

アデニンとウラシルにアルキル基を導入した核酸塩基アルキル誘導体の熱挙動

(東理大理¹⁾) ○能澤 涼¹・本田 暁紀¹・宮村 一夫¹

Thermal behavior of alkyl derivatives of nucleobases with alkyl groups introduced into adenine and uracil (*Faculty of Science, Tokyo University of Science*) ○Ryo Nozawa,¹ Akinori Honda,¹ Kazuo Miyamura¹

Nucleobases, such as adenine and thymine, are biomolecules and form complementary hydrogen bonds. When the alkyl derivatives of adenine and thymine are mixed, a unique thermal behavior, cold crystallization, is observed.)¹⁾ In cold crystallization behavior, molecules do not crystallize during the cooling process, but crystallize during the heating process. The mechanism of this thermal behavior still needs to be investigated. In this study, we investigated the thermal behavior of alkyl derivatives of adenine and uracil by differential scanning calorimetry. The purpose of this study was to investigate whether cold crystallization occurs and how the thermal behavior changes depending on the alkyl chain length.

Differential scanning calorimetry and optical microscopy revealed that dodecyl adenine and uracil exhibited the usual phase transition : melting in heating and crystallization in cooling were observed. Cold crystallization occurred only when both molecules were mixed in a molar ratio of 1:1. Infrared spectroscopy revealed the formation of complementary hydrogen bonds between adenine and uracil in the crystals formed by cold crystallization.

Keywords : *Nucleobase, Differential Scanning Calorimetry, Cold Crystallization*

アデニンやチミンなどの核酸塩基は生体分子であり、相補的な水素結合をとる。核酸塩基にアルキル基を導入したアルキル誘導体について、アデニンとチミンのそれぞれのアルキル誘導体を混合すると、特異な熱挙動である冷結晶化が発現する¹⁾。冷結晶化とは、物質が冷却過程で結晶化せず、昇温過程で結晶化する現象である。このような特異な熱挙動を示すメカニズムについては未だに追求が必要である。本研究では、核酸塩基対のアデニンとウラシルにアルキル基を導入した核酸塩基アルキル誘導体について示差走査熱量測定によって熱挙動を調べた。冷結晶化の発現の有無、アルキル鎖長の変化による熱挙動の変化を調べることを目的とした。

実際に、示差走査熱量測定と光学顕微鏡で観察した結果、ドデシル置換したアデニンとウラシル単体では、通常の相転移が起こった(過熱過程で融解し、冷却過程で凝固した)。両分子をモル比 1:1 で混合した場合でのみ冷結晶化が発現した。赤外分光法により解析した結果、冷結晶化で生じた結晶において、アデニンとウラシルの相補的な水素結合が形成されていることが判明した。

1) Cold crystallization in the mixed system of adenine and thymine dodecyl derivatives Ayaka Kimijima, Akinori Honda, Kuniharu Nomoto, Kazuo Miyamura, *CRYSTENGCOMM*. **2019**, *21*, 3142.