

γ -シクロデキストリンと *trans, trans* farnesol の包接複合体の 単結晶 X 線構造解析

肥田和也、小川法子、安永峻也、川嶋嘉明、山本浩充

愛知学院大学 薬学部 製剤学講座

【概要】

2018年9月4-5日、山梨県立図書館で開催された「第35回シクロデキストリンシンポジウム」に参加し、以下の研究内容をポスター発表した。

【目的】

コエンザイム Q10 (CoQ10) はイソプレン単位が10個からなる側鎖がキノン骨格に結合した構造をしており、エネルギー産生に関わる補酵素として働くため、サプリメント等の原料として広く使用されている。しかし一方で CoQ10 は、吸収性が悪いことが知られている。これまでに CoQ10 に γ -シクロデキストリン (γ -CD) を適用することで、CoQ10 の安定性、機能が向上することが報告されているが、CoQ10 と γ -CD の包接複合体の構造に関して、その化学量論比などについては、現在までに結論に至っていない。そこで本研究では、CoQ10 と γ -CD の包接体構造の解明を目的として、イソプレン構造を持つ化合物である *trans, trans* farnesol と γ -CD 包接複合体の構造解析を行った。

【方法】

trans, trans farnesol と γ -CD の包接複合体を調製し、得られた包接複合体より単結晶を得た。得られた結晶について、単結晶 X 線構造解析を行った。測定は、結晶をクライオループにマウントし低温窒素吹付条件下で行い、解析には Yadokari-XG 及び Crystal Structure (株式会社リガク) を用いた。計算科学的手法として CONFLEX 7 (CONFLEX 株式会社) と ChemBio3DUltra

(PerkinElmer Japan Co., Ltd.) を用いた。

【結果と考察】

単結晶 X 線構造解析により、包接複合体の初期構造と結晶格子定数を得ることができた。また、配座探索による構造最適化計算の結果、 γ -CD 中の *trans, trans* farnesol は、エネルギー値の近い複数の構造を示すことが判明した。単結晶 X 線構造解析の結果、包接された *trans, trans* farnesol は γ -CD と比べて温度因子が大きいことから disorder で存在することが推察された。また、配座探索法による最適化計算の結果もこの実験結果を支持した。

【感想】

去年に続き、シクロデキストリンシンポジウムで発表をさせていただき、とても勉強になりました。特に、他学部の学生や先生方の研究内容や視点は自分にはないものが多く、貴重な体験となりました。

