

S : Supporting Information

Tyrosine sulfate isosteres of CCR5 N-terminus as tools for studying HIV-1 entry

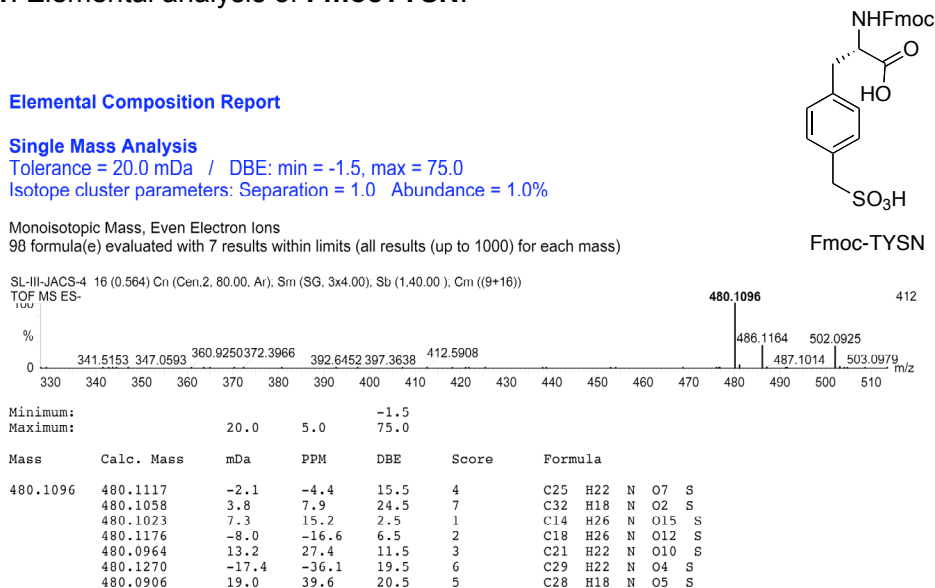
Son N. Lam,^a Priyamvada Acharya,^b Chih-Chin Huang,^b Richard T. Wyatt,^b Peter D. Kwong,^b and Carole A. Bewley^{a*}

^aLaboratory of Bioorganic Chemistry, National Institute of Diabetes, Digestive, and Kidney Diseases and ^bVaccine Research Center, National Institute of Allergy and Infectious Diseases National Institutes of Health, DHHS, Bethesda, Maryland 20892

Preparation of <i>N</i> -Fluorenylmethoxycarbonyl p-sulfonylmethyl L-phenylalanine (Fmoc-TYSN)	S-2
Figure S1 . Elemental analysis of Fmoc-TYSN.	S-2
Figure S2 . ¹ H and ¹³ C NMR spectra of 9 .	S-3
Figure S3 . Mass spectra of 9 .	S-4
Figure S4 . Elemental analysis of 9 .	S-4
Figure S5 . ¹ H and ¹³ C NMR spectra of 10	S-5
Figure S6 . Mass spectra of 10 .	S-6
Figure S7 . Elemental analysis of 10 .	S-6
Figure S8 . ¹ H and ¹³ C NMR spectra of 11 .	S-7
Figure S9 . Mass spectrum of 11 .	S-8
Figure S10 . Mass spectrum of 11b .	S-8
Figure S11 . Mass spectrum of 12 .	S-9
Figure S12 . Sensorgrams of gp120 (YU2) binding to immobilized 12 .	S-10
Figure S13 . Sensorgrams of CD4 binding to immobilized 12 .	S-10
Figure S14 . Sensorgrams of gp120-CD4 binding to immobilized 12 .	S-10
Figure S15 . Mass normalized sensorgrams	S-11
Figure S16 . Best fit curves and residuals of CD4-YU2 binding to immobilized 12 .	S-11
Table S1 . ¹ H and ¹³ C NMR assignments of 2	S-12
Table S2 . ¹ H and ¹³ C NMR assignments of 3	S-13
Table S3 . ¹ H and ¹³ C NMR assignments of 4	S-14
Table S4 . ¹ H and ¹³ C NMR assignments of 5	S-15
Table S5 . ¹ H and ¹³ C NMR assignments of 6	S-16
Table S6 . ¹ H and ¹³ C NMR assignments of 12	S-17,18

N-fluorenylmethoxycarbonyl *p*-sulfonylmethyl *L*-phenylalanine (Fmoc-TYSN). Fmoc-TYSN was synthesized starting from *L*-phenylalanine following the procedures detailed by Rivier and coworkers.¹ HRMS (TOF-MS ES) *m/z* 480.1096 (480.1117 Calcd for C₂₅H₂₂NO₇S [M-H]).

Figure S1. Elemental analysis of FmocTYSN.



¹ Miranda, M.T.M.; Liddle, R.A.; Rivier, J.E. *J. Med. Chem.* **1993**, *36*(12), 1681-1688.

Figure S2. ^1H and ^{13}C NMR spectra of **9**.

