有機ホウ素を利用したケージドアセチルコリンの高機能化

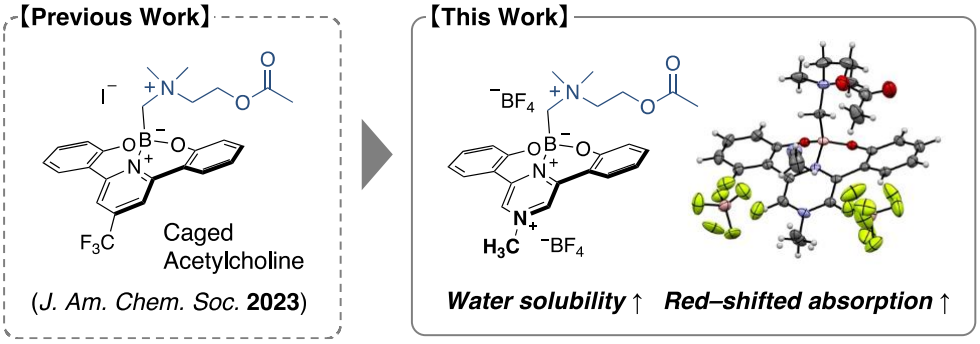
（京大化研[1]・金沢大 WPI-NanoLSI[2]・Science Tokyo 生材研[3]）○中村 梨香子[1]・山崎 健[2]・新井 敏[2]・隅田 有人[3]・大宮 寛久[1]
Functional enhancement of caged acetylcholine based on organoboron compounds ([1]*ICR, Kyoto Univ.*, [2]*WPI-NanoLSI, Kanazawa Univ.*, [3]*LBB, IIR, Science Tokyo.*) ○ Rikako Nakamura[1], Takeru Yamazaki[2], Satoshi Arai[2], Yuto Sumida[3], Hirohisa Ohmiya[1]

Caged compounds are temporarily inactivated molecules conjugated to a bioactive compound with a photoremovable moiety. We have previously developed caged acetylcholine with boron-ate complexes that allow the generation of alkyl radicals by visible light excitation. In this study, we redesigned the molecular structure to develop higher performance of caged acetylcholine. After extensive investigation, we achieved significant improvements in water solubility, longer wavelength absorption, and the introduction of functional unit by changing the core structure of the boron-ate complex to a pyrazinium salt.

Keywords :Caged compound, Acetylcholine, Water-soluble, Boron-ate complex, Red-shifting

ケージド化合物は、光除去可能な保護基によって生理活性物質を不活化した分子である。以前、我々は、可視光の照射によりアルキルラジカル種を生じるホウ素アート錯体を用いることで、炭素原子上において生理活性物質を放出するケージド化法を開発した[1]。本手法によって、ヘテロ原子官能基をもたない生理活性物質のケージド化を可能とし、神経伝達物質アセチルコリンの生体内における時空間的制御を実現した。

今回我々は、ケージドアセチルコリンの高機能化を目指し、母骨格の再設計を行った。量子化学計算に基づき分子設計を検討した結果、ホウ素アート錯体の母骨格をピラジニウム塩に変更することで、水溶性の向上や吸収波長の長波長化による機能性の向上を達成した。



1) R. Nakamura, T. Yamazaki, Y. Kondo, M. Tsukada, Y. Miyamoto, N. Arakawa, Y. Sumida, T. Kiya, S. Arai, H. Ohmiya, *J. Am, Chem. Soc.*, **2023**, *145*, 10651–10658.

© The Chemical Society of Japan