

## 金属・ペプチド鎖で構築されたβバレル構造の溶液挙動の観測

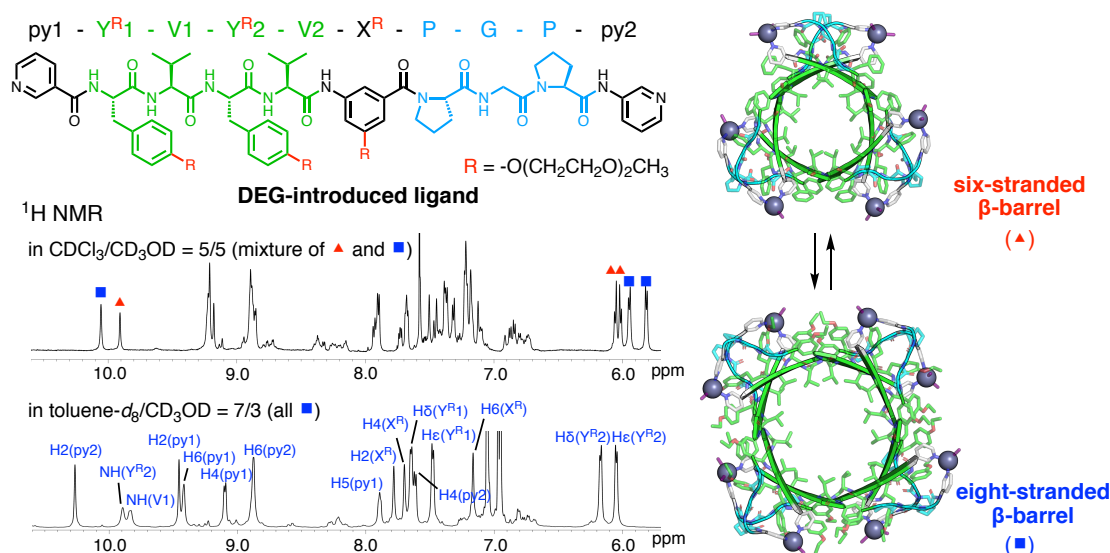
(東大院工<sup>1</sup>・東工大化生研<sup>2</sup>・JST さきがけ<sup>3</sup>・分子研<sup>4</sup>) ○小野塚 凌<sup>1</sup>・澤田 知久<sup>2,3</sup>・藤田 誠<sup>1,4</sup>

Observation of solution state behaviors on a metal-peptide β-barrel (<sup>1</sup>Grad. School of Engineering, <sup>2</sup>The University of Tokyo, Lab. for Chem. & Life Sci., Tokyo Tech, <sup>3</sup>JST PRESTO, <sup>4</sup>IMS) ○Ryo Onozuka,<sup>1</sup> Tomohisa Sawada,<sup>2,3</sup> Makoto Fujita<sup>1,4</sup>

We have studied construction of protein mimics through the concerted folding and assembly of short peptide ligands and metal ions. Previously, precise construction of a β-barrel structure has been achieved by complexation of ZnI<sub>2</sub> and octapeptides, which was composed of β-strand- and loop-forming sequences.<sup>1)</sup> We have also succeeded in its solubilization by introducing diethyleneglycol (DEG) chains into the ligand.<sup>2)</sup> In this study, we conducted the structural analysis on the two types of six- and eight-stranded β-barrel structures in equilibrium by using various types of two-dimensional NMR techniques. We also revealed the tendency to increase the ratio of the eight-stranded β-barrel in aromatic solvents.

**Keywords :** peptide; β-barrel; β-sheet; self-assembly; folding

当研究室では、短鎖ペプチドと金属イオンのフォールディング集合によるタンパク質の模倣構造の構築を進めている。これまでに、βストランドをとる FV FV 配列とループ配座をとる PGP 配列を、芳香族スパーサーを介して繋ぎ合わせたオクタペプチド配位子とヨウ化亜鉛の錯形成により、精密なβバレル構造の構築に成功している<sup>1)</sup>。ジエチレングリコール (DEG) 鎖を配位子に導入することで、その可溶化にも成功した<sup>2)</sup>。今回、各種二次元 NMR 測定により、溶液中で平衡状態にある 6 本鎖と 8 本鎖からなる 2 種類のβバレル構造の構造解析を行った。また、芳香族溶媒中では、8 本鎖のβバレル構造の生成比率が増加する傾向も見出し、各種溶媒によるβバレル構造の安定化効果を考察した。



1) *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 8644. 2) 日本化学会第 102 春季年会 G301-2pm-5.