特異値分解法を用いた有機化合物の吸収スペクトル解析
– DNA と相互作用するヘミシアニン色素への適用

Analysis of UV-vis spectra for organic composites with singular value decomposition – Application to hemicyanine dyes interacting with DNA

千歳科技大　○川辺 豊，吉川 俊雄，(M2)鈴木 優稀

CIST, °Yutaka Kawabe, Toshio Yoshikawa, Yuki Suzuki

E-mail: y-kawabe@photon.chitose.ac.jp

複数の要素から構成される吸収スペクトルデータから成分を分離する手法として、特異値分解（SVD）が広く用いられている。しかしながら有機化合物の UV 可視スペクトルのようにブロードでかつ相互の重なりが大きい場合、データのみから元のスペクトルを完全に復元することは不可能であり、何らかの仮定を必要とする。以前われわれは、高分子中にドープされたアゾカルバゾール化合物において、トランス体と短波長光照射によって生成するシス体のスペクトルの分離を行い、シス体のスペクトルを決定することができた。[1]

一方、われわれは近年 DNA 複合体固体膜にドープした有機色素による色素レーザーの検討を行っている。[2] これはヘミシアニン系色素の発光収率が DNA との相互作用によって著しく増大することを利用したものである。蛍光増大の機構は必ずしも明らかではないが、色素水溶液中に DNA を加えることで、蛍光増大と吸収スペクトルの長波長シフトが起こることがわかった。両者の相関を定量的に評価するため、SVD によるスペクトルの分解を行った。4-[4-(dimethylamino) stylyl]-1-methylpyridinium iodide (pHemi1) 水溶液（10^{-5}M）中に DNA を加えた際の吸収スペクトル（Fig.1a）は 2 成分（Fig.1b）の和でほぼ近似できることが示された。一方の成分（DNA に結合した分子からの寄与）の量と蛍光強度が相関していることがわかる（Fig.1c）。

本方法の他の系への応用、すなわち先に述べたアゾカルバゾールの光異性化生成物やモノマー・ダイマーの混合系についても当日報告する予定である。

なお本研究の一部は日本科学技術振興機構の「戦略的イノベーション創出推進プログラム（S-イノベ）」の一環として行われた。また文部科学省ナノテクノロジープラットフォーム事業（分子・物質合成）の支援を受けた。

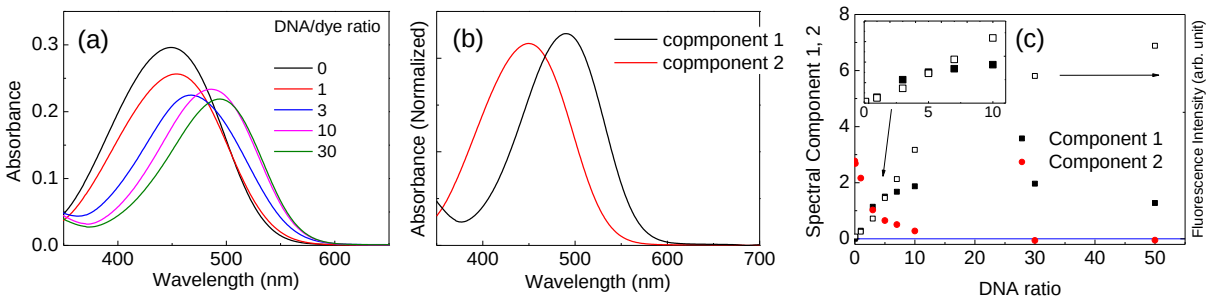

Fig.1 (a) Change of absorption spectra of p-Hemi1 by addition of DNA. (b) Two spectral components extracted from multiple spectra by SVD method. (c) Evolution of component magnitudes and fluorescence intensity.

[1] T. Yoshikawa et al., *J. Opt. Soc. Am. B*, **32**, 622–627 (2015).
[2] Y. Kawabe, *Proc SPIE*, **9928**, 992806 (2016).

© 2017年 応用物理学会