

¹Hおよび¹³C核磁気共鳴スペクトルによるCyclo(L-Phe-L-Pro-Gly-L-Pro)₂のコンホメーションの研究、およびそのDL認識能について

石津 隆、藤井亜由美、野口俊作

Chemical & Pharmaceutical Bulletin, Vol. 41(2), 235-238 (1993)

Conformational Studies of Cyclo(L-Phe-L-Pro-Gly-L-Pro)₂ by ¹H- and ¹³C-Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy, and Its Enantioface-Differentiating Ability

Takashi ISHIZU, Ayumi FUJII, and
Shunsaku NOGUCHI

ABSTRACT Analyses of the ¹H- and ¹³C-nuclear magnetic resonance (¹H- and ¹³C-NMR) spectra of the cyclooctapeptide cyclo(L-Phe-L-Pro-Gly-L-Pro)₂ (3) in CDCl₃ with the aid of the C-H correlated spectroscopy (C-H COSY) two-dimensional NMR spectrum (Fig.2) suggested that two kinds of C₂-symmetric conformation with all *trans* and *cis-trans-trans-trans* forms coexist. When 0.5 eq of CsSCN or 1 eq of D- and L-PheOMe · HCl(D/L ratio=1/2) was added to a solution of the cyclooctapeptide (3) in CDCl₃, the ¹H- and ¹³C-NMR spectra (Fig.3) suggested the presence of only one C₂-symmetric conformation (all *trans*), resulting from the formation of complexes with CsSCN or D- and L-PheOMe · HCl. The ¹³C-NMR spectra of the complexes of the cyclooctapeptides (3 or 4) with D- and L-PheOMe · HCl displayed separate resonances for each carbon atom of D-PheOMe · HCl and L-PheOMe · HCl. Furthermore, the ability of 3 to distinguish the D from the L enantiomer, is superior to that of 4 (Table II).

¹H-および¹³C-核磁気共鳴(NMR)スペクトル、さらにはC-H COSY二次元NMRスペクトルを用いて環状オクタペプチドCyclo(L-Phe-L-Pro-Gly-L-Pro)₂(3)のコンホメーションを解析したところ、25℃、CDCl₃中で二種類のC₂-対称コンホメーション(all *trans*型と*cis-trans-trans-trans*型)が共存していることが分った。またこの溶液に

0.5当量のCsSCN、あるいは1.0当量のD-,L-フェニルアラニンメチルエステル塩酸塩(D/L=1/2)を加えると、3が錯体を形成することにより、一種類のみ C_2 -対称コンホメーション(all *trans*型)へと変化した。さらに3はDL認識能を有していることも判明した。