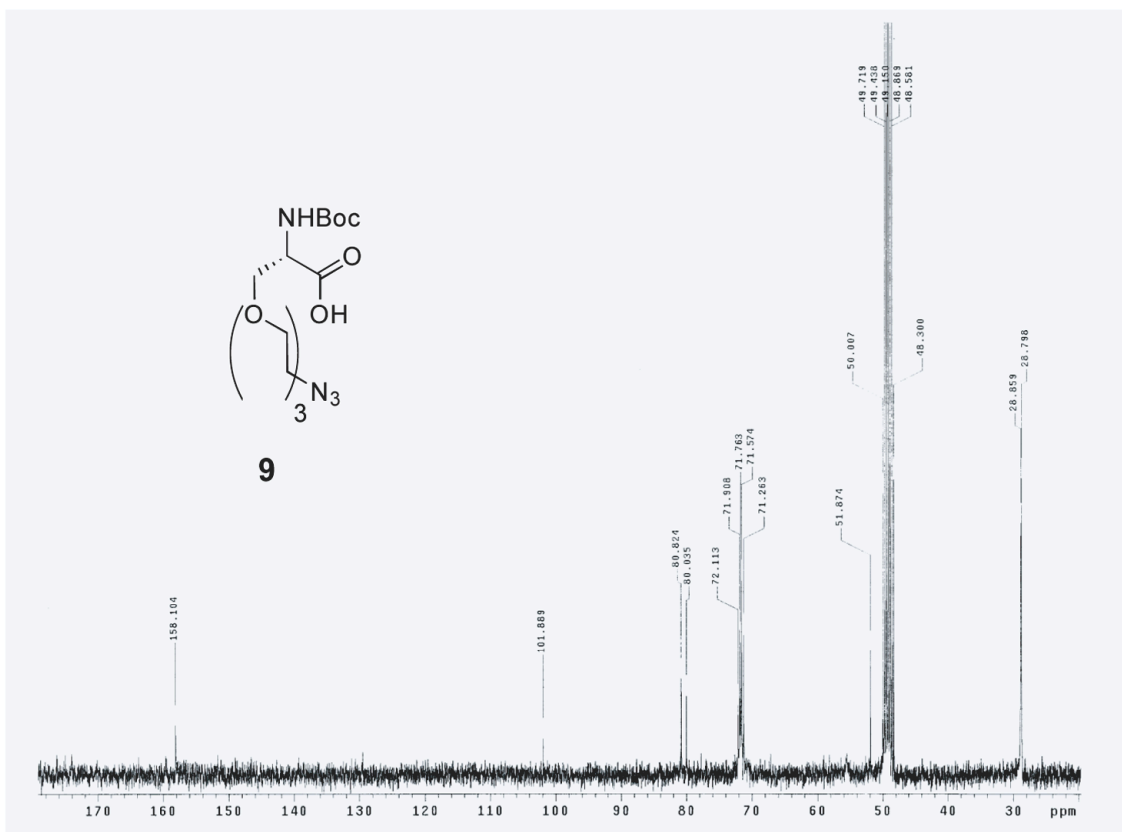
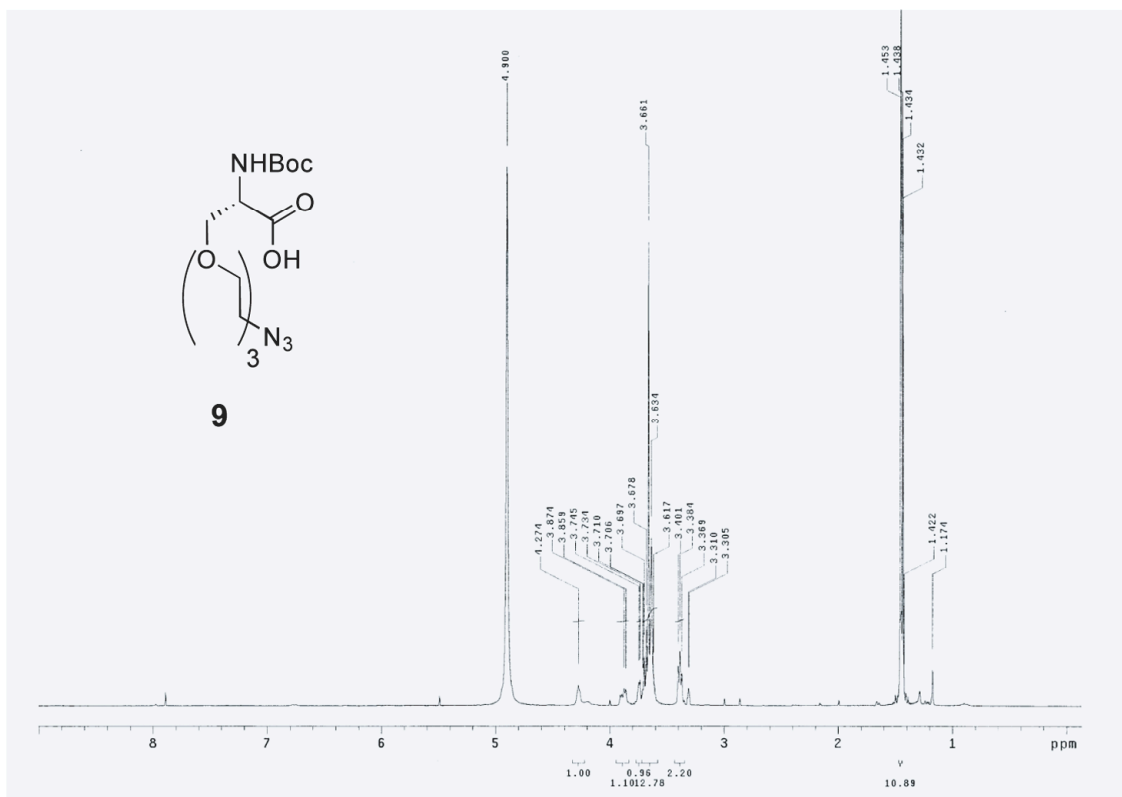


Figure S3. FT-IR spectrum of **9**.

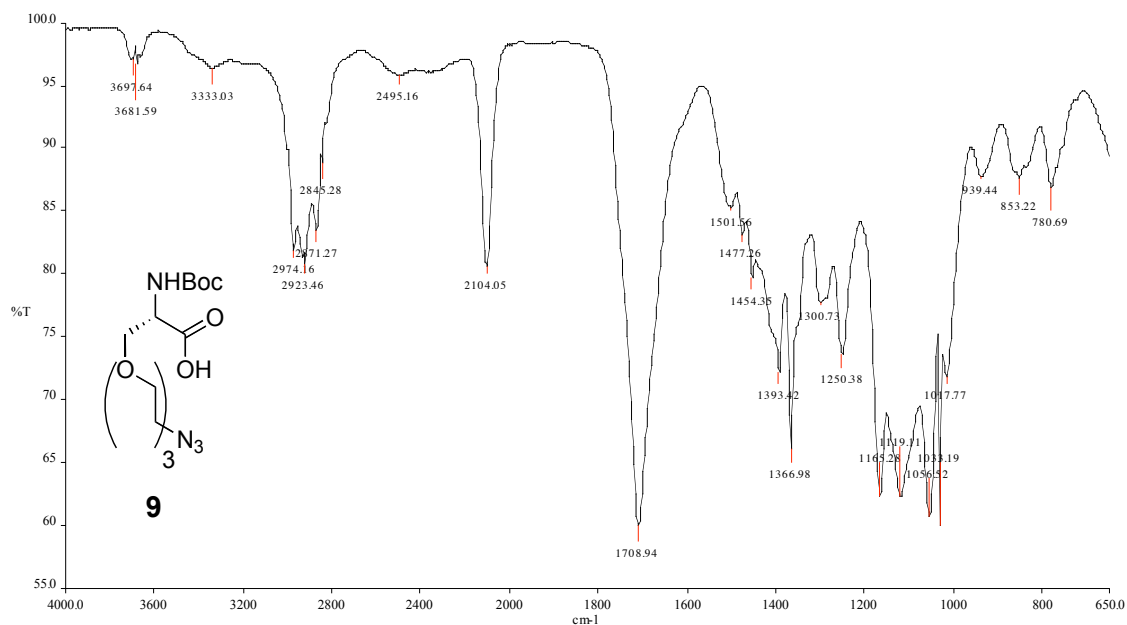


Figure S4. Elemental analysis of **9**.

