

分子のカプセル：シクロデキストリン

ある分子（ホスト分子）が、水素結合や静電的相互作用（クーロン力）など分子間に働く弱い相互作用によって、特定の分子やイオン（ゲスト分子）と選択的に形成する複合体のことを「ホスト・ゲスト錯体」あるいは「包接化合物」と呼んでいます。

このような分子複合体の形成は、人間の身体の中でも「酵素と基質」、「薬と受容体」、「抗体と抗原」などの間でよく起っており、生体反応や生体機能のコントロールに利用されています。このメカニズムを人工的に再現することで、生体機能の理解に役立てたり、新しい医薬品の開発などに利用されています。

他の分子を取り込むことのできる人工ホスト分子には様々なものが既に見つかっていますが、今回使用する“シクロデキストリン”も代表的なホスト分子の一つです。

シクロデキストリンは、D-グルコース（ブドウ糖）が環状に連結したオリゴ糖の一種ですが、底が空いたバケツのような空洞構造をしているため、様々な分子をその空洞に取り込んだ「包接化合物」を形成することで知られています。よく使われているのは、グルコースの数が6-, 7-, 8-個が繋がったのもので、それぞれ α -、 β -、 γ -シクロデキストリンと呼ばれ、トウモロコシやジャガイモなどのデンプンを微生物が作り出す酵素を使って作ることができます。

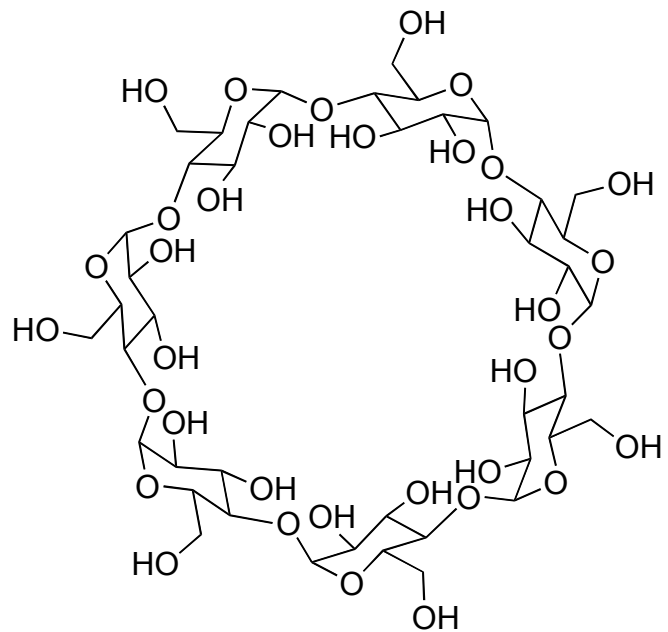
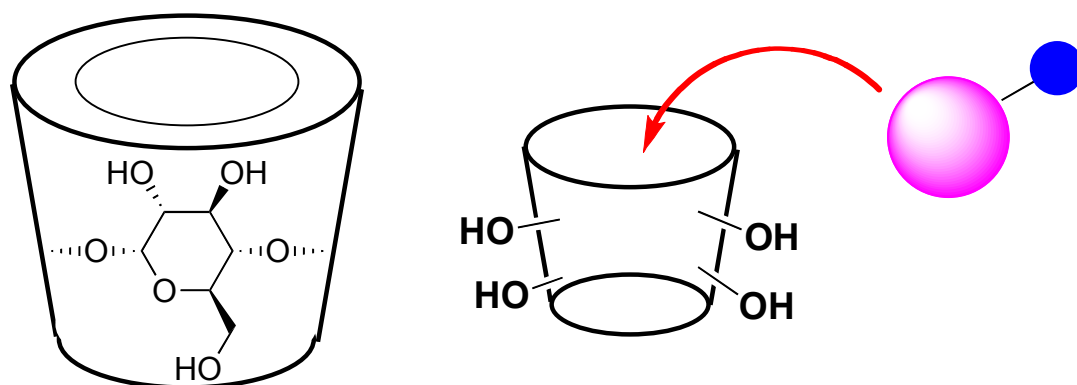


図 β -シクロデキストリンの分子構造

シクロデキストリンの外側は酸素原子や水酸基がたくさん張り出しているため親水性ですが、空孔内部は逆に疎水的であるため空孔の中に有機分子を取り込んで（包接）、その分子を安定化したり、水に対する溶解性を良くすることができます。



シクロデキストリン自体は天然物である糖からできていますので、人体に無害な上、自然環境中で分解される環境に優しく安全な物質です。そのため、食品や化粧品、医薬品などの添加物として幅広く利用されています。

例えば、練りわさびやチューイングガムの香りや味の成分をシクロデキストリンの中に包接しておくことで、シクロデキストリンが小さなカプセルとして働き、長い期間に渡って味覚を保つことができます。

