

高い水溶性を有する凝集誘起発光性ピロール誘導体の合成と評価

(北九州高専) ○大川原 徹・三浦 天聖・竹原 健司

Synthesis and characterization of highly water-soluble pyrrole derivatives with aggregation induced emission properties (National Institute of Technology, Kitakyushu College)○Toru Okawara, Tenki Miura, Kenji Takehara

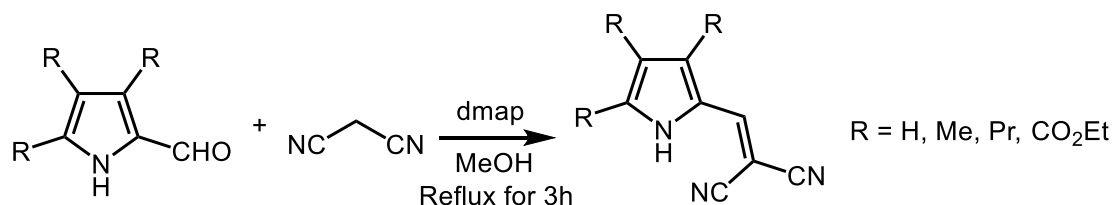
Aggregation induced emission (AIE) compounds have been widely used for bioimaging and materials chemistry. In general, AIE dyes have multiple phenyl-functionalities. This leads to poor aqueous solubility of the compounds. To overcome the solubility problem, using ionic moieties has been the first choice of the molecular designing. In this work, we have developed nonionic yet highly-water soluble pyrrole derivatives and characterized by spectroscopy, crystal structure as well as quantum calculations.

Keywords : Pyrrole, Activated methylene compounds, Water soluble, Aggregation induced emission, Fluorescence

凝集誘起発光 (AIE) 色素は生体イメージングや材料分析など幅広い分野で応用されているが、AIE の発現のために分子内に多数のフェニル基を有するのが一般的である。そのため水溶性が低く、水系への応用のためにはイオン性側鎖の導入が必須であった。本研究では色素の応用範囲を広げるため、非イオン性ながら水溶性の高いピロールを用いた凝集誘起発光性色素の開発を目指した。以前我々が報告したピロール系 AIE 色素は、 1×10^{-4} M という従来の AIE 色素の 10 倍の濃度での運用が可能であり、比較的高い水溶性を有していた一方、純水への溶解度は非常に低かった。そこで、密度汎関数理論 (DFT) 計算により、簡易的に分配係数を見積もり、親水性の評価を行ったところ、ビニルピロールの末端官能基としてシアノ基を有する場合に特に親水性が高くなることが予想された。そこで下記の Scheme 1 に従い新たにマロノニトリルとピロールアルデヒドとの縮合による一連の色素群の合成を行い、それらの水溶性や光物性について評価した。

これらの化合物は熱水に溶解することができ、従来の色素よりも高い水溶性を有することがわかった。また、溶液中では非発光性であるが、固体状態では発光を示す AIE 特性を有することもわかった。

Scheme 1



1) T. Okawara, Y. Matsufuji, K. Mizuno, K. Takehara, T. Nagamura, S. Iwasa, *RSC Adv.* **2019**, 9, 22817-22822.