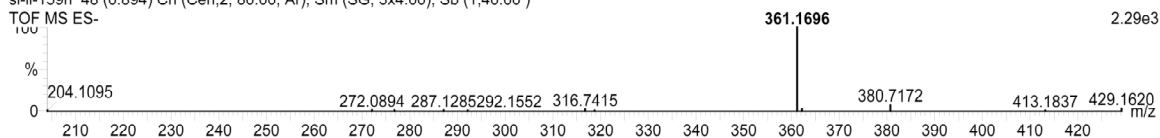
Elemental Composition Report

Single Mass Analysis

Tolerance = 20.0 mDa / DBE: min = -1.5, max = 75.0
 Isotope cluster parameters: Separation = 1.0 Abundance = 1.0%

Monoisotopic Mass, Even Electron Ions
 60 formula(e) evaluated with 5 results within limits (all results (up to 1000) for each mass)

sl-ii-159n 48 (0.894) Cn (Cen,2, 80.00, Ar); Sm (SG, 3x4.00); Sb (1,40.00)
 TOF MS ES-



Minimum: -1.5
 Maximum: 20.0 5.0 75.0

Mass	Calc. Mass	mDa	PPM	DBE	Score	Formula
361.1696	361.1723	-2.7	-7.5	4.5	2	C14 H25 N4 O7
	361.1665	3.1	8.7	13.5	5	C21 H21 N4 O2
	361.1571	12.5	34.7	0.5	1	C10 H25 N4 O10
	361.1876	-18.0	-49.8	8.5	4	C18 H25 N4 O4
	361.1512	18.4	51.0	9.5	3	C17 H21 N4 O5

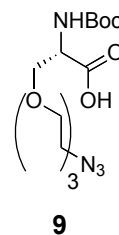


Figure S5. ^1H and ^{13}C NMR spectra of **10**.

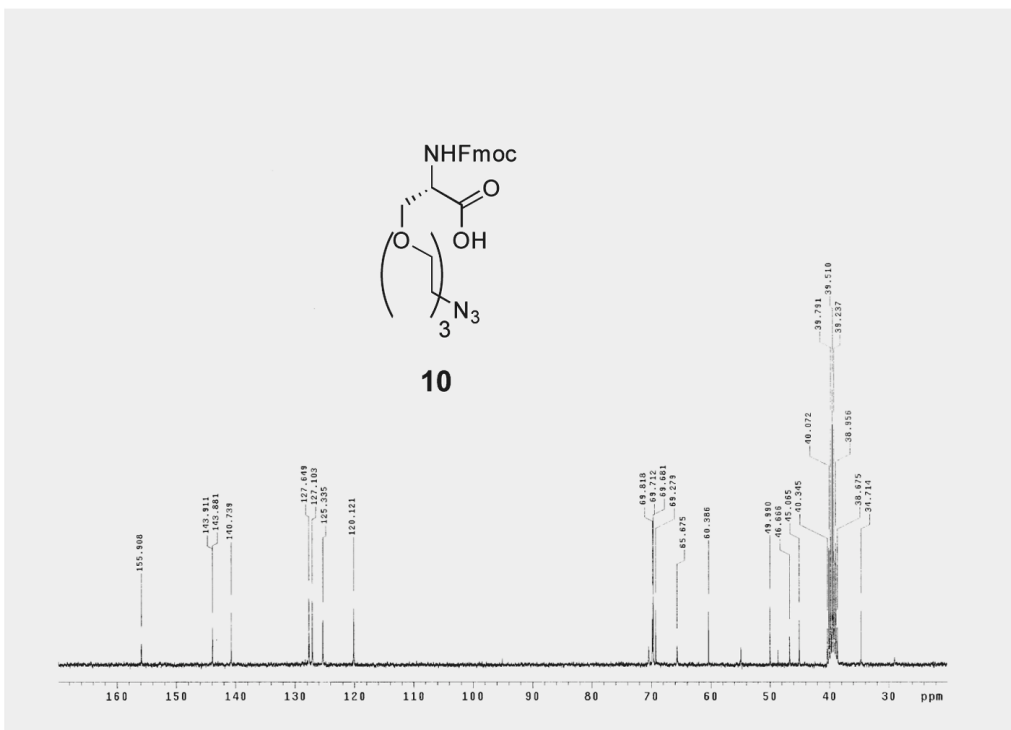
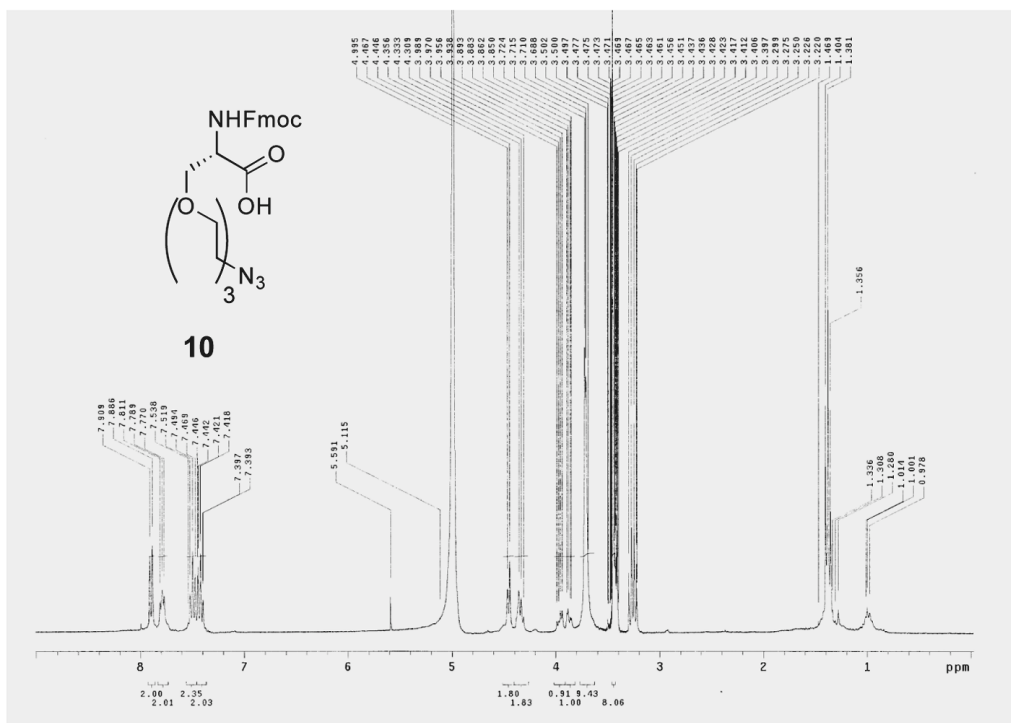


Figure S6. FT-IR spectrum of **10**.

