

## 環境応答性蛍光色素を有するホスト-ゲストコンジュゲートの包接挙動および光学特性の評価

(福岡大院理<sup>1)</sup>) ○堤 大洋<sup>1</sup>・宮崎 隆聡<sup>1</sup>・林田 修<sup>1</sup>

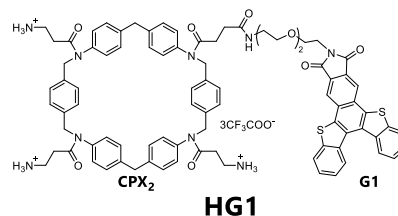
Evaluation of inclusion behavior of host-guest conjugate with environmentally responsive fluorescent dye (<sup>1</sup> *Graduate School of Science, Fukuoka University*)

○Taiyou Tsutsumi,<sup>1</sup> Takaaki Miyazaki,<sup>1</sup> Osamu Hayashida<sup>1</sup>

Host-guest conjugates, consisting of a host molecule and a guest one with an appropriate linker, have attracted much attention due to a promising strategy to design a functional molecule based on weak non-covalent interactions. In this study, we designed a host-guest conjugate **1** (Fig.1.), with a hydrophilic tetraazacyclophane **CPX<sub>2</sub>** and a fluorophore **G1** as host and guest moieties, respectively. **CPX<sub>2</sub>** has a hydrophobic cavity for guest-binding and hydrophilic side chains for water-solubility. **G1** exhibits an environment-dependent fluorescence; for instance, yellow-orange fluorescence in polar solvents and blue in non-polar solvents<sup>1)</sup>. Therefore, **1** is expected to show fluorescence spectral changes, depending on the formation of the intramolecular self-inclusion host-guest complex. According to a time-dependency of the fluorescence spectra of **1** in an aqueous solvent and methanol, the reversible fluorescence change was observed, suggesting that **G1** unit is in and out of **CPX<sub>2</sub>** unit, depending on the surrounding micro environments. In this presentation, the synthesis and optical properties of **1** and its self-inclusion behavior by NMR will be discussed.

**Keywords :** Host-guest conjugate; Cyclophane; Environmentally responsive fluorescent; Inclusion complex; Fluorescence

ホスト分子とゲスト分子が適切なリンカーで連結させたホスト-ゲストコンジュゲートは、非共有結合的な弱い相互作用を利用した機能性分子を構築するための優れた分子設計戦略として注目されている。今回我々は、疎水性空洞を有する親水性テトラアザシクロファン **CPX<sub>2</sub>** と蛍光分子 **G1** をそれぞれホストとゲストとした、ホスト-ゲストコンジュゲート **1** を設計した (Fig. 1.)。 **CPX<sub>2</sub>** はカチオン性の側鎖によって親水性を有し、水系溶媒中でゲスト分子を包接することが出来る。また、**G1** は極性環境では黄橙蛍光、非極性環境では青色蛍光を示す環境応答性蛍光分子である<sup>1)</sup>。そのため、**CPX<sub>2</sub>** と **G1** を適切なリンカーで連結させた **1** は、分子内ホスト-ゲスト複合体の形成挙動に応じた蛍光色変化を示すと期待できる。**1** の蛍光の時間変化を水系溶媒やメタノール中で測定したところ、可逆的な蛍光変化が観測された。これは、微視的環境に応じた **CPX<sub>2</sub>** と **G1** 間での包接体形成挙動を反映させたものと考えられる。本発表では、**1** の合成および光学特性と NMR による評価について議論する。



**Fig. 1.** Host-guest conjugate **1**.

1) T. Miyazaki, T. Tsutsumi, O. Hayashida. *ChemistrySelect*. **2023**, 8, e202301421.