

金属連結ペプチド鎖の絡まり特性を利用した高次トーラス分子トポロジーの創出

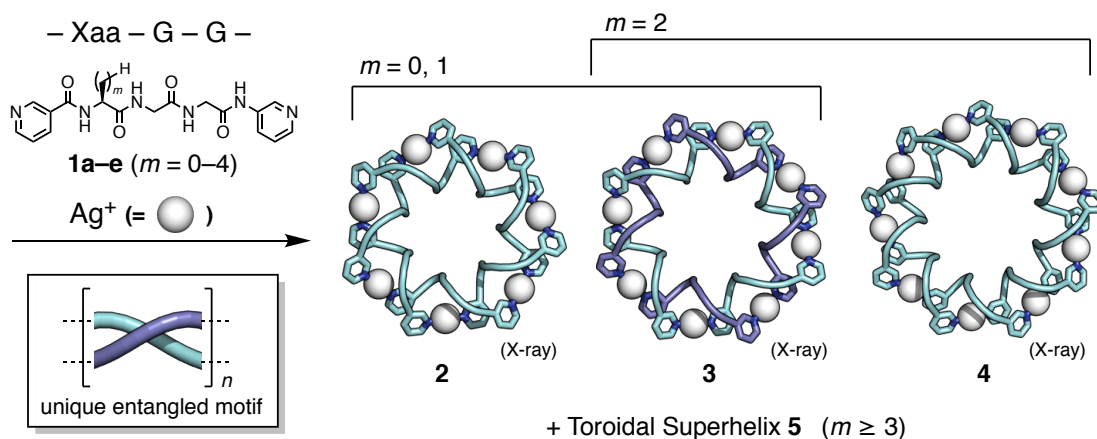
(東大院工¹・JST さきがけ²・分子研³) ○猪俣 祐貴¹・澤田 知久^{1,2}・藤田 誠^{1,3}

Creation of highly-crossed torus topologies by unique entangling nature of metal-peptide chains (¹*Grad. School of Engineering, The University of Tokyo*, ²*JST PRESTO*, ³*IMS*) ○Yuuki Inomata,¹ Tomohisa Sawada,^{1,2} Makoto Fujita^{1,3}

In this work, we succeeded in constructing highly entangled torus molecules by utilizing latent entangling nature of a metal-peptide chain, which consists of a flexible ditopic tripeptide ligand and Ag⁺ ions. In solution, triglycine ligand **1a** and Ag⁺ self-assembled to two highly symmetric species in equilibrium state. The crystals of 7-crossing knot **2** and 8-crossing analogue **3** were obtained respectively, and successfully characterized by X-ray analysis. These molecules were constructed in high regio- and stereoselective manner. Moreover, introduction of longer sidechains filling up the torus cavity (ligands **1b-e**) afforded 9-crossing torus knot **4** and toroidal superhelix **5**, an infinite form of torus knots, with retaining the same entangled motifs.

Keywords : self-assembly; peptide; knot; catenane; double helix

本研究では、柔軟なペプチド配位子と銀イオンの自己集合により、金属連結ペプチド鎖の潜在的に絡まりやすい性質を見出し、高次トーラス分子トポロジーの構築に成功した。トリグリシン配位子 (**1a**) と銀イオンをニトロメタン溶媒中で混合すると、対称性の高い 2 種類の構造が溶液中で生成し、それぞれ 7,8 交点のトーラス結び目分子 (**2, 3**) が高い位置・立体選択性で構築されることを各種 NMR 測定および X 線構造解析により確認した¹⁾。さらに、トーラス構造の空孔を埋めるように側鎖の炭素長を増すと (**1b-e**)、配位子 **1a** と銀イオンからなるペプチド鎖で特異的にみられる絡まり部分構造を維持したまま、9 交差の結び目構造 (**4**) や、トーラス結び目が無限に伸長した超らせん構造 (**5**) が生成することも見出した²⁾。



1) Y. Inomata, T. Sawada, M. Fujita, *Chem* **2020**, 6, 294. 2) *Manuscript in preparation*.