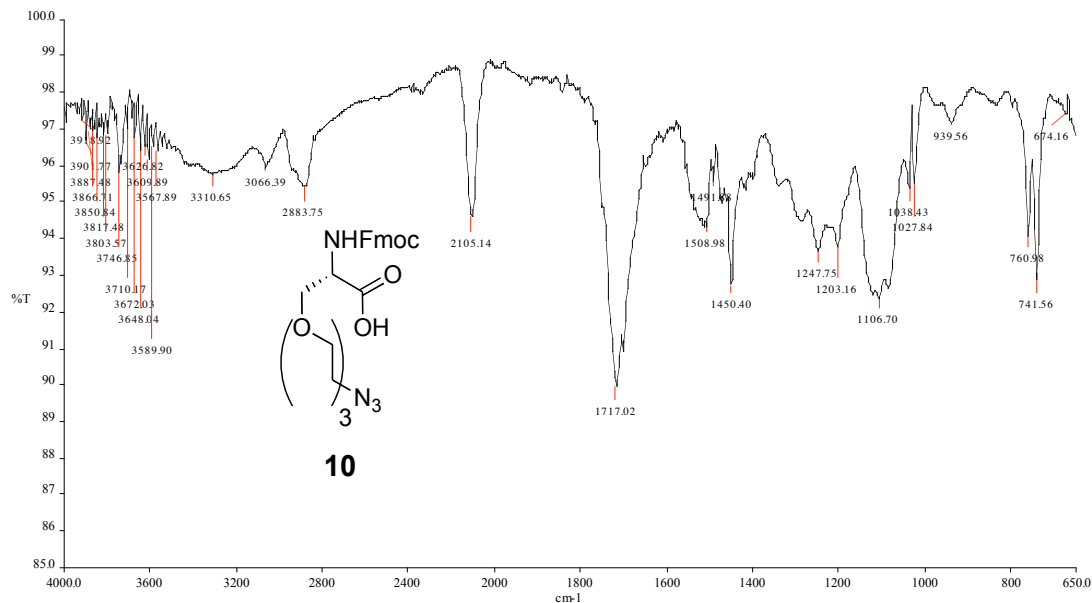


Figure S7. Elemental analysis of **10**.

Elemental Composition Report

Single Mass Analysis

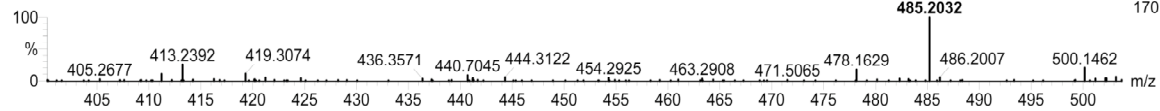
Tolerance = 20.0 mDa / DBE: min = -1.5, max = 75.0
 Isotope cluster parameters: Separation = 1.0 Abundance = 1.0%

Monoisotopic Mass, Even Electron Ions

104 formula(e) evaluated with 6 results within limits (all results (up to 1000) for each mass)

SL II 2

vl_111604_7 14 (0.563) AM (Cen,2, 80.00, Ar,10000.0,556.28,0.70,LS 3); Sm (SG, 3x4.00); Sb (1,40.00); Sb (1,40.00)



Minimum: -1.5
 Maximum: 20.0 5.0 75.0

Mass	Calc. Mass	mDa	PPM	DBE	Score	Formula
485.2032	485.2036	-0.4	-0.9	12.5	4	C ₂₄ H ₂₉ N ₄ O ₇
	485.1978	5.4	11.2	21.5	6	C ₃₁ H ₂₅ N ₄ O ₂
	485.2095	-6.3	-13.0	3.5	2	C ₁₇ H ₃₃ N ₄ O ₁₂
	485.1942	9.0	18.5	-0.5	1	C ₁₃ H ₃₃ N ₄ O ₁₅
	485.1884	14.8	30.6	8.5	3	C ₂₀ H ₂₉ N ₄ O ₁₀
	485.2189	-15.7	-32.3	16.5	5	C ₂₈ H ₂₉ N ₄ O ₄

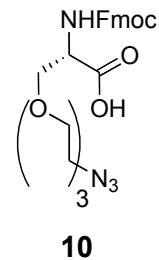


Figure S8. ¹H and ¹³C NMR spectra of 11.

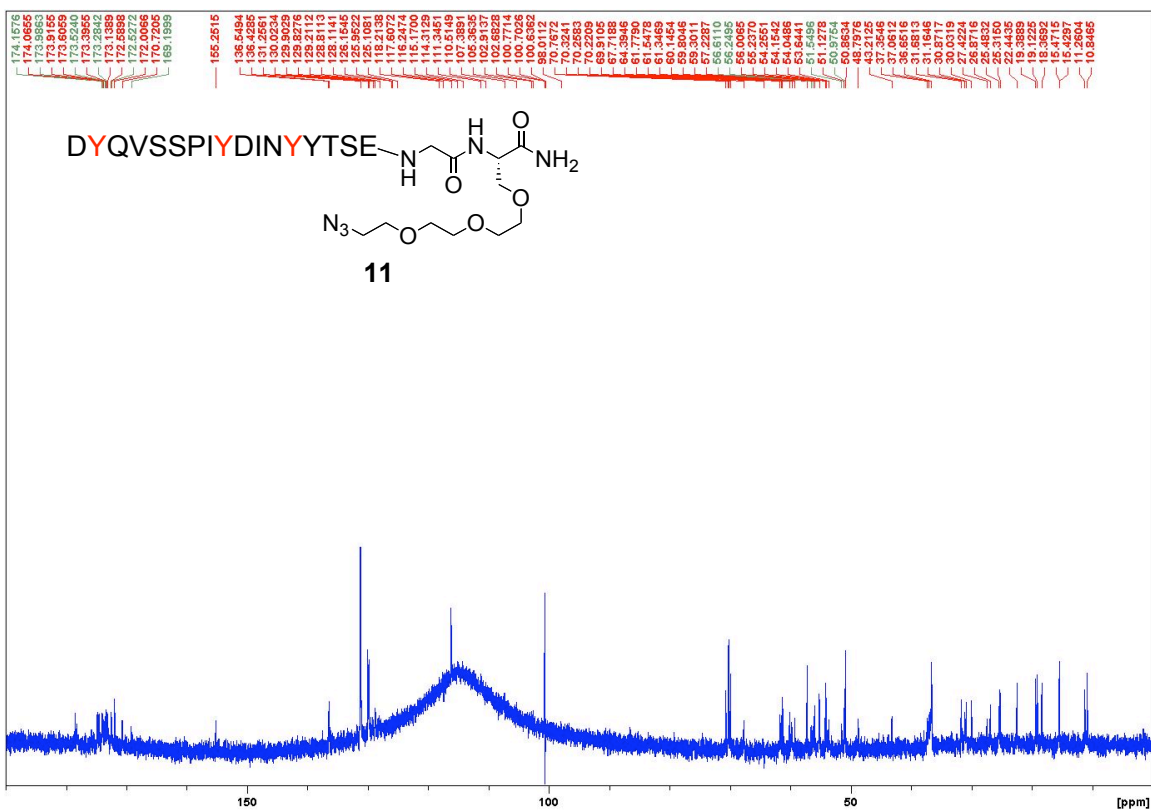
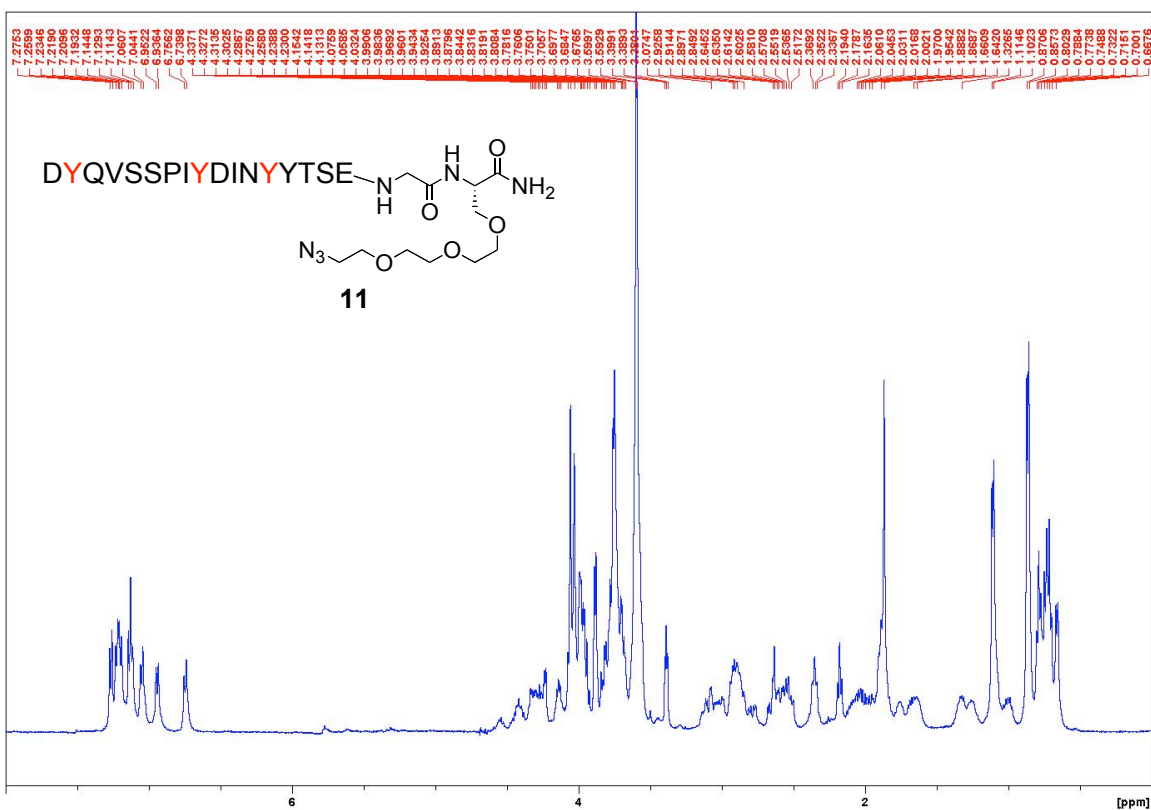


