

細孔性ペプチド錯体内で誘起されたキラルな構造の X 線観察

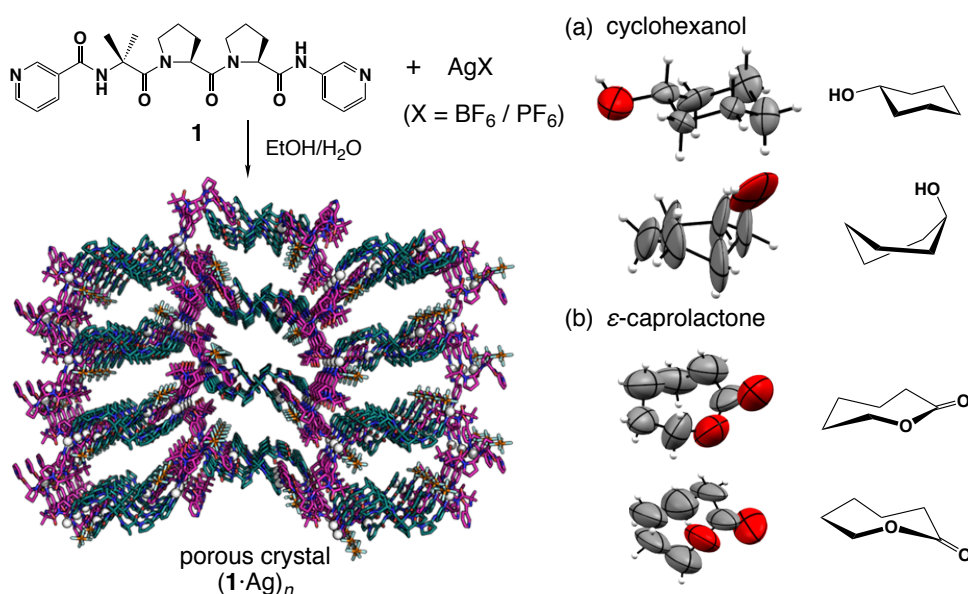
(東大院工¹・JST さきがけ²・分子研³) ○宗 柏伶¹・齋藤 杏実¹・澤田 知久^{1,2}・藤田 誠^{1,3}

X-ray observation of chiral structures induced within a porous peptide complex (¹*Grad. School of Engineering, The University of Tokyo*, ²*JST PRESTO*, ³*IMS*) ○Bailing Zong,¹ Ami Saito,¹ Tomohisa Sawada,^{1,2} Makoto Fujita^{1,3}

In this work, we demonstrated inclusion of cyclic organic molecules and X-ray observation of their conformations by using a metal–peptide porous crystal. First, we synthesized porous crystal ($1 \cdot \text{Ag}$)_n that consisted of tripeptide ligand (**1**) of the Aib–Pro–Pro sequence (Aib: aminoisobutyric acid, Pro: proline) and Ag (I) ions.¹⁾ Then, molecular inclusion was conducted by soaking porous crystal ($1 \cdot \text{Ag}$)_n in the solution of guest molecules. When cyclohexanol was included within the chiral pore, specific induction of the chiral twist-boat conformation was observed in addition to the stable chair conformation by X-ray analysis. Furthermore, specific chirality induction by conformational fixation within the pore was also confirmed in the case of ϵ -caprolactone.

Keywords : Porous crystal, X-ray analysis, Peptide, Chiral Conformation

本研究では、ペプチドと金属からなる細孔性結晶のキラルな空間内への有機環状分子の包接とその配座の X 線観察を試みた。まず、Aib–Pro–Pro 配列 (Aib: アミノイソ酪酸、Pro: プロリン) のトリペプチド配位子 (**1**) と Ag (I) 塩による細孔性結晶 ($1 \cdot \text{Ag}$)_n¹⁾を合成し、その単結晶を対象のゲスト分子の溶液へ直接浸すことによって細孔内へ包接した。シクロヘキサノールを包接させ X 線観察を行ったところ、いす型配座に加えてキラルなねじれ舟形配座の誘起が確認された。また、7員環の ϵ -カプロラクトンについても細孔内でキラルな配座への固定化が空孔内で観測された。



1) A. Saito, T. Sawada, M. Fujita, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, *59*, 20367.