

原子・分子の自在配列と特性・機能
2020 年度採択研究者

2021 年度 年次報告書

澤田 知久

東京大学 大学院工学系研究科
准教授

可逆的ペプチド鎖による高次ナノ構造構築法の開発

§ 1. 研究成果の概要

本研究では、可逆的な結合によって連結されたペプチド鎖が創り出す高次ナノ構造とその機能を探索している。可逆的なペプチド鎖がもたらす一つの特徴として、既存の合成手法では到達できない高度な絡まり構造の構築が可能であることが挙げられる。しかしながら、本手法には設計性に乏しいという課題があった。そこで今年度の研究では、これまで構築した絡まりナノ構造(トーラス結び目構造)の構造を基に、緻密な分子設計による絡まりポロジの拡張を試みた。具体的には、トーラス結び目構造の中央部の空孔にかさ高いアミノ酸側鎖を配置し、立体障害を設計することによって結び目構造を段階的に拡張することを検討した。このとき、ペプチド主鎖のコンホメーションに影響を与えないアミノ酸残基である点も考慮し、直鎖アルキル基を側鎖にもつペプチド配列を設計した。

ペプチド配位子の合成と錯形成を実施し、各種 NMR 測定および単結晶X線構造解析を行うことで、狙い通りに7および8交点数の結び目構造を、新たに9および10交点数の結び目構造へと拡張することに成功した。さらに側鎖のアルキル鎖をさらに伸長したペプチド配位子を検討したところ、予想外にトロイダル超らせん構造が得られることも発見した。この構造は、10交点のトーラス結び目構造が、開環し無限に連なった超らせんポリマー構造と見なすことができ、有限分子構造から1次元ポリマー構造への展開を実現したといえる。

以上、今年度の研究では配列設計に基づく高次トーラス結び目構造の精密構築とトロイダル超らせん構造の開拓を行った。今後、本手法は、有限の絡まり分子の設計・構築のみならず、高次の絡まりをもつ無限構造の構築法への展開も期待できる。

【代表的な原著論文情報】

- 1) “Metal-Peptide Nonafoil Knots and Decafoil Supercoils”, *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 143, 16734-16739 (doi: 10.1021/jacs.1c08094)
- 2) “Orderly Entangled Nanostructures of Metal-Peptide Strands”, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, vol. 94, 2342-2350 (doi: 10.1246/bcsj.20210218)