

一置換 β -シクロデキストリンの構造研究。
フェニルチオ- β -シクロデキストリン及びフェニルスルフィニ
ル- β -シクロデキストリンの結晶構造と
関連化合物の水溶液中におけるスペクトル的研究

神鳥成弘*, 広津建*, 樋口泰一*, 藤田佳平衛, 山村初雄**, 井本泰治**,
田伏岩夫***

J. Chem. Soc. Perkin Trans. II, 7-14 (1987)

Structural Study of Monosubstituted β -Cyclodextrins. Crystal Structures of Phenylthio- β -cyclodextrin and Phenylsulphinyl- β -cyclodextrin and Spectroscopic Study of Related Compounds in Aqueous Solution

Shigehiro KAMITORI*, Ken HIROTSU*, Taiichi HIGUCHI*, Kahee FUJITA, Hatsuo YAMAMURA**, Taiji IMOTO**, Iwao TABUSHI***

The: crystal structures of two monosubstituted β -cyclodextrins which have bulky hydrophobic groups instead of primary hydroxy groups were determined by X-ray diffraction. These compounds consist of the host (cyclodextrin moieties) and guest parts (hydrophobic groups), and have the ability to act as both host and guest at the same time. The crystal structures were solved by using Patterson maps, rotation functions, and trial-and-error methods combined with a rigid-body least-squares technique. The structures were refined by using a block-diagonal least-squares method to R values of 0.14 and 0.13. Hydrophobic groups are intermolecularly included in the cyclodextrin cavity of another molecule, and novel helical polymers are formed by repetition of this intermolecular inclusion. A spectroscopic study confirmed that this intermolecular inclusion occurs in aqueous solution.

抄録一級水酸基の代りに大きな疎水性基を有する一置換- β -シクロデキストリン2種の結晶構造をX線解析によって明らかにした。これらの化合物はホスト部分(シクロデキストリン)とゲスト部分(疎水性基)から成りたっており、同時にホストとしてもゲストとしても挙動する。疎水性基は他のシクロデキストリン孔に、分子間的に包接されおり、この結果、新しいヘリックス様のポリマー構造を形成している。この分子間包接は、水溶液中でも起ること分光学的に確認した。

* Faculty of Science, Osaka City University 大阪市大理学部

**Faculty of Pharmaceutical Sciences, Kyushu University 九州薬学部

** Department of Synthetic Chemistry, Kyoto University, 京都大学合成化学科