Figure S9. Mass spectra (TOFMS-ES) of **11**.

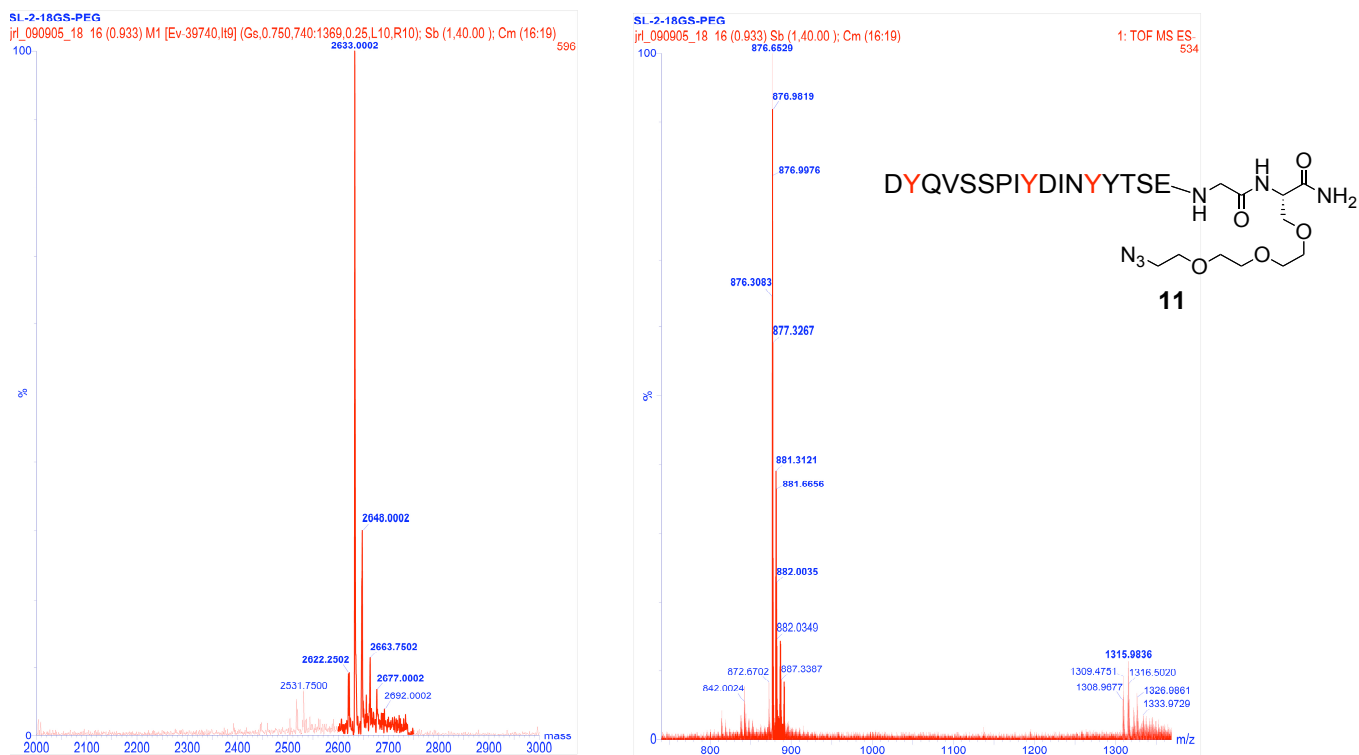
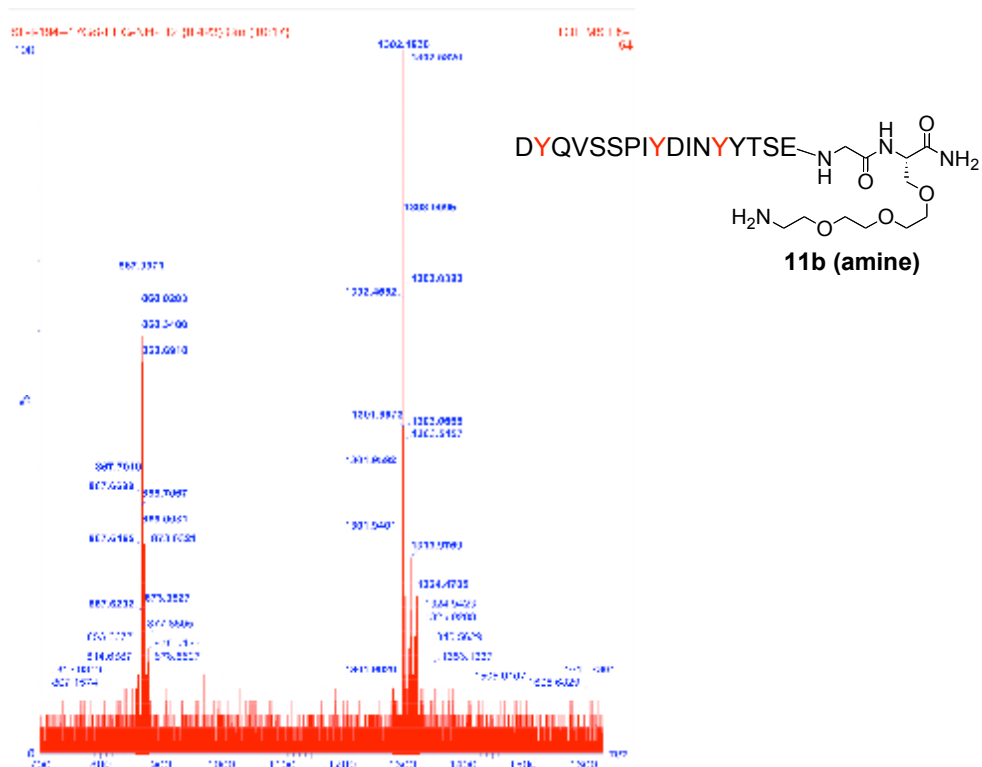


