

60 交点の絡まりトポロジーをもつ巨大金属ペプチド球殻構造の合成

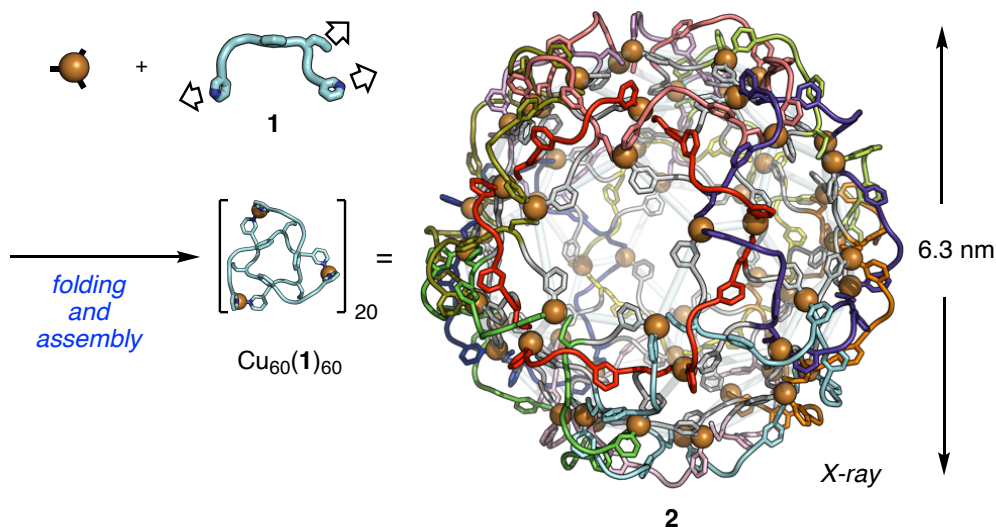
(東大院工¹・JST さきがけ²・分子研³) ○猪俣 祐貴¹・澤田 知久^{1,2}・藤田 誠^{1,3}

Synthesis of a giant metal-peptide capsule with a 60-crossing entangled topology (¹*Grad. School of Engineering, The University of Tokyo*, ²*JST PRESTO*, ³*IMS*) ○Yuuki Inomata,¹ Tomohisa Sawada,^{1,2} Makoto Fujita^{1,3}

Our group has reported synthesis of a spherical capsular framework via the folding and assembly of a ditopic pentapeptide ligand and Ag(I) ions.¹⁾ The capsule had a 24-crossing topology in which entwining metal-linked peptide rings formed a polyhedral shape. Toward higher order molecular topologies, in the present study, the complexation of a tridentate peptide ligand (**1**) with tritopic Cu(I) ions was investigated. ¹H NMR measurement of the complex confirmed the quantitative formation of a giant self-assembled structure. The synchrotron X-ray crystallography revealed spherical shell **2** with a 6.3 nm-diameter. The structure of **2**, which had the composition of Cu₆₀(**1**)₆₀, possessed a 60-crossing entangled topology, in which twenty sets of Cu₃(**1**)₃ trefoil knot motifs arranged in a polyhedral shape, and a huge inner cavity of a *ca.* 4 nm-diameter.

Keywords: Self-assembly; Peptide; Polyhedra; Knot; Topology

当研究室では、二座ペンタペプチド配位子と銀 (I) イオンのフォールディング集合により、球殻状のカプセル構造の合成を報告している¹⁾。その構造は、金属連結ペプチド鎖からなるリングが多面体状に絡み合う 24 交点数のトポロジーを有していた。本研究では、さらに高次のトポロジー構造構築を目指し、三座ペプチド配位子 **1** と三配位銅 (I) イオンの錯形成を検討した。錯形成後の ¹H NMR 測定より巨大な自己集合構造の定量的な形成が確認され、放射光を用いた X 線構造解析によって直径 6.3 nm の球殻構造 **2** の生成を明らかにした。60 個の銅 (I) イオンと 60 個のペプチド配位子からなる **2** は、60 交点数のトポロジー（三つ葉結び目状の面 20 枚からなる多面体の幾何構造）を有し、内部に約 4 nm 径の空間を有していた。



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