

分子スーツ：長い PEG 鎖を有するテトラフェニルポルフィリンに対するメチル化シクロデキストリン二量体の水中における特異な包接挙動

(同志社大理工¹⁾) ○毛 齊悦¹・松下 麟太郎¹・北岸 宏亮¹

Molecular Suit: characteristic inclusion behavior of tetraarylporphyrin bearing long PEG arms with methylated cyclodextrin dimer in water (¹*Faculty of Science and Engineering, Department of Molecular Chemistry and Biochemistry, Doshisha University*) Qiyue Mao,¹ Rintaro Matsushita,¹ Hiroaki Kitagishi¹

In this study, we synthesized tetraarylporphyrins having four PEG chains. We found that the PEGylated porphyrins formed a very stable 1:1 complex with a per-*O*-methylated cyclodextrin dimer in water, even though the PEG chains were much longer than the molecular length of the cyclodextrin dimer. This host-guest phenomenon can be regarded as the PEGylated porphyrin (body) wears a cyclodextrin dimer (molecular suit) in water. In other words, it mimics the process of people dressing up in a suite at the molecular level.

Keywords : Porphyrin; Cyclodextrin; Polyethylene glycol; Supramolecular chemistry; Molecular recognition

分子間相互作用を巧みに制御することで、Stoddart らは分子にオーダーメイドのスーツを着させることをイメージして、Suit[n]anes を報告した¹⁾。Suit[n]anes は 2 つ以上の分子が空間的に絡み合い、ストッパーがないにも関わらず、構成分子同士が簡単に分離しない。我々はメチル化シクロデキストリン(CD)と水溶性テトラアリアルポルフィリンの包接錯体形成について詳しく研究してきた。本研究では、長い側鎖を持つポルフィリンが CD 二量体と安定な 1:1 包接錯体を形成することについて検討した (Figure 1)。CD 二量体と PEG 側鎖を有するポルフィリン(PEGTPP)の結合定数は 10^6 M^{-1} オーダーであり、さらにその結合および解離速度を求めたところ、解離速度定数 (k_{off}) が非常に小さいことがわかった。この包接現象は、人間が腕を曲げて服を着る行為と似ており、解離が非常に遅いことから、一旦この包接錯体が形成すると、分子スーツである CD 二量体は PEGTPP から離脱しにくい構造になっている。

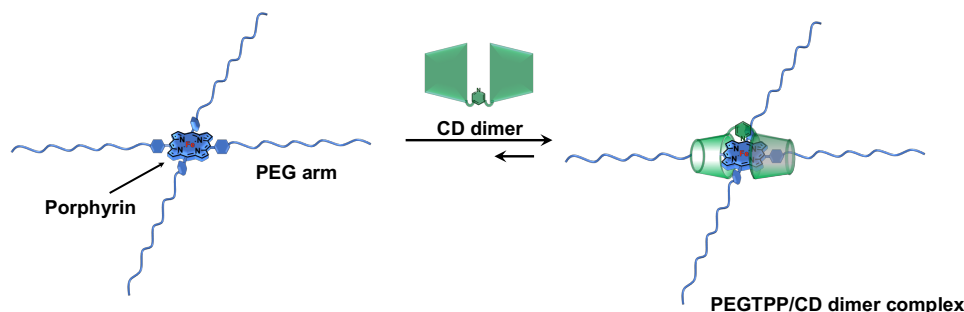


Figure 3. The 1:1 complexation of PEGTPP with CD dimer.

1) Stoddart, J.F. et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2006**, 45, 6665–6669.