Figure S10. Mass spectra (TOFMS-ES) of **11b**.



Surface plasmon resonance data for proteins binding to immobilized analog 12.

Figure S12. YU2 gp120 (5.0 μ M to 39nM) introduced to immobilized peptide 12.

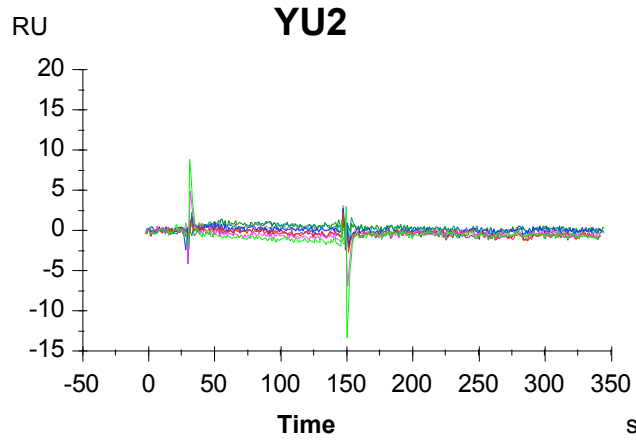


Figure S13. CD4 (5.0 μ M to 39nM) introduced to immobilized peptide 12.

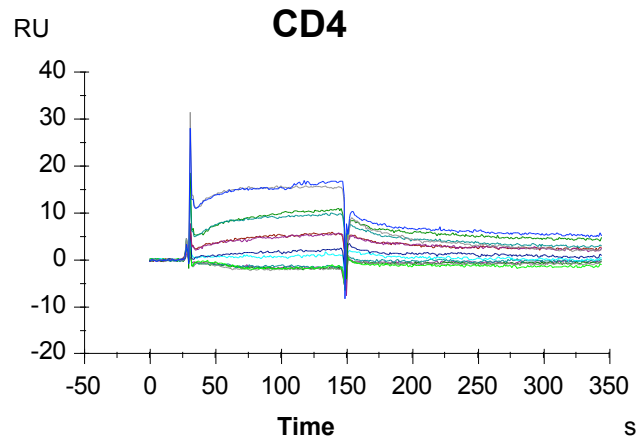


Figure S14. Stoichiometric complex of gp120-CD4 introduced to immobilized peptide 12.

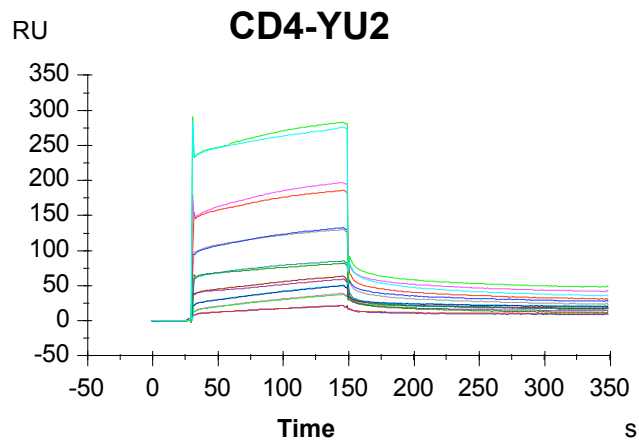


Figure S15. Mass normalized sensorgram of binding curves at 1.25 μ M.

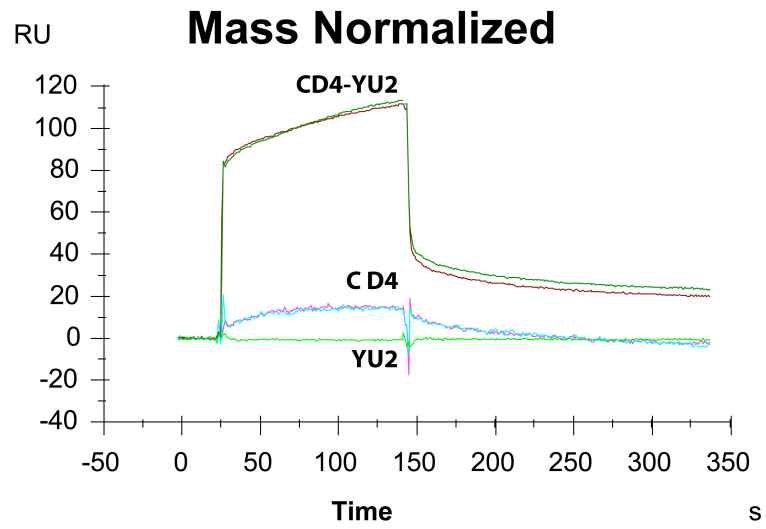
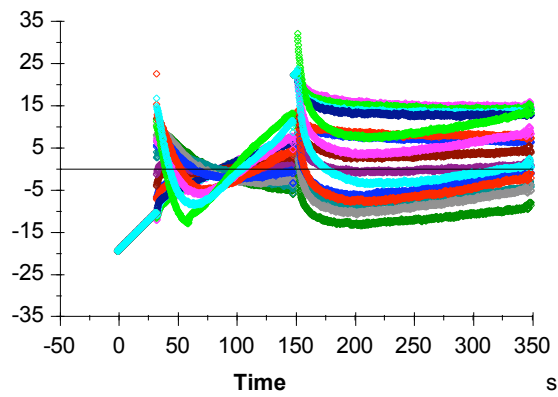
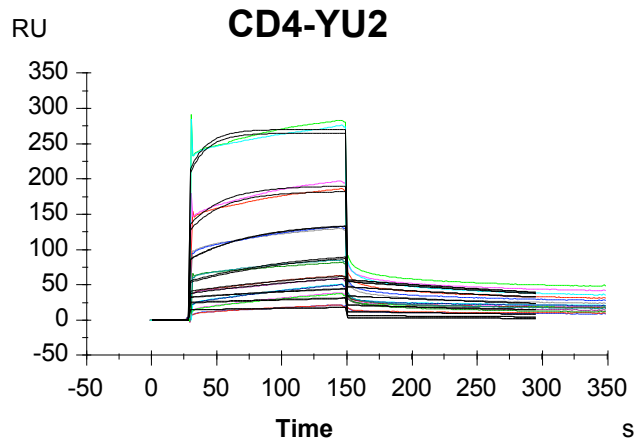


