

# 25PB-am003

コール酸類との包接複合体形成に基づく Cyclomaltononaose ( $\delta$ -CD) 生成率の改善

○郡司 美穂子<sup>1</sup>, 西岡 夏生<sup>1</sup>, 小高 玄渡<sup>1</sup>, 渡邊 茉莉子<sup>1</sup>, 遠藤 朋宏<sup>2</sup>, 古石 誉之<sup>1</sup>, 福澤 薫<sup>1</sup>, 米持 悦生<sup>1</sup> (<sup>1</sup>星薬大, <sup>2</sup>東京薬大薬)

**【目的】** $\alpha$ -Cyclodextrin (CD) を *Paenibacillus macerans* 由来 CD 合成酵素 (CGTase) で処理すると様々な CD に再合成される。これに Taurocholic acid (TC) や Glycyrrhizin (GA) を共存させると、Cyclomaltononaose ( $\delta$ -CD) 生成量が増加する。これは、CD の開環反応も触媒する CGTase による  $\delta$ -CD の認識が、包接により変化したためと予想される。そこで NMR を用いて、ゲスト分子を包接したときの  $\delta$ -CD の状態変化を、疎水性空洞の占有状態や CD 環の変形を指標に検討した。

**【方法】** $\delta$ -CD は、 $\alpha$ -CD の CGTase 処理により調製した CD 混合物から HPLC により精製し、単離した。確認は、HPLC および NMR により行った。ゲスト化合物には、TC、Cholic acid (CH)、GA および Taurine (Tau) の 4 種を選択し、 $\delta$ -CD: ゲスト化合物のモル比が 1:3 の重水溶液の NMR (JNM-ECA600 II, 600 MHz (<sup>1</sup>H)、30°C) を測定した。

**【結果と考察】** $\delta$ -CD/Tau の系では、両物質が持つすべてのプロトンで化学シフト変化は認められなかった。一方、 $\delta$ -CD/TC、CH および GA の系では、グルコース単位の 3 および 5 位のプロトンに高磁場シフトが確認された。このことから、生成の改善には、ゲスト分子の包接が必要であることが明らかとなった。また、グルコシド結合に使用される C1 および C4 に結合するプロトンにも高磁場シフトが認められ、包接による  $\delta$ -CD の環構造変形も生じていることがわかった。このため、1 および 3 位のプロトンの化学シフト変化と生成の改善効果を比較したところ、1 位では  $r=0.880$ 、3 位では  $r=0.981$  の相関性が得られた。これは、包接による CD 環の構造変化より、ゲスト分子による疎水性空洞の占有状態が、CGTase による  $\delta$ -CD の認識に強く影響することを示唆しており、CGTase 存在下でのゲスト分子の疎水性空洞への適合性が、 $\delta$ -CD 生成の改善に寄与することが示唆された。