また、薬や化粧品の有効成分を閉じ込めることで、一定濃度で少しずつ有効成分を放出する（徐放性といいます）ことが可能になります。

通常、このような分子の取り込みや放出の様子を肉眼で観測することは困難ですが、周囲の環境によって色が変わる色素をゲスト分子として用いることで、特別な装置も必要とせず容易に観測することができます。

今回の一日体験入学では、シクロデキストリン（ホスト分子）と pH 指示薬として有名なフェノールフタレイン（ゲスト分子）を使って、溶液中で包接化合物ができる様子を色の変化で確認してみましょう。また、温度を変えてみた場合や他のゲスト分子を加えてみたときに、どのような変化が起こるか？についても観察してみることにしましょう。

【実験】

実験を行う上での注意: 強アルカリ性水溶液（目に入ると失明する恐れがあります） を使いますので、実験中は保護メガネ（当日貸与します）を必ず着用する ようにしてください。

■実験 1：シクロデキストリンによる包接錯体の形成

3本の10mLサンプル管に0.1M水酸化ナトリウム水溶液1mLと10mMフェノールフタレイン水溶液0.5mLを入れた後、3種の10mMシクロデキストリン水溶液（ α 、 β 、 γ ）4mLをそれぞれ別のサンプル管に加える。

また、参照用として、別のサンプル管に上記と同じ量の水酸化ナトリウム溶液とフェノールフタレイン溶液を入れ、水4mLで希釈した溶液を用意する。

調製した4つの溶液の色の違いを室温で観察する。

■実験 2：温度による包接錯体の変化

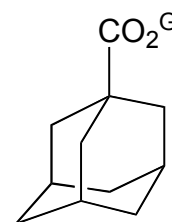
続いて、温度と溶液の色の関係を探る。

まず、氷水を入れた大きめのビーカーに溶液の入ったサンプル管が倒れないように浸して、冷却下（約0℃）での溶液の色の違いや変化を観察する。次に、お湯の入ったビーカーに浸して同様に色の違いや変化を観察する（温度計も入れておく）。

※室温の時との色の違いがわかりにくいときは、もう一組溶液を用意しておくと比較しやすくなります。

■実験 3：ゲスト分子の交換

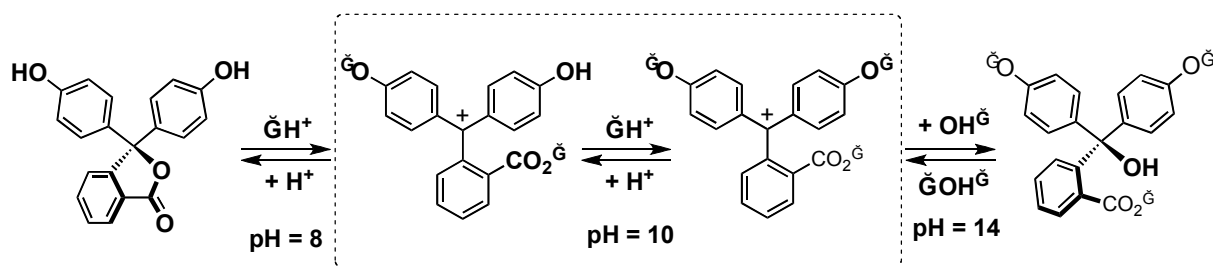
β -シクロデキストリンとフェノールフタレインが包接錯体を形成している溶液に、アダマンタンカルボン酸という分子（右図参照：無色の分子、アルカリ性溶液中ではカルボン酸が解離してイオンとなるため水に溶ける）を加えてみたときの溶液の色の変化を観察する。



【解説】

●フェノールフタレインの pH 変色

pH 指示薬としてよく知られているフェノールフタレインの分子構造と変色機構は、次の通りです。



酸性や中性 ($\text{pH}=7$) の溶液中では無色ですが、アルカリ性 ($\text{pH}=8\sim 14$) では赤紫色に発色します。(pH=14 以上の強アルカリ性では再び無色になります)

発色型と**無色型**では、色素の分子構造に大きな違いがあります。発色型は分子全体が平面に近い形であるのに対して、無色型は立体的な構造となっています。また、無色型は分子中央の炭素原子から結合の手が 4 本伸びていますが、発色型では 3 本しかありません。これらの違いによって、可視域の光を吸収する (発色型)、紫外域の光しか吸収しない (無色型) が決まります。

●シクロデキストリンに取り込まれると色が変わるのは？

アルカリ性溶液中で発色していたフェノールフタレインがシクロデキストリンに取り込まれると色が薄くなったのは、溶液中にたくさん存在しているフェノールフタレイン分子のうち、ある割合がシクロデキストリンに取り込まれて無色型に近い構造になってしまったことで、溶液中の発色型フェノールフタレインの数が減ったためです。(シクロデキストリンに取り込まれている割合が多い程、溶液の色は薄くなります)

シクロデキストリンの空孔の大きさの違いや溶液温度の影響、アダマンタンカルボン酸を加えたときの変化など…実験を通して実際に観測された色の変化から、溶液の中でどのようなことが起こっているのか考えてみましょう。