Figure S16. Binding curves of complex best fitted to 1st order kinetics with residuals shown below.



Ac-DYQVSSPI-Tys-DIN-Typ-Y-CONH ₂ (2)														
Pos#	Res	NH	HA	CA	HB	CB	HG	CG	HD	CD	HE	CE	amide	amide
2	ASP	8.10	4.42	51.58	2.50	38.38	--	--	--	--	--	--		
		--	--	--	2.36	--	--	--	--	--	--	--		
3	TYR	7.97	4.46	54.75	2.96	35.90	--	--	7.00	130.48	6.73	115.48		
		--	--	--	2.85	--	--	--	--	--	--	--		
4	GLN	8.15	4.22	52.73	1.94	26.85	2.16	30.94	--	--	--	--	7.45	6.74
		--	--	--	1.83	--	--	--	--	--	--	--		
5	VAL	8.12	4.05	59.47	2.02	30.11	0.86	17.96	--	--	--	--		
6	SER	8.30	4.41	55.27	3.75	61.11	--	--	--	--	--	--		
7	SER	8.23	4.66	53.72	3.76	60.87	--	--	--	--	--	--		
		--	--	--	3.72	--	--	--	--	--	--	--		
8	PRO	--	4.29	60.38	2.08	29.35	1.89	21.70	3.70	47.87	--	--		
		--	--	--	1.62	--	--	--	3.60	--	--	--		
9	ILE	7.94	3.94	58.41	1.61	35.90	1.26	24.51	0.71	14.63	--	--	HG'	CG'
		--	--	--	--	--	0.99	--	--	--	--	--	0.66	10.06
10	TYS	8.07	4.58	54.26	3.06	36.42	--	--	7.14	130.26	7.10	121.31		
		--	--	--	2.85	--	--	--	--	--	--	--		
11	ASP	8.21	4.55	50.90	2.67	38.68	--	--	--	--	--	--		
		--	--	--	2.49	--	--	--	--	--	--	--		
12	ILE	8.08	4.03	59.15	1.83	35.90	1.36	24.51	0.81	14.74	--	--	HG'	CG'
		--	--	--	--	--	1.13	--	--	--	--	--	0.81	10.67
13	ASN	8.38	4.54	50.72	2.57	36.19	--	--	--	--	--	--	7.58	6.82
14	TYP	7.95	4.31	54.94	2.89	36.39	--	--	6.86	129.90	6.98	120.55		
					2.74	--	--	--	--	--	--	--		
15	TYR	8.01	4.30	55.77	3.01	35.74	--	--	7.04	130.48	6.74	115.48		
					2.68	--	--	--	--	--	--	--		
	C-term		7.15	6.37						Ac(NH)		1.82	23.33	

Ac-DYQVSSPI-Typ-DIN-Tys-Y-CONH ₂ (3)														
Pos#	Res	NH	HA	CA	HB	CB	HG	CG	HD	CD	HE	CE	amide	amide
2	ASP	8.09	4.40	51.60	2.46	38.38	--	--	--	--	--	--		
		--	--	--	2.35	--	--	--	--	--	--	--		
3	TYR	7.96	4.45	54.76	2.94	35.93	--	--	6.99	130.52	6.71	115.50		
		--	--	--	2.84	--	--	--	--	--	--	--		
4	GLN	8.16	4.23	52.76	1.93	26.91	2.15	30.95	--	--	--	--	7.43	6.73
		--	--	--	1.81	--	--	--	--	--	--	--		
5	VAL	8.09	4.04	59.61	2.00	30.13	0.84	17.99	--	--	--	--		
6	SER	7.89	4.17	57.19	3.72	62.14	--	--	--	--	--	--		
7	SER	8.14	4.24	53.92	3.83	59.49	--	--	--	--	--	--		
					3.78	--	--	--	--	--	--	--		
8	PRO	--	4.31	60.68	2.10	29.30	1.87	24.64	3.59	47.94	--	--		
		--	--	--	1.60	--	--	--	3.54	--	--	--		
9	ILE	7.87	3.90	58.54	1.61	35.82	1.26	24.58	0.68	10.07	--	--	HG'	CG'
		--	--	--	--	--	0.98	--	--	--	--	--	0.64	14.71
10	TYP	7.94	4.55	54.44	3.02	36.15	--	--	7.02	129.74	6.99	120.51		
		--	--	--	2.81	--	--	--	--	--	--	--		
11	ASP	8.11	4.52	51.36	2.63	38.64	--	--	--	--	--	--		
		--	--	--	2.50	--	--	--	--	--	--	--		
12	ILE	8.03	4.00	59.06	1.77	35.93	1.30	24.51	0.77	10.63	--	--	HG'	CG'
		--	--	--	--	--	1.09	--	--	--	--	--	0.74	14.77
13	ASN	8.35	4.54	50.66	2.55	36.15	--	--	--	--	--	--	7.56	6.79
14	TYS	8.00	4.30	55.85	2.83	36.30	--	--	6.95	130.33	7.07	121.54		
15	TYR	7.95	4.31	54.95	2.98	35.84	--	--	7.03	130.52	6.74	115.50		
					2.73	--								
	C-term		6.87	6.79						Ac(NH)		1.80	23.22	

