

## M<sub>60</sub>L<sub>60</sub> ペプチド配位ケージ骨格を利用した多成分自己集合

(東京科学大 化生研<sup>1</sup>・JST さきがけ<sup>2</sup>) ○金田愛<sup>1</sup>・日野栄<sup>1</sup>・吉沢道人<sup>1</sup>・澤田知久<sup>1,2</sup>

Multicomponent self-assembly using an M<sub>60</sub>L<sub>60</sub> metal-peptide cage framework

(<sup>1</sup>Lab. for Chem. & Life Sci., Science Tokyo, <sup>2</sup>JST PRESTO) ○Ai Kaneda,<sup>1</sup> Shiori Hino,<sup>1</sup> Michito Yoshizawa,<sup>1</sup> Tomohisa Sawada<sup>1,2</sup>

The folding and assembly of Cu(II) ions (M) and a tritopic peptide ligand (L) afforded a giant peptide M<sub>60</sub>L<sub>60</sub> cage (Fig. a, submitted). The outer surface of the cage could also be modified with diethylene glycol (DEG) chains, which is enabled by the modification on the N-terminal proline in the ligand (L<sup>BzI</sup> in Fig. a; The 104th CSJ Meeting F1231-1am-04). Here we report the self-assembly of M<sub>60</sub>L<sub>60</sub> cages using mixed ligands with functional groups. First, a new benzyl-attached ligand (L<sup>BzI</sup>) was synthesized and the cage formation using L<sup>BzI</sup> was confirmed by <sup>1</sup>H DOSY NMR and SAXS measurements (Fig. b-d). When the complexation was carried out by mixing L<sup>DEG</sup> and L<sup>BzI</sup> in a 1:1 ratio, respective cage signals were independently observed in the <sup>1</sup>H NMR spectra, suggesting self-assembly in a self-sorting manner (Fig. e).

**Keywords:** self-assembly, folding, peptide, coordination cage, chemical modification

Cu(II)イオン(M)と三座ペプチド配位子(L)のフォールディング集合により、M<sub>60</sub>L<sub>60</sub>組成の巨大ペプチドケージが形成する(図 a、論文投稿中)。配列中のN末端側のプロリンにジエチレングリコール(DEG)基を導入した配位子(L<sup>DEG</sup>)を用いることで、ケージの外面修飾も可能である(CSJ第104春季年会F1231-1am-04)。今回、官能基を持つ混合配位子を用いたM<sub>60</sub>L<sub>60</sub>ケージの自己集合について報告する。まず、ベンジル基を導入したペプチド配位子L<sup>BzI</sup>を新たに合成し、Cu(II)イオンと錯形成したところ、<sup>1</sup>H DOSY NMR測定とSAXS測定より、単独でのケージ形成を確認した(図 b-d)。次に、2種類の配位子L<sup>DEG</sup>とL<sup>BzI</sup>を1:1で混合して錯形成したところ、<sup>1</sup>H NMRスペクトルにおいて、それぞれ単独で形成した際のケージのシグナルがどちらも観測されたことから、セルフソーティング挙動が示唆された(図 e)。

