

¹³C NUCLEAR MAGNETIC RESONANCEによる
CYCLO(L-Phe-L-Pro-Gly-L-Pro)₂の
コンホメーションの研究

石津 隆, 藤井亜由美, 野口俊作

Chem. Pharm. Bull., 39(6), 1617-1619 (1991)

CONFORMATIONAL STUDIES OF CYCLO (L-Phe-L-Pro-Gly-L-Pro)₂
BY ¹³C NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE

Takashi ISHIZU, Ayumi FUJII, and Shunsaku NOGUCHI

ABSTRACT The ¹³C NMR spectrum (Fig. 2,1) of cyclooctapeptide cyclo-(L-Phe-L-Pro-Gly-L-Pro)₂ (A) in CDCl₃ suggested that its conformation involved the coexistence of two kinds of C₂-symmetric conformation with trans-trans-trans-trans and cis-trans-trans-trans forms. Adding 0.5 equivalent of CsSCN or one equivalent of DL-Phe-OMe·HCl to the solution of cyclopeptide (A) in CDCl₃ yielded ¹³C NMR spectra (Fig. 2,2 and Table I) which suggested a single C₂-symmetric conformation with trans-trans-trans-trans form, resulting from the formation of complexes with CsSCN or DL-Phe-OMe·HCl. The ¹³C NMR spectrum of complexes of A with DL-Phe-OMe·HCl displayed separate resonances²⁾ for C_r, C_o,¹⁾ C_m,¹⁾ C_α, and C_β of D-Phe-OMe·HCl and L-Phe-OMe·HCl (Table I).

抄録 シクロオクタペプチド cyclo(L-Phe-L-Pro-Gly-L-Pro)₂(A)のCDCl₃中における¹³C NMRスペクトルから、このもののコンホメーションは二種類のC₂-対象コンホメーション、trans-trans-trans-trans型とcis-trans-trans-trans型が共存していることが推測される。さらにこの溶液に0.5当量のCsSCN、あるいは当量のDL-Phe-OMe·HClを加えたところ、これらとシクロオクタペプチド(A)が錯体を形成することにより、そのコンホメーションは一種類のみC₂-対称コンホメーション、trans-trans-trans-trans型に変化することが¹³C NMRスペクトルから推測される。またこの時のD-Phe-OMe·HClとL-Phe-OMe·HClのC_r, C_o, C_m, C_αそしてC_βのそれぞれのシグナルが分離して観測された。