

D アミノ酸の導入による β シート二重螺旋構造のフォールディング集合

(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}

Folding and assembly of double helical β -sheets by using a D-amino acid residue (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}

In this work, we adopted silver ion-induced folding and assembly against a β -sheet forming pentapeptide introduced with coordinating side chains in order to induce a novel β -sheet structure. As a result, complexation with a peptide ligand composed entirely of L-amino acids (**1**) led to gelation due to its rapid aggregation. In contrast, peptide ligand **2** containing a D-amino acid residue afforded a unique double helical structure composed of two layers of anti-parallel β -sheets. Crystal structure of ligand **2** without metal ions afforded a flat mixed β -sheet. Thus, we elucidated high-ordered supramolecular β -sheet structure was enabled by the twist generated through metal cross-linking of side chains.

Keywords: Peptide; D-Amino acid; Anti-parallel β -sheet; Self-assembly; Double helical structure

本研究では、配位性側鎖を導入した β シート性のペンタペプチドに対して、銀イオンとの配位結合を用いたフォールディング集合を適用し、新規 β シート構造の誘起を検討した。その結果、全て L 体のアミノ酸からなるペプチド配位子 **1** からは激しい凝集によるゲルの形成が見られたのに対し、D アミノ酸を 1 ヶ所導入したペプチド配位子 **2** において、単結晶の析出が見られた。これに対し、単結晶 X 線構造解析を行うと、2 本の逆平行 β シートからなる特異な二重螺旋構造が生成していることがわかった。一方、配位子 **2** のみの単結晶からは平面状の混合 β シートが見られた。以上より、側鎖の配位架橋により生まれたねじれが β シートの高次会合構造を誘起することを明らかにした。

