W 吸収剤であるオキシベンゾン-3 及びアボベンゾンの結合により誘導される BSA 中のトリプトファン-134 および 213 の蛍光スペクトル遷移の識別

(東理大薬 ¹・東理大院薬 ²) 南出 恵 ¹・堀住 祐介 ²・鶴島 みのり ¹・古賀 遼太郎 ²・長谷川 寛治 ²・黒澤 祐哉 ²・槌田 智裕 ¹・後藤 了 ¹

Distinguishing the transitions of fluorescence spectra of tryptophan-134 and 213 in BSA induced by bindings of UV filters, oxybenzone-3, and avobenzone (\(^1Faculty\) of Pharmacy, Tokyo University of Science, \(^2Graduate\) School of Pharmaceutical Sciences, Tokyo University of Science) Megumi Minamide,\(^1\) Yusuke Horizumi,\(^2\) Minori Tsurushima,\(^1\) Ryotaro Koga,\(^2\) Kanji Hasegawa,\(^2\) Yuya Kurosawa,\(^2\) Tomohiro Tsuchida,\(^1\) Satoru Goto\(^1\)

Ketoprofen (KTP) known as an analgesic anti-inflammatory drug involves a photo-allergic reaction by haptenization, and active ingredients in sunscreens have also been reported to involve similar issues. Oxybenzone-3 (OBZ) and avobenzone (ABZ) are currently used as commercial ultraviolet-light filters for sunscreens, they have similar structures of benzophenone skeleton with photoexcitability as KTP. In this study, to determine the chemical modification of these compounds on bovine serum albumin (BSA) which is abundant in the blood, we investigated an interaction between BSA and these compounds using a Stern–Volmer plot analysis and trajectory analysis with singular value decomposition (SVD) of the tryptophan (W) fluorescence spectrum of BSA. As a result, The W fluorescence in the presence of ABZ showed a blue shift in its peak and had two binding sites with different affinities by Langmuir analysis. On the other hand, that in the presence of OBZ showed a red shift, indicated adsorption on the W residue present in the hydrophobic region and coating hydrophilic W residue present in the hydrophilic region.

Keywords: BSA intrinsic fluorescence; benzophenone derivatives; singular value decomposition (SVD); Langmuir adsorption isotherm; Hill's plot

鎮痛消炎剤であるケトプロフェン(KTP)はハプテン化による光アレルギー反応を伴うが、日焼け止め有効成分でも同様の問題が報告されている。市販の日焼け止め用紫外線フィルターとして現在用いられているオキシベンゾン-3 (OBZ) およびアボベンゾン (ABZ) は、KTP と同様に光励起性のあるベンゾフェノン骨格の類似構造を持つ。本研究では、血中に多く存在するウシ血清アルブミン(BSA)に対する OBZ 及び ABZ の化学修飾を決定するため、BSA のトリプトファン(W)蛍光から Stem-Volmerプロット解析および特異値分解 (SVD) 計算によるトラジェクトリー解析を用いて、薬物と BSA の相互作用様式を調べた。その結果、ABZ による W 蛍光は青方偏移を示し、ラングミュア解析から親和性の異なる 2 つの結合部位が観察された。一方でOBZ では赤方偏移を示し、疎水性領域に存在する W 残基への吸着、又親水性領域に存在する W 残基への被覆が示唆された。