

ピレニルエチニル基を導入したチオピリミジン誘導体の励起状態

(青学大院理工) ○松岡泰樹・柏原航・鈴木正

Excited States of Newly Synthesized Thiouridine Derivatives with a Pyrenylethynyl Unit
(Graduate School of Science and Engineering, Aoyama Gakuin University) ○Taiki Matsuoka,
Wataru Kashiwara, Tadashi Suzuki

Thionucleobases are attracting attention as photosensitizers for photodynamic therapy (PDT) because they produce singlet oxygen. The absorption band of thionucleobases is in the UVA region, which limits the range of PDT applications, because the wavelength of light that can penetrate deep into the body is 700~800 nm. Therefore, we synthesized a thiopyrimidine derivative (da5PE4TdUrd) with a large π -conjugated system to extend the absorption band to longer wavelengths. The absorption bands were shifted to longer wavelengths than those of conventional thionucleobases. In this study, we synthesized a thiopyrimidine derivative (da5PY4TdUrd) with a pyrenylethynyl group and succeeded in extending the absorption band to longer wavelengths. The quantum yield of singlet oxygen production (Φ_{Δ}) determined was found to be the highest among the conventional thionucleobases.

Keywords : Photodynamic Therapy; Photosensitizer; Thionucleobase; Singlet oxygen

チオ核酸塩基は生体親和性が高く、一重項酸素を生成するため、光線力学療法(PDT)の光増感剤として注目されている。しかし、生体深部まで透過する光の波長は 700~800 nm であるのに対し、一般的なチオ核酸塩基の吸収帯は UVA 領域にあるため PDT の応用範囲は限定される。そこで当研究室では、より長波長側へ吸収帯を伸ばすため π 共役を拡張したフェニルエチニル基を導入したチオピリミジン誘導体 (da5PE4TdUrd) を合成し、吸収帯が従来のチオ核酸塩基に比べて長波長シフトしていることが分かった¹⁾。本研究では、さらに π 共役系を拡張したピレニルエチニル基を導入したチオピリミジン誘導体 (da5PY4TdUrd) を合成した (Fig. 1)。da5PE4TdUrd より長波長側に吸収帯をもつことがわかった (Fig. 2)。また、一重項酸素生成量子収率 (Φ_{Δ}) を 0.54 ± 0.02 と見積もった。この値は現在報告されているチオ核酸塩基の中で最も高い値であることがわかった。これより、今回新規に合成した da5PY4TdUrd は PDT 光増感剤として非常に高いポテンシャルを持っていると考えている。

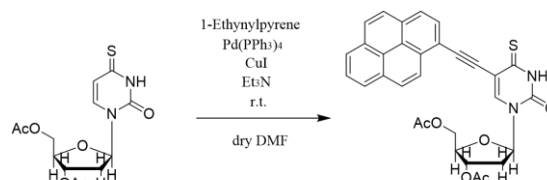


Fig. 1 da5PY4TdUrd の合成.

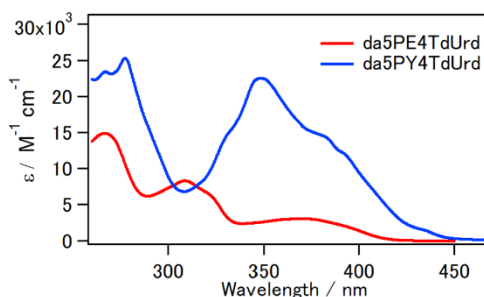


Fig. 2 チオピリミジン誘導体の吸収スペクトル.

1) D. Nonoshita *et al.*, *J. Phys. Chem. A*, **2021**, 125, 597-606.