

ナフタレンを架橋基として持つ β -シクロデキストリン二量体の合成

(埼玉大学) ○鈴木 滉太・石丸 雄大

Syntheses and inclusion ability of β -cyclodextrin dimers with naphthalene linker(*Saitama University*) ○Kouta Suzuki, Yoshihiro Ishimaru

In our laboratory, the synthesizing and evaluation of CD-dimer have been working. In a previous study, the glucose units, which substituted in the linker at 80 °C, have been rotated in the synthesis of β -CD dimers with a *p*-xylene linker¹⁾. In the present study, the inclusion ability of the dimer obtained from the reaction using 1,4-dimethylnaphthalene as a linker, which is more bulky than the vacancy of β -CD, was estimated.

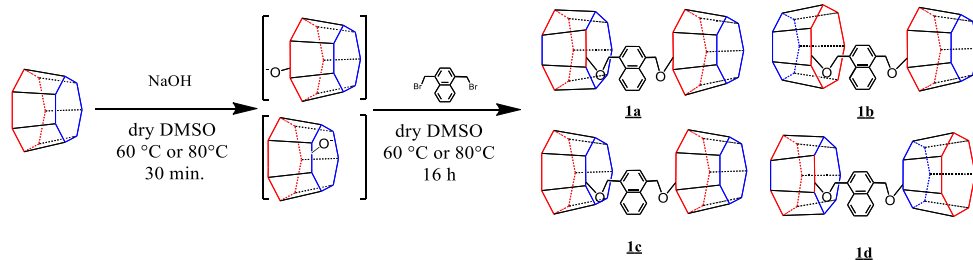
The β -CD dimer was synthesized by deprotonation with NaOH in DMSO, followed by the addition of 1,4-dibromomethylnaphthalene for 16 hours at 60 °C. Subsequently, neutralization, dialysis, concentration, and recrystallization were carried out, and HPLC was used to isolate and purify the β -CD dimers. The isolated compounds were confirmed by TOF-MS, and the presence of four dimers consistent with the monoisotopic mass of $C_{96}H_{148}O_{70} = 2444.16$ was confirmed.

The details of the structure determination for isolate and purify the β -CD dimer was used ^{13}C NMR and DEPT 135 spectra. The detail of the molecular structures and the inclusion ability of obtained β -CD dimers will be discussed.

Keywords : Cyclodextrin dimer; Hydrophobic cavity; Molecular recognition

我々の研究室では、CDの機能化という観点からCD二量体の合成、及びその機能評価を行ってきた。先行研究で、*p*-キシレンリンカーを用いた β -CD二量体合成において、反応温度をかえることでリンカーの置換したグルコース単位のみが回転した化合物が新たに合成できることを見出した¹⁾。そこで、本発表では、 β -CDの空孔よりもかさ高い1,4-ジブロモメチルナフタレンをリンカーに用いた反応を行うことで得られた二量体の包接能を比較する実験を行った。

β -CD二量体の合成は、DMSO中でNaOHを用いて脱プロトン化し、1,4-ジブロモメチルナフタレンを加え60℃の反応温度で16時間行った。



Scheme 1 Synthesis of β -CD dimers

その後、中和、透析、濃縮、再結晶を行ない、HPLCを用いて β -CD二量体の単離精製を行った。分離した化合物をTOF-MSで確認したところ $C_{96}H_{148}O_{70} = 2444.16$ のモノアイソトピックマスと一致する二量体四種類の存在を確認した。次に、NMRにより構造の確認を行い、2位間で結合をした(2,2)- β -CD二量体を確認した。その他の二量体の構造を確認すると共に、得られた二量体の包接能評価を行い報告する。

1) 布施 泰之・藤原 隆司・石丸 雄大 日本化学会第 97 春季年会(2017)