

## 細孔性ペプチド錯体内での Diels–Alder 付加体の X 線観察

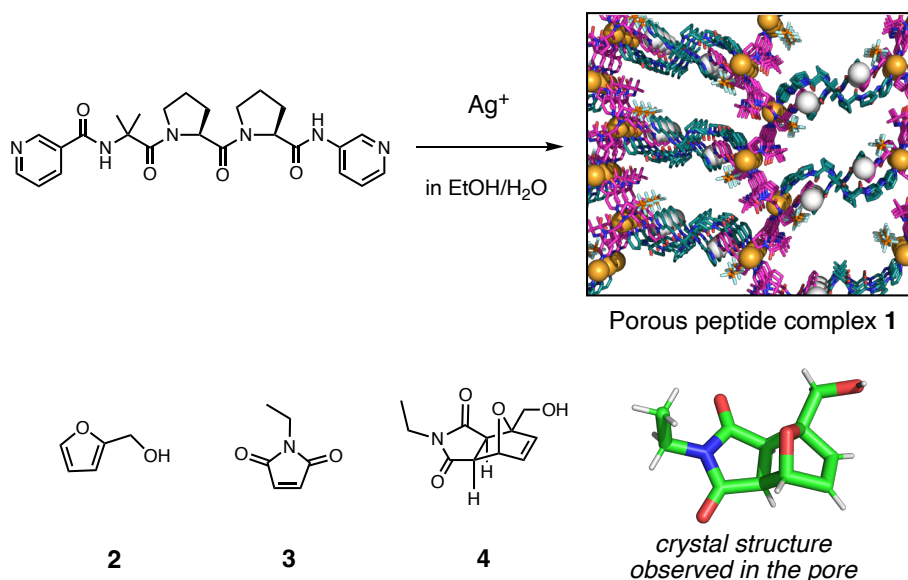
(東大院工<sup>1</sup>・JST さきがけ<sup>2</sup>・分子研<sup>3</sup>) ○土屋 俊介<sup>1</sup>・恒川 英介<sup>1</sup>・澤田 知久<sup>1,2</sup>・藤田 誠<sup>1,3</sup>

X-ray observation of Diels–Alder adducts within a porous peptide complex (<sup>1</sup>*Grad. School of Engineering, The University of Tokyo*, <sup>2</sup>*JST PRESTO*, <sup>3</sup>*IMS*) ○Shunsuke Tsuchiya,<sup>1</sup> Eisuke Tsunekawa,<sup>1</sup> Tomohisa Sawada,<sup>1,2</sup> Makoto Fujita<sup>1,3</sup>

We have successfully constructed a crystalline peptide complex (**1**) by folding and assembly of silver ions and a tripeptide ligand and demonstrated chiral induction of guest molecules within the pores. In this study, we examined the inclusion of furan derivatives and their Diels–Alder reactions within the pores. First, we confirmed the inclusion of furan methyl alcohol (**2**) within **1** by X-ray structural analysis after immersing a single crystal of **1** in the liquid of **2** at 30 °C for 2 days. Furthermore, when *N*-ethyl maleimide (**3**) was added during the inclusion process, we observed the Diels–Alder product (**4**) of a single stereoisomer within the pores by X-ray observation.

**Keywords:** Self-assembly; Peptide; Chiral pores; Diels–Alder reaction; X-ray observation

当研究室では、銀イオンとトリペプチド配位子のフォールディング集合によって結晶性ペプチド錯体 (**1**) を構築し、その細孔内でのゲスト分子の不斉誘起に成功している<sup>1</sup>。本研究では、細孔内を利用したフラン誘導体の包接とそのDiels–Alder反応を検討した。まず、フランメチルアルコール (**2**) に対し **1** の単結晶を30 °Cで2日間浸すことで、**2**が細孔内へ包接されることをX線構造解析により確認した。さらに、包接時に*N*-エチルマレイミド (**3**) を共存させたところ、細孔内に立体構造及び不斉構造の制御されたDiels–Alder生成物 (**4**) がX線観察により確認された。



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