

【目的】ペプチド間相互作用の解明は、タンパク質のフォールディングや機能発現機構を理解する上で極めて重要である。このため、ペプチド間相互作用を調べる目的で鑄型分子にペプチド鎖を共有結合させて天然型タンパク質を簡略化した人工タンパク質、*template-assembled synthetic protein (TASP)* が合成され、その構造および機能解析研究が行われている。我々は合成した TASP の立体構造を X 線結晶構造解析によって明らかとし、ペプチド間相互作用を構造学的に解明すべく本研究に着手した。今回は、TASP の鑄型分子として合成した calix[6]arene-*p*-bromophenylalanine 複合体 **1** の構造学的性質を明らかとするため、その X 線結晶構造解析を行った。また、**1** のカリウム塩の X 線結晶構造解析も行い、カリウムイオンが立体構造に与える影響を調べた。

【結果】**1** は calixarene 部分が疎水性、*p*-bromophenylalanine 部分が親水性を示すため両親媒性となり、結晶中では脂質二重膜のような層状構造を形成していた。しかしながら、そのカリウム塩は 8 分子で立方体を形成し、外側に calixarene 部分に向け、内側に *p*-bromophenylalanine 部分に向けていた。また、カリウム塩では **1** では見られなかった高い対称性を有していた。

