

# NMRによる芳香族化合物のミセル界面での動的挙動解析

(名工大院・工) ○村門 美佳・山本 靖・多賀 圭次郎・吉野 明広

【緒言】 生命現象では細胞膜界面における吸着、浸透、透過などの動的挙動は重要である。以前、我々はアミノ酸類の浸透評価をもとにミセルコア内への可溶化における疎水性指標を提案した<sup>1)</sup>。さらに、NOESY 測定の結果から可溶化物と Sodium dodecyl sulfate (SDS) の相互作用について検証し、2つの可溶化物間の協奏効果を見いだした<sup>2)</sup>。そこで、本研究では様々な芳香族化合物を添加した SDS 水溶性ミセル系における界面での分子間相互作用とその動的挙動について検討した。

【実験】 一連の試料溶液は SDS の濃度を一定とし、添加物の濃度を連続的に変えて調製した。電気伝導度  $\Lambda$  は DKK・TOA 製 CM-60G をセル温度 37.0°C で操作した。<sup>1</sup>H NMR は SDS 濃度を 16mM に固定し、Bruker AVANCE 400 Plus NanoBay を温度 37.0°C において 400.13 MHz で操作した。

【結果と考察】 芳香族化合物の添加量を一定として、一連の SDS 水溶液を調製し、電気伝導度測定を行なって臨界ミセル濃度 (cmc) を求めた。また、測定結果より対イオン解離度  $\alpha$  とミセル化自由エネルギー  $\Delta G$  を算出し、ミセル安定性の指標とした。アルブチンを添加した系では、アルブチンは SDS 分子 ( $\Delta G$ ) にもミセルの親水基の電荷 ( $\alpha$ ) にもあまり影響しなかった。一方、*p*-エチルフェノール (*p*-EtPhOH) を添加した系では、ミセル形成の促進 ( $\Delta G$ ) が見られ、親水部への影響が認められた。さらに、フェニルアラニン (Phe) でも同様の傾向が観察された。

動的挙動解析を目的として、2種の添加物を等モル共存させた SDS 溶液を調整して NOESY 測定を行なった。その結果、アルブチンと *p*-EtPhOH を等モル共存させた場合のみ、両者の *o*-*m*、*o*'-*m* 間の相関ピークを検出した。すなわち、ヘテロ協奏効果である。

Fig.1 に SDS 濃度を一定とした一連の添加物共存水溶液の電気伝導度測定の結果を示す。縦軸は電気伝導度  $\Lambda$ 、横軸は添加物と SDS のモル比とした。アルブチンではモル比を変化させても  $\Lambda$  は変化しなかった。*p*-EtPhOH ではモル比の増加とともに  $\Lambda$  は減少して極小を経た後に増加した。これは SDS と *p*-EtPhOH の会合体の形成を示唆する。SDS と共に等モルのアルブチンも共存させた系において、*p*-EtPhOH のモル比を変化させたところ、 $\Lambda$  の変化は一致することなく、最小値にずれが生じた。この事はさらにアルブチンと *p*-EtPhOH を含む会合体の形成を示唆する。この詳細について、当日討論する予定である。

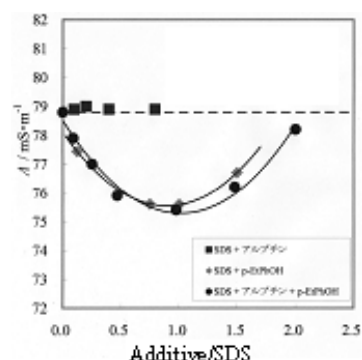


Fig. 1 Conductance

1) 村門美佳ら, 日本化学会第 92 回春季年会講演予稿集, 3-PB-035, (2012)

2) 村門美佳ら, 第 43 回中部化学関係学協会支部連合秋季大会講演予稿集, 2C05, (2012)

NMR studies of dynamic behavior analyses for aromatic compounds in the SDS aqueous micelles  
M. MURAKADO, Y. YAMAMOTO, K. TAGA, A. YOSHINO (Nagoya Inst. Tech., akishin@nitech.ac.jp)

Dynamic behavior of aqueous micelle for sodium dodecyl sulfate (SDS) was examined by electric conductivity and NMR spectroscopy. At the low *p*-ethylphenol mole ratio, conductance were decreased. At the high *p*-ethylphenol mole ratio, conductance were increased. These effects mean the formation of *p*-EtPhOH-SDS adducts. The coexistence effects of the arbutin for conductance has significantly observed. This dynamic process was investigated by the means of NMR technics.