

26G-pm02

イソプレン構造を有する化合物の γ -シクロデキストリンによる包接化とその構造解析

○小川 法子¹, 瀬藤 敬太¹, 熊谷 健佑¹, 田中 栞¹, 上梶 友記子², 生田 直子³, 中田 大介², 寺尾 啓二², 高橋 知里¹, 川島 嘉明¹, 山本 浩充¹ (¹愛知学院大薬, ²シクロケムバイオ, ³神戸大院医)

【目的】ユビキノン[®]はイソプレン側鎖を有する化合物であり、イソプレン単位 10 個を有するコエンザイム Q10 (CoQ10) は、数多くの機能性食品に配合されている。これまでに、環状オリゴ糖であるシクロデキストリン(CD)の一種である消化性の γ -CD に CoQ10 を包接させることで、生物学的利用能が向上することが報告されているが、包接複合体の構造については、これまでにいくつかの報告があるものの、その化学量論比などについて統一的な結論を得るに至っていない。そこで本研究では、CoQ10 のイソプレン構造に着目して、イソプレン構造を有する数種の化合物を γ -CD に包接させ、その複合体の構造的知見より、CoQ10 の複合体構造予測に必要な基礎データを得ることとした。

【方法】ホスト化合物として γ -CD を、イソプレン構造を有するゲスト化合物 (イソプレン単位数)として、geraniol (2)、geranyl formate (2)、farnesol (3)、*trans,trans*-farnesol (3)、farnesyl acetate (3)、geranylgeraniol (4)を用いた。 γ -CD と各ゲスト化合物の複合体試料を共沈法により調製し、複合体試料をもとに結晶試料を調製した。結晶試料について、光学顕微鏡により外観観察を行い、また、粉末 X 線回折測定により結晶性について検討した。さらに、試料を dimethyl sulfoxide-*d*₆ に溶解し、¹H-NMR 測定を行うことで γ -CD とゲスト化合物の化学量論比について検討した。

【結果および考察】粉末 X 線回折測定の結果、いずれのゲスト化合物においても、結晶試料の回折パターンは、 γ -CD 単体の回折パターンと比較して、異なる回折角に回折強度を示し、ゲスト化合物は γ -CD と包接複合体を形成することが確認された。また、光学顕微鏡による観察の結果、いずれの包接複合体試料からも単結晶を採取できることが確認できた。さらに、¹H-NMR 測定の結果、ゲスト化合物と γ -CD の化学量論比を得ることができ、イソプレン単位と γ -CD の比率に関する知見を得ることができた。