

C4N4 化合物の蛍光発光における分子内水素結合の影響

(慶應院薬¹・微化研²) ○新村 万緒¹・公平 実希¹・堤 亮祐¹・熊谷 直哉^{1,2}

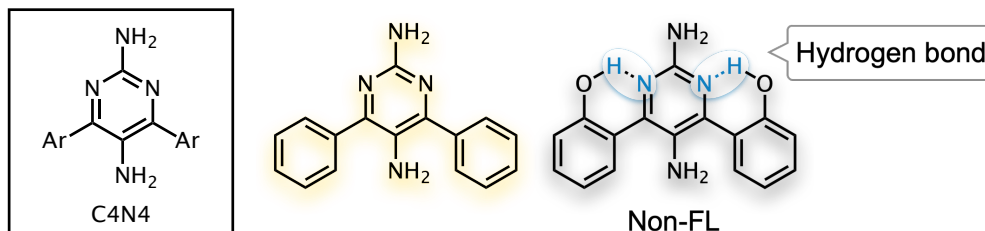
The effect of intramolecular hydrogen bond on fluorescence of C4N4 (¹Graduate School of Pharmaceutical Science, Keio University, ²Institute of Microbial Chemistry) ○Mao Niimura,¹ Miki Kohei,¹ Ryosuke Tsutsumi,¹ Naoya Kumagai^{1,2}

C4N4, a new scaffold for fluorescent material based on a 2,5-diaminopyrimidine core, features a single-step modular synthesis, high quantum yield, and large Stokes shift, anticipating a broad range of fluorometric applications. Recently, we found that the C4N4 compounds with a hydrogen-bonding functional group proximal to the central pyrimidine core prefer non-radiative decay. In this study, we performed systematic investigation to elucidate the effect of steric and electronic properties of neighboring hydrogen-bonding units on the physicochemical behavior of C4N4. C4N4 compounds with various substituents bearing hydroxy and amino groups were examined. Most of the C4N4 compounds capable to form intramolecular hydrogen bonds were non-fluorescent, while some compounds bearing specific functional groups (e.g. amide groups) retained fluorescence.

Keywords : C4N4; Fluorescence; Probe; Quenching

当研究室は、2,5-ジアミノピリミジンを母骨格とする C4N4 化合物が強蛍光性を示すことを見出し、報告している¹⁾。C4N4 化合物は市販試薬より 1 工程で合成可能で、一般に高い量子収率と大きなストークスシフトを示し、汎用型蛍光化合物としての応用が期待される。今回、4,6 位アリール基のオルト位にピリミジン窒素と水素結合を形成可能な官能基を導入することで、蛍光性が消失することを見出した。本研究では、水素結合供与能や構造的特徴の異なる様々な置換基を導入し、分子内水素結合による蛍光性への影響を系統的に精査した。

ヒドロキシ基およびアミノ基を基軸とする種々の水素結合性官能基を導入した C4N4 化合物を合成し、蛍光特性を調査した。分子内水素結合を形成し得るほとんどの化合物は無蛍光性であったが、アミド基などを有する一部の C4N4 化合物は、蛍光性を維持した。



- 1) H. Noda, Y. Asada, T. Maruyama, Takizawa, Naoki, N. Noda, M. Shibasaki, N. Kumagai, *Chem. Eur. J.* **2019**, 25, 4299–4304.