

芳香環ボウルによるステロイドのカルボニル基識別と蛍光検出

(東工大 化生研) ○青木達哉・岸田夏月・吉沢道人

Carbonyl-based Recognition and Fluorescent Detection of Steroids by a Polyaromatic Bowl (*Lab. for Chem. & Life Sci., Tokyo Tech*) ○Tatsuya Aoki, Natsuki Kishida, Michito Yoshizawa

Here we report the selective recognition of steroids with multiple carbonyl groups and their fluorescent detection by a polyaromatic bowl in water. The binding order toward steroids was related to the structure of the A ring: i.e., cyclohexenone > cyclohexanol > phenol frameworks. Among them, adrenosterone with three carbonyl groups was most strongly bound by the bowl in a 2:2 host-guest fashion. The turn-on fluorescent detection of adrenosterone was also demonstrated by using a coumarin-loaded bowl. **Keywords:** Molecular Bowl, Carbonyl Group, Steroid, Selective Recognition, Fluorescence Detection

今回、共有結合性の芳香環ボウル **1** (左上図; *Chem. Commun.* **2013**, 49, 1630–1632) を利用することで、水中・室温で、複数のカルボニル基を有するステロイドの選択的捕捉とそのターンオン型蛍光検出に成功した。まず、ステロイドを A 環の構造に基づき 3 つに分類して競争実験を行うと、A 環がシクロヘキサノン > シクロヘキサノール > フェノールの順に、ボウル **1** に強く捕捉されることが明らかになった (下図上)。また、A, C, D 環にカルボニル基を有するアドレノステロン (ADS) が高選択的に捕捉され、最大の結合親和性を示した ($K_a = 5.7 \times 10^5$)。NMR および ITC 分析から、**1** の 2 量化カプセルが 2 分子の ADS を内包した 2:2 複合体を形成することが明らかになった。さらに、クマリン C337 を内包した **1** の水溶液に ADS を添加することで、短時間でのターンオン型蛍光検出に成功した (下図下)。

