

## 一酸化炭素とシアン化合物の同時解毒剤実用化に向けたシクロデキストリンダイマーの合成条件最適化に関する検討

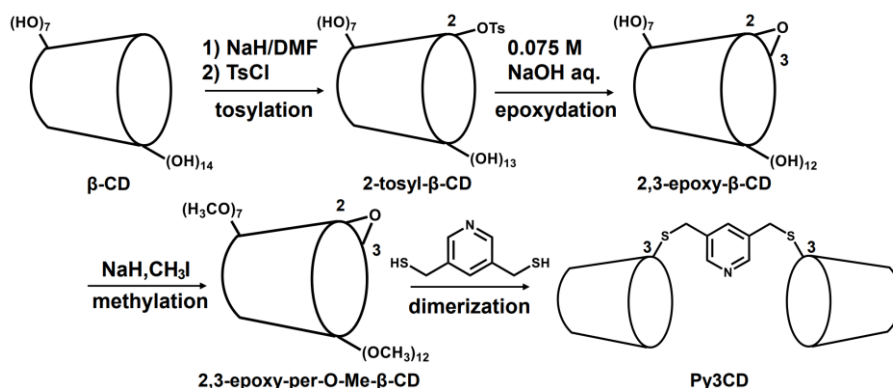
(同志社大理工) ○大西隆史・中上敦貴・北岸宏亮

Study on optimization of synthesis condition of a cyclodextrin dimer for the practical application of dual antidote against carbon monoxide and cyanide poisoning. (*Faculty of Science and Engineering, Department of Molecular Chemistry and Biochemistry, Doshisha University*) ○Takashi Onishi, Atsuki Nakagami, Hiroaki Kitagishi

We have previously reported an effective dual antidote, “hemoCD-Twins”, against carbon monoxide and cyanide poisoning. Cyclodextrin dimer, “Py3CD”, is one of the components in hemoCD-Twins. However, it is difficult to synthesize Py3CD in large quantities using current synthetic methods. And it is not possible to conduct necessary experiments for the practical application. In this study, we optimized the synthetic condition of Py3CD for mass production. Especially, we reconsidered the purification processes in tosylation step to separate  $\beta$ -cyclodextrin by recrystallization in substitute of column chromatography. As a result, whereas previous way was conducted in 30% yield in 2-3 days, this simple and scalable way was conducted in 16% yield in 1 day.

**Keywords:** cyclodextrin, antidote, synthetic condition, purification processes, optimization

我々は火災ガスの中で毒性の高い一酸化炭素とシアン化水素に対する同時解毒剤「hemoCD-Twins」を以前報告した<sup>1)</sup>。しかし、この解毒剤の構成要素であるシクロデキストリンダイマー(Py3CD)は現在の合成方法では大量合成が困難であり、実用化に向けた実験を十分に行うことができない。そのため、本研究では Py3CD の大量合成に向けて合成条件の最適化を行い、特に Py3CD 合成のトシル化段階における精製操作を見直し、現在主に精製に用いられているカラムクロマトグラフィーの代わりに再結晶を用いて出発物質である  $\beta$ -シクロデキストリンの分離を行った。その結果、以前まで2～3日の工程において収率30%で行っていた分離を1日の作業に短縮し、収率16%で、簡便かつスケラブルな方法で合成することに成功した。



**Scheme.1** Synthetic route of Py3CD.

- 1) Q. Mao et al., *PNAS*, **2023**, Vol. 120, No. 9, e2209924120.