## アミノ基修飾 GFP 色素の蛍光特性と励起状態計算

(東工大生命<sup>1</sup>・学習院大理<sup>2</sup>) ○金森 功吏<sup>1</sup>・定井 佑樹<sup>1</sup>・飛田 健司<sup>1</sup>・浅見 祐也<sup>2</sup>・湯浅英哉<sup>1</sup>

Fluorescence properties and excited-state calculations of amino group-modified GFP dyes (<sup>1</sup>School of Life Science and Technology, Tokyo Institute of Technology, <sup>2</sup>Department of Chemistry, Faculty of Science, Gakushuin University) O Takashi Kanamori, <sup>1</sup> Yuki Sadai, <sup>1</sup> Kenji Hida, <sup>1</sup> Hiroya Asami<sup>2</sup>, Hideya Yuasa <sup>1</sup>

In cellular fluorescence imaging, turn-on type fluorescent probes that specifically turn on fluorescence in the presence of a target molecule are attracting attention. These molecules emit almost no fluorescence in the absence of the target molecule, enabling rapid *in vivo* imaging with reduced background fluorescence. Fluorescent molecular rotors (FMRs), which exhibit fluorescence when intramolecular rotation is inhibited in the excited state, are of interest as fluorescent molecules that exhibit these properties.

In this study, we aimed to develop a turn-on type fluorescent probe for cellular fluorescence imaging that turns on fluorescence in the presence of target molecules or in response to the intracellular viscous environment. GFP dyes are composed of a benzylideneimidazolinone skeleton. We aimed to develop the derivatives with excellent fluorescence response. We introduced various alkylamines into the benzene ring of GFP dyes as electron-donating groups. In addition, we synthesized a series of derivatives in which a phenyl group was introduced into the benzene ring of GFP dyes. We evaluated their fluorescent properties and excited-state dynamics to understand the effect of these substituents on the fluorescence properties. In this presentation, these details will be reported.

Keywords: Fluorescent probe; GFP fluorophore; Fluorescent molecular rotor; Excited state dynamics

細胞の蛍光イメージングにおいて、標的分子存在下で特異的に蛍光を on にする turn-on 型蛍光プローブが注目されている。この分子は、標的分子非存在下ではほとんど蛍光を発しないため、in vivo でのイメージングにおいて、迅速かつバックグランド蛍光の低減したイメージングが可能になる。このような性質を示す蛍光性分子として、励起状態での分子内回転が抑制された際に蛍光を示す、蛍光性分子ローター (FMR)が注目されている。FMR は、非拘束状態では分子内でのねじれ等を伴う無輻射失活によって励起状態から緩和する。

本研究では、細胞の蛍光イメージングにおいて、標的分子存在下や細胞内の粘度環境に応答して蛍光を on にする turn-on 型蛍光プローブ開発を目指した。鍵となる蛍光分子として、FMR の一種である GFP 色素誘導体を用いることとした。本研究では、ベンジリデンイミダゾリノン骨格からなる GFP 色素を基本骨格として用い、蛍光応答に優れた誘導体の開発を志向し、GFP 色素のベンゼン環に種々の電子供与基(アルキルアミン)や、イミダゾリン環にフェニル基を導入した一連の誘導体の合成およびその蛍光特性を評価した。さらに、これらの置換基が蛍光特性に与える影響を理解するため、励起状態ダイナミクスの計算を行った。本発表ではこれらの詳細について報告する。