベンゼントリオールの反応機構へ OH 基の位置が及ぼす影響について議論を行う予定である。

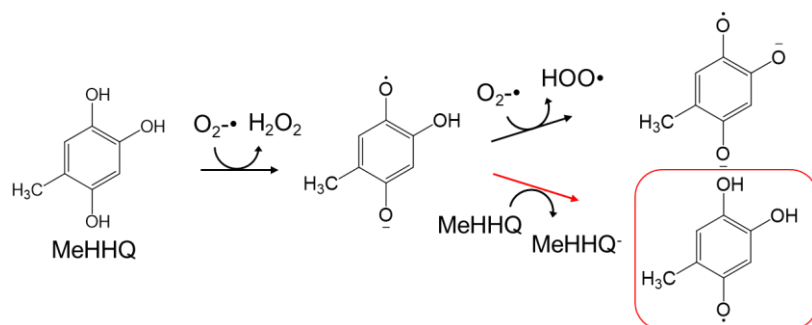


Fig. Prediction of reaction mechanism between 1,2,4-benzenetriol and $O_2^{\cdot -}$.

- 1) S. Quideau *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **50**, 586 (2011).
- 2) K. Kuwabara, K. Tajima *et al.*, *Chem. Lett.*, **51**, 431 (2022).