テトラアザ [2.2.1.2.2.1] パラシクロファンを用いた水溶性シクロファン 5 量体の合成と分子認識

(福岡大院理¹) ○猿渡 勇人¹・宮﨑 隆聡¹・林田 修¹

Synthesis and Molecular Recognition of Water-soluble Cyclophane Pentamers Based on Tetraaza[2.2.1.2.2.1]paracyclophane (¹Graduate School of Science, Fukuoka University) OHayato Saruwatari, ¹Takaaki Miyazaki, ¹Osamu Hayashida¹

Water-soluble cyclophane based on tetraaza[2.2.1.2.2.1]paracyclophane (CPX2) is a host molecule that can bind a hydrophobic guest molecule in its intramolecular cavity. Herein, we developed a cyclophane pentamer in which multiple CPX2 skeletons are linked in a divergent manner, in order to enhance the guest-binding and molecular recognition ability. Specifically, we synthesized a cationic cyclophane pentamer (5N) by introducing hydrophilic side chains with an ammonium group on the macrocyclic skeleton. We investigated the guest binding behavior and molecular recognition abilities of 5N for guest molecules such as indocyanine green and perylene-3,9-dicarboxylic acid, which have relatively large molecular sizes. We performed fluorescence and absorption titration experiments to evaluate the host-guest binding constants. The results revealed that 5N bound these guest molecules more strongly than 1N. Keywords: Water-soluble Host; Cyclophane; Molecular Recognition; Fluorescent Property

テトラアザ[2.2.1.2.2.1]パラシクロファン (CPX2) は剛直で比較的に大きな分子内空洞を提供できる。また、CPX2を分子基盤としたカチオン性側鎖を有する水溶性シクロファン (1N) は、その分子内空洞に適した疎水性ゲスト分子を捕捉できるホスト分子である。本研究では、ゲスト捕捉能や分子認識能の更なる向上を目指して、複数の CPX2を発散型で連結したシクロファン 5量体を開発した。具体的には、末端にアンモニウム基を有する親水性側鎖を導入したカチオン性シクロファン 5量体(5N)を合成した。分子サイズが比較的大きなインドシアニングリーン (ICG) やペリレンジカルボン酸 (PeDA) などのゲスト分子に対する 5N のゲスト捕捉能や分子認識能を検討した。実際には、HEPES 緩衝液 (pH 7.4) 中、蛍光スペクトルおよび吸収スペクトルを用いた滴定実験を行い、ホストゲスト複合体の結合定数 (K/M^{-1}) を評価した。その結果、5N は 1N と比較して、これらゲスト分子をより強く捕捉することが明らかとなった。5N のこれらゲスト分子に対する分子認識能についても報告する。