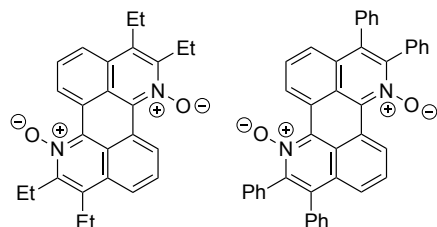


含窒素 PAH の *N*-オキシド化と蛍光特性および親水性の調査(阪大理化¹・京大理化²)○大島 沙名絵¹・高橋 隼人^{1,2}・須賀 健介^{1,2}・齊藤 尚平¹*N*-Oxidation of *N*-doped PAHs: Studies on the fluorescence properties and hydrophilicity(¹Osaka University, ²Kyoto University) ○Sanae Oshima,¹ Hayato Takahashi,^{1,2} Kensuke Suga,^{1,2} Shohei Saito¹

Many types of fluorescent molecules soluble in organic solvents have been reported with a variety of molecular skeletons. However, the fluorescence is often quenched in water or the fluorescence band becomes broadened, even when water solubility is gained by introducing hydrophilic substituents to these skeletons. Therefore, the molecular skeletons of practical water-soluble fluorescent probes, such as rhodamine and BODIPY, lack diversity in the primary backbone structure. In this study, we hypothesized that the key to the molecular design of water-soluble fluorescent probes would be the delocalization of charge to π -conjugated skeletons. To verify this hypothesis, we investigated how the charge distribution, molecular orbitals, fluorescence properties and hydrophilicity are altered by *N*-oxidation of fluorescent nitrogen-containing PAHs such as 1,7-diazaperylene.

Keywords: Fluorescence; *N*-oxidation; Hydrophilicity; Charge distribution; *N*-doped PAHs

有機溶媒に可溶な蛍光分子は様々な分子骨格をもつものが数多く報告されているが、それらの骨格に親水性置換基を導入して水溶性を獲得しても、多くの場合は水中で消光したり、蛍光帯がブロード化したりしてしまう。そのため、実用的な水溶性蛍光プローブの分子骨格は、ローダミンや BODIPY など、基礎となる骨格構造の多様性に乏しい。本研究では、水溶性蛍光プローブの分子設計の鍵は、電荷が π 共役部位に非局在化する点にあるのではないかと考え、1,7-diazaperylene^{1),2)}などの発光性含窒素 PAH の *N*-オキシド化を行い、*N*-オキシド化の前後において電荷の分布や分子軌道、蛍光特性、親水性がどのように変化するかを調査した。

1) T. Okamoto, S. Kumagai, *et al*, *Sci. Adv.* **2020**, 6, eaaz0632.2) Y. Wu, X. Liu, *et al*, *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, 146, 15977-15985.