

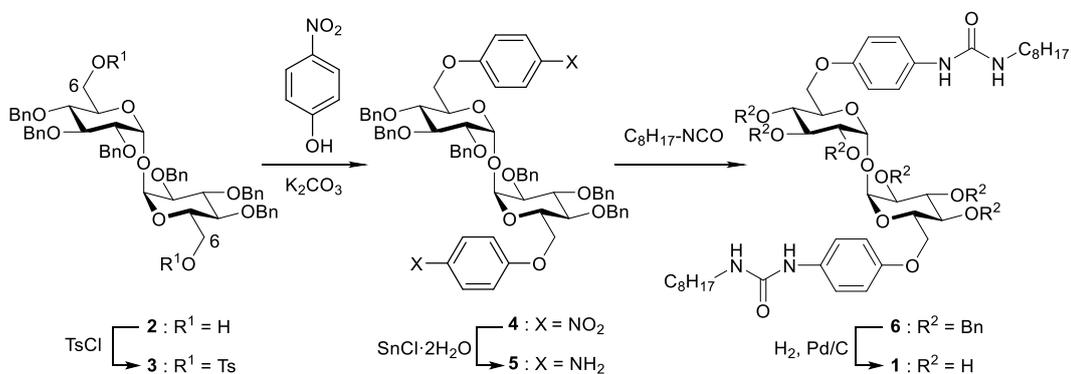
## 逆ボラ型両親媒性ビスウレアの合成とゲル化能評価

(明治薬大<sup>1</sup>) ○佐藤奎太<sup>1</sup>・木村真也<sup>1</sup>・横屋正志<sup>1</sup>・山中正道<sup>1</sup>Gelation Abilities of a Synthesized Reverse Bola-amphiphilic Bis-urea (<sup>1</sup>Meiji Pharmaceutical University) ○Keita Sato,<sup>1</sup> Shinya Kimura,<sup>1</sup> Masashi Yokoya,<sup>1</sup> Masamichi Yamanaka<sup>1</sup>

We designed a reverse bola-amphiphilic bis-urea **1** as a novel low-molecular-weight gelator, based on symmetrical structure of trehalose. Compound **1** contains a hydrophilic trehalose unit with hydrophobic alkyl ureido groups as terminal groups. Known compound **2** was synthesized from commercially available trehalose in 3 steps. *p*-Toluenesulfonylation of **2**, followed by nucleophilic substitution reaction of **3** with *p*-nitrophenol afforded compound **4**. Chemoselective reduction of NO<sub>2</sub> groups of **4** by tin (II) chloride gave amine **5**. Condensation of **5** with octyl isocyanate afforded urea **6**. Finally, deprotection of the six benzyl groups in **6** gave **1**. The gelation abilities of **1** was evaluated using various solvents. **1** formed supramolecular gels with alcohols, such as 2-propanol and 2-butanol.

*Keywords* : Supramolecular gel; Reverse bola-amphiphile; Urea ; Self-assembly

超分子ゲルは、低分子化合物が非共有結合を駆動力に自己集合して形成する機能性材料である。超分子集合体の形成において、分子に対称性を導入することが有効であることを踏まえ、我々は二糖のトレハロースを基盤とする逆ボラ型両親媒性ビスウレア **1** を分子設計した。**1** は市販のトレハロースから計 8 工程の変換により合成した。まずトレハロースから既知化合物 **2** を 3 段階で合成した<sup>1)</sup>。続いて **2** の 6 位水酸基を *p*-トルエンсульホニル (Ts) 化し、化合物 **3** とした後、*p*-ニトロフェノールを作用させ、化合物 **4** を得た。2 価の塩化スズを用いて **4** のニトロ基を選択的に還元した後、生じたアミノ基をイソシアヌ酸オクチルと縮合させ、ウレイド基を有する化合物 **6** を得た。最後にベンジル (Bn) 基の脱保護を行い、**1** を合成した。**1** の各種溶媒に対するゲル化能を調査し、**1** が 2-プロパノールや 2-ブタノールのようなアルコール系溶媒をゲル化することを明らかにした。



1) A. J. Minnaard et al, *Org. Lett.* **2019**, *21*, 5126.