

側鎖の立体的噛み合い構造を利用したβシート性配位ナノチューブの精密集積

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

Precise assembly of β-sheet coordination nanotubes through side chains' steric zipper (¹*Grad. School of Engineering, The University of Tokyo*, ²*JST PRESTO*, ³*IMS*) ○Eisuke Tsunekawa,¹ Tomohisa Sawada,^{1,2} Makoto Fujita^{1,3}

Cross-β structure, which is a secondary structure unique to amyloid fibrils, is a robust structure due to its interdigitation of sidechains called as “steric zipper” formed between the β-sheets. In this work, we artificially constructed such a cross-β structure from folding and assembly of zinc and tetrapeptide ligand **1**, which consists of an alternating amino acid sequence of residues with metal-coordinating sites and hydrophobic residues. After examination of hydrophobic sidechains in the second and fourth residues of the peptide sequence, we revealed two types of ligands, alanine on both (ligand **1**) or alanine on the second and valine on the fourth (ligand **2**), respectively gave self-assembled structures containing steric zipper as single crystal structures.

Keywords: Peptide; β-sheet; Self-assembly; Nanotube; Zinc

アミロイド線維に特有の二次構造であるクロスβ構造は、βシート間に steric zipper と呼ばれる側鎖同士の噛み合いが形成し堅牢な構造をもつ。本研究では、金属配位性の側鎖を有するアミノ酸残基と疎水性残基を交互に配列させたテトラペプチド配位子 **1** を設計し、亜鉛とのフォールディング集合によって人工的にクロスβ構造に誘起することに成功した。2, 4 残基目に疎水性側鎖を有するペプチド配列を検討したところ、どちらもアラニンの場合（配位子 **1**）およびアラニンとバリンの場合（配位子 **2**）から、それぞれ単結晶構造として steric zipper をもつ集積構造の生成が確認された。

