

## 研究成果報告書

(国立情報学研究所の民間助成研究成果概要データベース・登録原稿)

研究テーマ (和文) AB		DNA 内部の疎水ナノ空間を利用した分子包接と集積			
研究テーマ (欧文) AZ		Molecular inclusion and accumulation by using hydrophobic nanospace within DNA			
研究氏 代表名 者	カタカナ CC	姓)タカダ	名)タダオ	研究期間 B	2010 ~ 2011年
	漢字 CB	高田	忠雄	報告年度 YR	2012年
	ローマ字 CZ	Takada	Tadao	研究機関名	兵庫県立大学
研究代表者 CD 所属機関・職名		兵庫県立大学大学院工学研究科物質系工学専攻・助教			
概要 EA (600 字~800 字程度にまとめてください。)					
<p>任意の分子をナノスケールで自在に配置・配列する技術は、分子スケールのデバイス作製やナノテク応用において必要不可欠な技術である。近年、分子間に働く水素結合、静電相互作用や疎水性相互作用などの“弱い相互作用”を精密に制御することにより、ユニークな構造と優れた物性・機能を併せ持つ新しい超分子材料の開発が精力的に行われている。本研究では、超分子化学的アプローチに基づき、シンプルかつ効率の良い分子修飾法の創出を目指し、DNA 中の塩基対を除くことで分子結合場として“余分な疎水空間”を人工的に創り、この空間を利用して DNA 上に機能分子を固定・集積する研究を行なった。その中で、分子間の会合力が非常に強いカチオン性ペリレンジイミド(PDI)が、疎水空間に選択的に(ほぼ 100%)、かつ非常に強く結合(<math>10^9 \text{ M}^{-1}</math>以上)することを見出した。さらに検討を重ねた結果、一つの疎水空間に対して一つ分子が結合し、空間の数とその配置に応じて分子が自発的に DNA の <math>\pi</math> スタック内に並ぶことが明らかとなった。これらの結果は、DNA 中の疎水空間をテンプレートに利用すれば、機能分子と DNA を共存させるだけで自在に DNA の分子修飾が可能であること、DNA 上への精密な分子配列・集積が可能であることを示している。同様に、疎水性が強いポルフィリンをリガンドとした場合においても空間への特異的な結合が観測され、さらに、空間内で電子ドナー性分子とアクセプター性分子がペアーを形成し電荷移動錯体が特異的に形成されることを見出した。</p>					
キーワード FA	DNA	超分子化学	ペリレンジイミド	分子認識	

(以下は記入しないでください。)

助成財団コード TA					研究課題番号 AA									
研究機関番号 AC					シート番号									

発表文献（この研究を発表した雑誌・図書について記入してください。）									
雑誌	論文標題 <sup>GB</sup>	Molecular arrangement and assembly guided by hydrophobic cavities inside DNA							
	著者名 <sup>GA</sup>	Takada, T. et al.	雑誌名 <sup>GC</sup>	Chemistry A European Journal					
	ページ <sup>GF</sup>	9300~9304	発行年 <sup>GE</sup>	2	0	1	2	巻号 <sup>GD</sup>	
雑誌	論文標題 <sup>GB</sup>								
	著者名 <sup>GA</sup>		雑誌名 <sup>GC</sup>						
	ページ <sup>GF</sup>	~	発行年 <sup>GE</sup>					巻号 <sup>GD</sup>	
雑誌	論文標題 <sup>GB</sup>								
	著者名 <sup>GA</sup>		雑誌名 <sup>GC</sup>						
	ページ <sup>GF</sup>	~	発行年 <sup>GE</sup>					巻号 <sup>GD</sup>	
図書	著者名 <sup>HA</sup>								
	書名 <sup>HC</sup>								
	出版者 <sup>HB</sup>		発行年 <sup>HD</sup>					総ページ <sup>HE</sup>	
図書	著者名 <sup>HA</sup>								
	書名 <sup>HC</sup>								
	出版者 <sup>HB</sup>		発行年 <sup>HD</sup>					総ページ <sup>HE</sup>	

欧文概要 EZ

DNA is a unique yet useful material to construct nanoscale molecular arrays along the helix axis. In this work, we show a new approach to create molecular assembly within DNA. Abasic sites were introduced into both strands of DNA to generate a hydrophobic cavity that serves as a host. A planar hydrophobic molecule (water-soluble perylene diimide derivatives, PDI) was used as the ligand molecule. In the presence of the DNA with the cavity, the binding of the PDI was found to site-specifically occur in the hydrophobic cavity. The molecular assembly and arrangement of more than two PDI molecules was performed by changing the sizes and positions of the cavities.