

二分岐設計に基づく β ヘリックス二重鎖の高次集合構造形成

(東京科学大 化生研¹・JST さきがけ²) ○遠藤祐生¹・吉沢道人¹・澤田知久^{1,2}

Higher-order assembly of double-stranded β -helices based on a two-branch design
(¹Lab. for Chem. & Life Sci., Science Tokyo, ²JST PRESTO) ○Masaki Endo,¹ Michito Yoshizawa,¹ Tomohisa Sawada^{1,2}

DNA double helices are used as excellent building blocks for the artificial construction of nanostructures, whereas the use of peptide double helices is scarcely explored. We have previously reported an octapeptide sequence that uniquely constructs a double-stranded β -helix (ds- β -helix) by cross-linking side chains with ZnI_2 (*Nat Sci.* **2021**, *1*, e10008). Here, we synthesized a two-branched ligand (**1**) with two of this octapeptide sequence in an aromatic core, and succeeded in creating a higher-order assembly based on the ds- β -helix formation (Fig. a). ¹H DOSY NMR measurements after complexation of **1** with ZnI_2 revealed the formation of a single structure larger than the ds- β -helix (Fig. b). From AFM measurements, the formation of a spherical structure with a diameter of about 4 nm was observed (Fig. c). Molecular modeling based on these data suggested the formation of pentameric assembly $(\text{ZnI}_2)_{10}(\mathbf{1})_5$.

Keywords: double helix, β -sheet, self-assembly, nanostructure, hydrogen bond

DNA 二重らせんはナノ構造を人工構築するための優れた構成要素として広く用いられるのに対し、ペプチドの二重らせんの利用は未開拓である。我々はこれまでに、 ZnI_2 により側鎖を金属架橋することで、 β ヘリックス二重鎖を一義構築するオクタペプチド配列を報告している (*Nat Sci.* **2021**, *1*, e10008)。そこで本研究では、この配列を芳香環の2ヶ所に導入した分岐型配位子 **1** を合成し、ペプチド性の β ヘリックス二重鎖を基盤とする高次集合構造の作製に成功した (図 a)。**1** と ZnI_2 との錯形成後の ¹H DOSY NMR 測定より、二重鎖単独よりも大きな一義構造の形成が確認された (図 b)。また AFM 測定では、直径約 4 nm の球状構造の形成が観測された (図 c)。これらのデータをもとに分子モデリングを行うことで、五量体 $(\text{ZnI}_2)_{10}(\mathbf{1})_5$ の形成が示唆された。

