

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		疎水表面の精密デザインに基づく新規両親媒性分子の開発			
研究テーマ (欧文) AZ		Development of novel amphiphiles based on precise design of hydrophobic surfaces			
研究氏 代 表 名 者	カタカナ CC	姓)ヒラオカ	名)シュウイチ	研究期間 B	2011～ 2012 年
	漢字 CB	平岡	秀一	報告年度 YR	2013 年
	ローマ字 CZ	Hiraoka	Shuichi	研究機関名	東京大学
研究代表者 CD 所属機関・職名		東京大学・大学院総合文化研究科・教授			
<p>概要 EA (600 字～800 字程度にまとめて下さい。)</p> <p>van der Waals (vdW) 力は分子間力の中で最も弱い相互作用であるが、生命系における機能発現に重要な力である。一方、人工系においては、vdW 力に比べ強く、さらに明確な方向性をもった、水素結合や配位結合などの分子間相互作用が機能性自己集合体の構築における主な駆動力として利用されてきた。これは、分子表面間に働く vdW 力を自在にコントロールするための設計原理が確立されていないためである。本研究では、複雑な分子表面間に働く vdW 力を半定量的に見積る新手法として SAVPR (Surface Analysis with varying probe radius) 法を開発し、これを我々が開発した主に vdW 力により自己組織化する人工系の箱形六量体である「ナノキューブ」に適用し、新規両親媒性分子の設計指針の確立を行った。実験的にナノキューブを形成することが確認されている分子(1)と1の3つのメチル基を水素に置換することでナノキューブを形成できない歯車状分子(2)について SAVPR 法により解析を行った。その結果、1は2に比べ面間距離が0.4-0.8 Åの接触面積が多く、これらの面間距離において大きなvdW力が働いていることが1の自己組織化体を安定化していることが明らかとなった。このように、SAVPR法により、複雑な三次元表面間に働くvdW力を定性的に簡便かつ容易に評価することが可能となり、これを利用することで、今後人工系および生命系の分子に対して、複雑分子表面間に働くvdW力の寄与を調べることも可能となった。</p>					
キーワード FA	疎水効果	van der Waals 力	自己組織化		

(以下は記入しないで下さい。)

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下さい。）									
雑誌	論文標題 ^{GB}								
	著者名 ^{GA}		雑誌名 ^{GC}						
	ページ ^{GF}	～	発行年 ^{GE}					巻号 ^{GD}	
雑誌	論文標題 ^{GB}								
	著者名 ^{GA}		雑誌名 ^{GC}						
	ページ ^{GF}	～	発行年 ^{GE}					巻号 ^{GD}	
雑誌	論文標題 ^{GB}								
	著者名 ^{GA}		雑誌名 ^{GC}						
	ページ ^{GF}	～	発行年 ^{GE}					巻号 ^{GD}	
図書	著者名 ^{HA}								
	書名 ^{HC}								
	出版者 ^{HB}		発行年 ^{HD}					総ページ ^{HE}	
図書	著者名 ^{HA}								
	書名 ^{HC}								
	出版者 ^{HB}		発行年 ^{HD}					総ページ ^{HE}	

欧文概要^{EZ}

vdW (vdW) force is the most weak among molecular interactions but is utilized in a variety of aspects to function properly in biological system. In artificial system, on the other hand, stronger and more directional molecular interactions such as hydrogen bonding and coordination bonding have been used deliberately to construct functional self-assembled structures. This is because a design principle that facilitates utilization of vdW interaction in molecular design has not yet been established so far. In this research project, we developed a novel method, surface analysis with varying probe radius (SAVPR), to evaluate vdW interactions between complex molecular surfaces semi-quantitatively and assessed the degree of molecular engagement of a self-assembled “nanocube” developed by us previously that is a box-shaped hexamer consisting of gear-shaped amphiphiles. We compared the degree of molecular engagement of amphiphile **1** that can stably form nanocube, **1**₆, in an aqueous methanol with amphiphile **2**, whose structure is similar to **1** but three methyl groups of **1** are replaced with hydrogens, and **2** exists as a monomer in the same solvent. As a result of surface analysis of **1**₆ and **2**₆, it was found that the contact surface area with distance of 0.4 – 0.8 Å in **1**₆ is much greater than that of **2**₆, indicating that greater stability of **1**₆ should arise from large vdW interactions working in the contact surfaces with 0.4 – 0.8 Å. We demonstrate that SAVPR is an easy and reliable method for evaluating the molecular engagement between complex molecular surfaces. This method would be widely utilized for the semi-quantitative analysis of vdW interactions between complex molecular surfaces both in biological and artificial systems.