

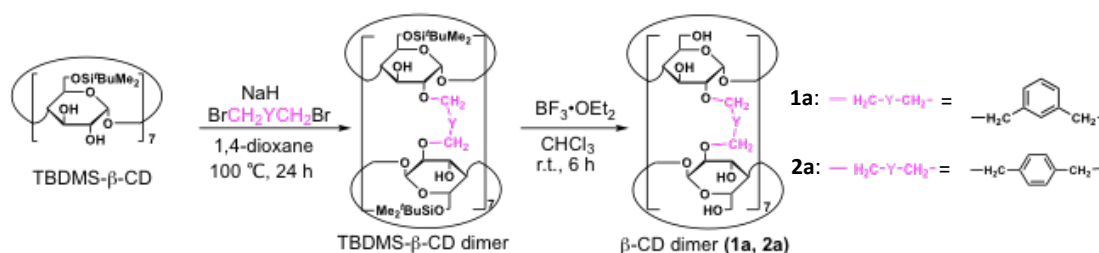
マルチリンカーをもつ β -シクロデキストリン二量体の分子認識能に及ぼすリンカーの効果

(阪大院工) ○山本康平・重光孟・木田敏之

Effect of the linkers on the molecular recognition ability of β -cyclodextrin dimers with multi-linkers (Graduate School of Engineering, Osaka University) ○Kohei Yamamoto, Hajime Shigemitsu, Toshiyuki Kida

Cyclodextrin (CD) forms inclusion complexes with various guests in water and organic solvents. Recently, we synthesized a novel β -CD dimer by a reaction of heptakis(6-*O*-*tert*-butyldimethylsilyl)- β -CD (TBDMS- β -CD) with aromatic linkers followed by the removal of TBDMS groups, and found that it has higher inclusion ability towards *cis*-fatty acid esters over the corresponding *trans*-isomers. This inclusion selectivity may be due to the better fit of the inclusion space formed by *m*-xylylene-linked β -CD dimer to molecular structures of *cis*-fatty acid esters. In this study, we synthesized β -CD dimers linked with various aromatic linkers such as *p*-xylylene linkers, and examined the effect of the linker on the inclusion ability towards long-chain unsaturated fatty acid esters. The *p*-xylylene-linked β -CD dimer showed selective inclusion ability towards *trans*-fatty acid esters in contrast to the *m*-xylylene-linked β -CD dimer. **Keywords** : β -cyclodextrin; dimer; aromatic linker; molecular recognition; long-chain unsaturated fatty acid esters

最近我々は、6位を *tert*-ブチルジメチルシリル (TBDMS) 基で修飾した β -シクロデキストリンを7つの *m*-キシリレンリンカーで連結した β -CD 二量体を簡便に合成することに成功し、ここから TBDMS 基を脱離させた β -CD 二量体 (**1a**) はシス型の長鎖不飽和脂肪酸エステルに対して選択的な包接能を示すことを見出した¹⁾。**1a** の包接空間がシス型の不飽和脂肪酸の分子構造により適合しているため、このような選択性が発現したと考えられる。本研究では、*p*-キシリレンなどの種々の芳香族リンカーで連結した β -CD 二量体を合成し、リンカーの構造が長鎖不飽和脂肪酸エステルに対する包接能に及ぼす効果について検討を行った。*p*-キシリレンリンカーで連結された β -CD 二量体 (**2a**) は、**1a** とは逆にシス型のオレイン酸メチルよりもトランス型のエライジン酸メチルに対して選択的な包接能を示すことがわかった (トランス/シス選択性=約4倍)。



Scheme 1. Synthesis of β -CD dimers.

- 1) C. Kogame-Asahara, S. Ito, H. Iguchi, A. Kazama, H. Shigemitsu, T. Kida, *Chem. Commun.*, **2020**, 56, 1353.