第36回シクロデキストリンシンポジウム

**予稿作成要領**

ページ数 **A4**版用紙**2枚**にお書き下さい（一般講演の口頭ならびにポスター発表）。

マージン 上下30 mm、左右20 mmに設定してください。

フォント 和文は明朝体（MS明朝、平成明朝）、英文はTimes 系（Times、Times New Roman）をお使い下さい。題目、参考文献を含めて全文を12ポイントに統一して下さい。

コンテンツ 以下の内容を順にお書きください。

題目

所属、発表者 (講演者に○を付して下さい)

題目の英語表記

発表者の英語表記

所属の英語表記

連絡者のE-mailアドレス

英文Summary (5行程度)

本文

参考文献（出来るだけお書き下さい）

図、表 英文でお書き下さい。

書式設定 全文に対して行間を1行送りまたは18pt固定、両端揃えに設定してください。和文題目の後、英文題目の前後、英文Summaryの前後、参考文献の前にそれぞれ１行を空けてください。

* ページ番号を挿入しないようにしてください。
* 最終的な印刷物はモノクロになります。解像度を考慮して作成して下さい。

原稿の送付 原稿は、**Word形式とPDF形式の両方**を添付文書として、E-mail で下記アドレスまでお送り下さい。E-mailでの送付が困難な場合は、同アドレスにてお問い合わせ下さい。

送付先 CD36@pharm.kobegakuin.ac.jp

メール件名：CDS36講演要旨(講演者名)

予稿原稿〆切は、**7月1日（月）**です。

Cucurbiturilの特性を兼ね備えたCyclodextrin誘導体合成の試み

（1神院大薬学、2第一薬大）○冨永達朗1、 袁德其1、 福留誠1、古賀和隆2

Trial of the synthesis of host molecules with the combined characteristics of both cyclodxrins and cucurbiturils

Tatsuro TOMINAGA,1 De-Qi YUAN,1 Makoto FUKUDOME,1 Kazutaka KOGA2

1 *Faculty of Pharmaceutical Sciences, Kobe Gakuin University,*

2 *Daiichi University of Pharmacy*

(E-mail: xxxxxxx@s.kobegakuin.ac.jp, xxxxxxxx@pharm.kobegakuin.ac.jp )

**Summary:** Cucurbiturils (CBs) are …...We intended to introduce one 2-imidazolidinone moiety to the secondary hydroxyl side of each glucopyranoside unit by the condensation of both the 2-OH and 3-OH groups with 4,5-dihydroxy-2-imidazolidinone (2). However, the results what we got indicate that the reaction of 2 with CDs occurred at the primary hydroxyl side rather than the hydroxyl secondary side.

1. **諸言**

シクロデキストリン(CD)は、最大の特徴として疎水性空洞内に空洞径に適した大きさの疎水性ゲスト分子を取り込む能力を有するが、有機カチオンに対する親和力が弱い。一方では、グリコウリル6個がメチレン基によるN原子の架橋によって環状につながったククリビット [6] ウリル(CB [6]) は、正に荷電した疎水性のゲスト分子に対して非常に高い結合親和力を示す。当研究室では、α-CD (**1**)とCB[6]双方の特徴を兼ね備えた新たなホスト分子の合成について検討を行った。

1. **実験**

Dinwoodieらのglyoxal-nitroguanidine縮合反応1)を参考にして、glyoxalとureaからdihydroxy-2- imidazolidinone (DHI) (**2**)を合成した。**2**の構造はNMRを用いて確認した。続いて酸触媒下でα-CDとDHIを反応させ、mono体 (**3**) を得た。

**Scheme 1**: Synthesis of compound **2**

**3．結果と考察**

水溶液中、酸性の条件下では、モノキャップ体、DMF溶液中、酸性の条件下では、トリキャップ体までの生成が確認出来た。ODSカラムにて分離精製を行い、モノキャップ体**3**を得ることができた。化合物**3**の構造はNMRスペクトルに基づき表徴した。



**Scheme 2**: Synthesis of compound **3**

糖のC6由来のいくつかのシグナル(DEPT法により確認) が、未修飾のC6より約5 ppm低磁場のδ 66 ppm付近に現れ、これは6-OHのアルキル化を強く示唆する。一方で、糖のC2、C3は有意な低磁場シフトが認められなかった。よって、キャップ反応は二級側ではなく、一級側で起きていることが分かった。



**Figure 1**: DEPT 135 NMR spectra of compound **3** in D2O (CH3CN int.)

ねじれ型分子内電荷移動 (TICT) による発光現象はモレキュラーセンサーの開発を含む様々な分野で応用されている。ジメチルアミノベンザルデヒド(DMBA) は、通常ではTICT発光をほとんど示さないが、α-CDの添加により1:1包接錯体由来と思われるTICT発光を強く放つ。キャップトα-CD (**3**)をDMBAの水溶液に添加すると、 [2ホスト：1ゲスト]包接錯体由来と思われるTICT発光が通常の発光と1:1包接錯体のTICT発光より遥かに強い強度で観測された。この結果は、キャップトα-CD (**3**)がDMBAに対して未修飾のα-CDと大きく異なる包接挙動を示すことを強く示唆する。

1. **参考文献**
2. A. H. Dinwoodie, J. Mcallan, C. Thompson, *PATENT SPECIFICATION* 1,103285 (1968)