

金属ペプチド絡まりネットワークにおける有限・無限変換

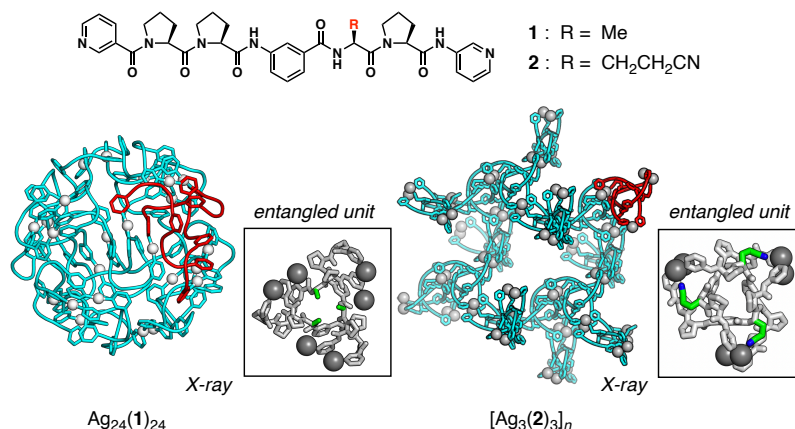
(東大院工¹・JST さきがけ²・分子研³) ○小熊 蒼汰¹・猪俣 祐貴¹・澤田 知久^{1,2}・藤田 誠^{1,3}

Discrete/infinite structural conversion in metal-peptide entangled nets (¹*Grad. Sch. of Eng., The Univ. of Tokyo*, ²*JST PRESTO*, ³*IMS*) ○Sota Oguma,¹ Yuuki Inomata,¹ Tomohisa Sawada,^{1,2} Makoto Fujita^{1,3}

Recently, we have demonstrated folding and assembly of a bidentate pentapeptide ligand (**1**) and silver(I) ions and succeeded in construction of giant spherical shell structure $\text{Ag}_{24}(\mathbf{1})_{24}$. The structure had a polyhedral topology composed of highly intertwined metal-linked peptide rings. In this study, we carried out complexation using silver (I) ions and a tridentate pentapeptide ligand (**2**), in which the alanine side chain of **1** was changed to the cyanoethyl group. Although NMR measurements suggested the formation of spherical shell structure $\text{Ag}_{24}(\mathbf{2})_{24}$, we confirmed the formation of highly entangled infinite network structure $[\text{Ag}_3(\mathbf{2})_3]_n$ after crystallization. It was found that the weak coordination bonds between silver(I) ions and cyano groups changed the entangled unit structure, which led the structural conversion from the finite to the infinite entangled network structure.

Keywords: self-assembly; peptide; coordination network; topology; knot

我々はこれまでに、二座ペンタペプチド配位子 (**1**) と銀 (I) イオンのフォールディング集合により、巨大球殻構造 $\text{Ag}_{24}(\mathbf{1})_{24}$ の構築に成功している^[1]。その構造は、銀イオンとペプチドが連なったリングが高度に絡まり合った多面体のトポロジーを有していた。本研究では、**1** のアラニン側鎖をシアノエチル基に変更した三座ペンタペプチド配位子 (**2**) と銀 (I) イオンを用いて錯形成を行った。NMR 測定により球殻構造 $\text{Ag}_{24}(\mathbf{2})_{24}$ の生成が示唆されたものの、結晶化により高度に絡まり合った無限ネットワーク構造 $[\text{Ag}_3(\mathbf{2})_3]_n$ の生成が確認された。銀 (I) イオンとシアノ基間に弱い配位結合が働くことで、絡まりユニット構造が変化し、有限から無限の絡まりネットワーク構造へ変換されたことがわかった。



[1] T. Sawada, Y. Inomata, K. Shimokawa, M. Fujita, *Nat. Commun.* **2019**, *10*, 5687.