

ガラクトース残基を有するヨード造影剤の合成と機能

(上智大学¹・聖マリアンナ医科大学²) ○木檜 陽大¹、森谷 愛美¹、窪田 棕¹、及川 律子²、南部 伸孝¹、松本 伸行²、鈴木 由美子¹

Synthesis of Iodinated Contrast Agents Bearing Galactose Residues and Their Functions. (¹*Fac. Sci. Technol, Sophia University*, ²*St. Marianna University School of Medicine*) ○Akihiro Kogure¹, Megumi Moriya¹, Ryo Kubota¹, Ritsuko Oikawa², Shinkoh Nanbu¹, Nobuyuki Matsumoto², Yumiko Suzuki¹

Novel iodinated contrast agents were designed to reduce the side effect, contrast nephropathy. Three galactose residues that bind specifically to asialoglycoprotein receptors located on hepatocytes were tethered to the triiodobenzene core aiming for the excretion via the liver.

Galactose-derived amine **1** were attached to triiodobenzene **2** thorough condensation reaction, followed by deacetylation to afford **MEG-3,4** and **KOG-1**.

Since the yields were low, an alternative route was also planned, in which the ether chain was first introduced to **2**, and then the galactose residue was attached followed by deacetylation to obtain **KOG-1**. The results of the uptake test of the compounds by hepatic cells and of molecular dynamic calculation in water will also be presented.

Keywords : Contrast Agent, Galactose, Asialoglycoprotein Receptor, Triiodobenzene

副作用である造影剤腎症を軽減するため、新規ヨード造影剤の合成を行った。肝臓を経る排泄を期待し、肝細胞のアシアロ糖タンパク質レセプターに特異的に結合するガラクトース残基を造影剤分子に付与した。リンカーの長さによる肝細胞への取り込みに違いが生じるかを検証するため、エチレングリコール鎖の異なる誘導体を3種類合成した。

基本骨格であるトリヨードベンゼンの誘導体 **2** の1分子に対し、3分子のガラクトース由来アミン体 **1** を縮合反応にて結合させた。次に脱アセチル化し **MEG-3,4** 及び **KOG-1** を得た。しかし、収率が低かったため、合成経路の改良も検討中である。即ち、初めにエーテル鎖と **2** を縮合させた後、ガラクトースを結合させ、脱アセチル化することで **KOG-1** を得る予定である。合成に成功した **MEG-3** は肝細胞内に取り込まれることを確認した。また、水溶液中での分子動力的シミュレーションについても報告する。

