$M_{60}L_{60}$ ペプチド巨大ケージの外面化学修飾

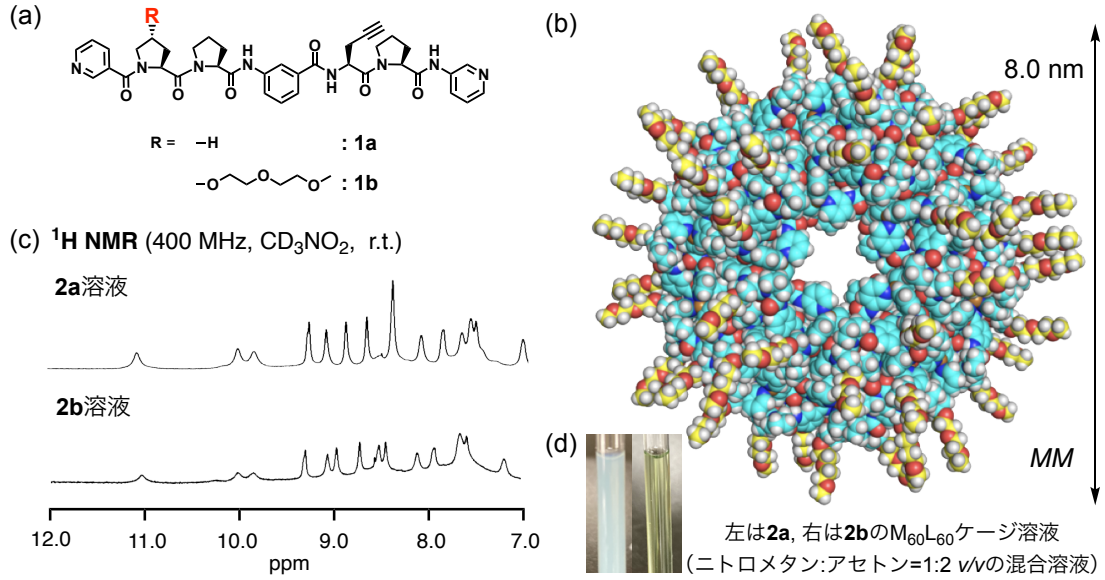
（東工大 化生研[1], JST さきがけ[2]）○佐柄 直[1]・吉沢 道人[1]・澤田 知久[1,2]

Chemical modification of the external surface of an $M_{60}L_{60}$ peptide giant cage

([1]*Lab. for Chem. & Life Sci., Tokyo Tech,* [2]*JST PRESTO*) ○Nao Sagara,[1] Michito Yoshizawa,[1] Tomohisa Sawada[1,2]

Pentapeptide ligand **1a** (Fig. a) forms a giant peptide cage **2a** (6.3 nm in diameter) with an $M_{60}L_{60}$ composition (M: metal ion, L: peptide ligand) by metal-induced folding and assembly. In this study, solubilization in various organic solvents was investigated for this assembly generated in nitromethane solvent. We designed new peptide ligand **1b** with a diethylene glycol (DEG) group (Fig. a) for the introduction of 60 DEG chains on the outer surface of the cage (Fig.b). First, the ^{1}H NMR spectrum after complexation with Cu(I) ions in nitromethane showed a symmetric signal pattern of aromatic and amide protons that was consistent with that using **2a**, which revealed the formation of the desired cage structure **2b** (Fig. c). We then examined the solubility toward acetone by subsequent addition of the double volume of it to the complex solution, which confirmed the enhanced solubility from the unsubstituted cage (Fig. d).
Keywords: self-assembly, folding, peptide, coordination cage, chemical modification

ペンタペプチド配位子 **1a**（図 a）は、金属イオンとのフォールディング集合によって、$M_{60}L_{60}$ 組成（M：金属イオン、L：ペプチド配位子）の巨大ペプチドケージ **2a**（直径 6.3 nm）を形成する（CSJ 第 102 春季年会 H201-1am-10）。今回、ニトロメタン溶媒中においてのみ生成する集合構造体 **2a** に対し、各種有機溶媒への可溶化を達成した。ジエチレングリコール（DEG）基を導入したペプチド配位子 **1b**（図 a)を設計・合成し、ケージの外面に 60 本導入することを検討した（図 b)。まず、ニトロメタン中での銅(I)イオンと **1b** の錯形成後の ^{1}H NMR スペクトルでは、芳香族とアミドプロトンの対称的なシグナルパターンが **2a** を用いた場合と一致し、目的のケージ **2b** の生成を確認した(図 c)。続いて、この溶液へアセトンを体積 2 倍量添加したところ、無置換のケージからの溶解性の向上が確認された(図 d)。



© The Chemical Society of Japan