
Abstract

- Project code : TRG5780280
- Project title : Synthesis of New Designed Receptors and their Binding Study to Cholesterol in Aqueous Solutions.
การสังเคราะห์และการศึกษาการจับคอเลสเตอรอลของรีเซปเตอร์ชนิดใหม่ในน้ำ
- Investigator : Bunyarithi Sookcharoenpinyo, PhD
Department of Chemistry
Faculty of Science
Kasetsart University (Bangkhen)
+66 (0)2-562-5555
- Email Address : fscibts@ku.ac.th
- Project period : 2 years
- Abstract : An anthracene-based D_{3h} -symmetrical cavity provided by our receptor proved best induced-fit in binding to cholate salt with remarkable affinity of up to $1 \times 10^3 \text{ M}^{-1}$ even in highly competitive and neutralized media of 95/5 $\text{CD}_3\text{OD}/\text{D}_2\text{O}$ and D_2O by ^1H NMR titration. This could be due to a combination of hydrophobic desolvation effects and polar interactions as suggested by computational study.
- บทคัดย่อ : รีเซปเตอร์ที่มีช่องสมมาตรแบบ D_{3h} จากหน่วยแอนทราซีนถูกยืนยันว่าเหมาะสมที่สุดที่จะจับกับเกลือโคเลท ด้วยค่าที่สูงเกือบ $1,000 \text{ M}^{-1}$ แม้ในตัวทำละลายที่เป็นกลางและมีการแข่งขันสูง เช่น 95/5 $\text{CD}_3\text{OD}/\text{D}_2\text{O}$ และ D_2O จากการศึกษาด้วยเทคนิค ^1H NMR ซึ่งน่าจะเกิดจากผลรวมของทั้งแรงที่ไม่มีขั้วที่ช่วยไล่ตัวทำละลายออกจากโพรงและแรงที่มีขั้ว จากการศึกษาด้วยวิธีคำนวณ
- keywords : macrocycles
host-guest chemistry
binding study
steroids
cholate