Ac-DYQVSSPI-Tysn-DIN-Tysn-Y-CONH ₂ (4)														
Pos#	Res	NH	HA	CA	HB	CB	HG	CG	HD	CD	HE	CE	amide	amide
2	ASP	8.08	4.42	51.5	2.50	38.2	--	--	--	--	--	--		
		--	--	--	2.36	38.2	--	--	--	--	--	--		
3	TYR	7.95	4.46	54.6	2.95	35.5	--	--	7.00	130.0	6.73	115.2		
		--	--	--	2.84	35.5	--	--	--	--	--	--		
4	GLN	8.14	4.22	52.7	1.93	26.9	2.16	30.8	--	--	--	--	7.44	6.73
		--	--	--	1.82	26.9	--	--	--	--	--	--		
5	VAL	8.06	4.02	59.3	1.99	30.0	0.85	17.9	--	--	--	--		
6	SER	8.28	4.41	55.2	3.75	60.9	--	--	--	--	--	--		
7	SER	8.21	4.67	53.5	3.73	60.5	--	--	--	--	--	--		
8	PRO	--	4.30	60.3	2.09	29.2	1.88	24.2	3.69	48.0	--	--		
		--	--	--	1.66	29.2	--	--	3.61	48.0	--	--		
9	ILE	7.92	3.93	58.4	1.61	35.9	1.24	24.1	0.70	10.1	--	--	HG'	CG'
		--	--	--	--	--	0.97	24.1			--	--	0.64	14.5
10	TYSN	7.98	4.57	54.2	3.05	36.6	--	--	7.09	128.9	7.20	130.0	CH ₂ SO ₃	
		--	--	--	2.86	36.6	--	--	--	--	--	--	3.98	
11	ASP	8.15	4.54	51.1	2.66	38.6	--	--	--	--	--	--		
		--	--	--	2.50	38.6	--	--	--	--	--	--		
12	ILE	8.04	4.01	58.9	1.80	35.9	1.33	24.3	0.79	10.5	--	--	HG'	CG'
		--	--	--	--	--	1.12	24.3	--	--	--	--	0.78	14.8
13	ASN	8.34	4.53	50.7	2.56	35.9	--	--	--	--	--	--	7.57	6.8
14	TYSN	7.94	4.33	55.4	2.90	36.6	--	--	6.93	128.9	7.19	130.0	CH ₂ SO ₃	
		--	--	--	2.83	36.6	--	--	--	--	--	--	4.02	
15	TYR	7.92	4.32	54.8	3.01	35.6	--	--	7.04	130.0	6.74	115.2		
		--	--	--	2.71	35.6	--	--	--	--	--	--		

Ac-DYQVSSPI-Tys-DIN-Tys-YTSE-CONH ₂ (5)																	
Pos#	Res	¹⁵ N	NH	HA	CA	HB	CB	HG	CG	HD	CD	HE	CE	amide	amide		
2	ASP	126.32	8.09	4.41	1.59	2.49	38.23	--	--	--	--	--	--	--	--		
		--	--	--	--	2.35	--	--	--	--	--	--	--	--	--		
3	TYR	120.04	7.96	4.45	54.96	2.96	35.94	--	--	6.99	130.53	6.72	115.47	--	--		
		--	--	--	--	2.81	--	--	--	--	--	--	--	--	--		
4	GLN	122.22	8.14	4.21	52.73	1.91	26.67	2.15	30.91	--	--	--	--	7.43	6.73	112.51	
		--	--	--	--	1.82	--	--	--	--	--	--	--	--	--		
5	VAL	121.52	8.07	4.01	59.50	1.98	30.06	0.84	18.25	--	--	--	--	--	--		
6	SER	119.61	8.29	4.39	55.15	3.74	61.09	--	--	--	--	--	--	--	--		
7	SER	119.09	8.21	4.65	53.74	3.73	60.56	--	--	--	--	--	--	--	--		
8	PRO			4.25	60.42	2.06	29.26	1.87	24.40	3.69	47.98	--	--	--	--		
		--	--	--	--	1.59	--	--	--	3.59	--	--	--	--	--		
9	ILE	119.96	7.90	3.91	58.38	1.58	35.94	1.25	24.44	0.69	9.75	--	--	--	--	HG'	CG'
		--	--	--	--	--	--	0.96	--	--	--	--	--	--	--	0.64	14.51
10	TYS	123.17	8.03	4.57	54.35	3.05	36.47	--	--	7.12	130.26	7.08	121.39	--	--		
		--	--	--	--	2.82	--	--	--	--	--	--	--	--	--		
11	ASP	122.32	8.15	4.52	50.96	2.64	38.75	--	--	--	--	--	--	--	--		
		--	--	--	--	2.49	--	--	--	--	--	--	--	--	--		
12	ILE	121.61	8.04	3.99	59.06	1.75	36.03	1.33	24.24	0.78	10.80	--	--	--	--	HG'	CG'
		--	--	--	--	--	--	1.09	--	--	--	--	--	--	--	0.72	14.60
13	ASN	121.22	8.32	4.54	50.66	2.55	36.02	--	--	--	--	--	--	7.56	6.79	113.45	
14	TYS	120.36	7.96	4.36	55.67	2.94	36.11	--	--	6.96	130.20	7.07	121.39	--	--		
		--	--	--	--	2.84	--	--	--	--	--	--	--	--	--		
15	TYR	121.05	7.93	4.45	54.96	2.96	35.94	--	--	7.02	130.53	6.72	115.47	--	--		
		--	--	--	--	2.81	--	--	--	--	--	--	--	--	--		
16	THR	115.73	7.82	4.24	58.62	4.09	67.23	1.09	18.70	--	--	--	--	--	--		
17	SER	118.17	8.19	4.31	55.81	3.78	60.99	--	--	--	--	--	--	--	--		
18	GLU	123.26	8.31	4.15	53.70	1.97	27.38	2.16	33.45	--	--	--	--	--	--		
		--	--	--	--	1.82	--	--	--	--	--	--	--	--	--		
	CONH2													7.46	6.99	107.95	
	AcNH			1.86	21.53												

Ac-D-Tys-QVSSPI-Tys-DIN-Tys-YTSE-CONH ₂ (6)																	
Pos#	Res	¹⁵ N	NH	HA	CA	HB	CB	HG	CG	HD	CD	HE	CE	amide	amide		
2	ASP	126.37	8.08	4.42	51.54	2.50	38.43	--	--	--	--	--	--	--	--		
		--	--	--	--	2.35	--	--	--	--	--	--	--	--	--		
3	TYS	123.33	8.07	4.49	54.35	3.01	36.15	--	--	7.13	130.41	7.13	121.51	--	--		
		--	--	--	--	2.92	--	--	--	--	--	--	--	--	--		
4	GLN	122.45	8.17	4.21	52.73	1.91	26.94	2.16	30.93	--	--	--	--	7.43	6.73		
		--	--	--	--	1.80	--	--	--	--	--	--	--	--	--		
5	VAL	121.83	8.12	4.00	59.47	1.97	30.11	0.84	18.41	--	--	--	--	--	--		
		--	--	--	--	--	--	0.86	17.63	--	--	--	--	--	--		
6	SER	119.97	8.31	4.39	55.41	3.73	61.27	--	--	--	--	--	--	--	--		
7	SER	119.18	8.24	4.65	53.71	3.75	60.59	--	--	--	--	--	--	--	--		
		--	--	--	--	3.69	--	--	--	--	--	--	--	--	--		
8	PRO	--	--	4.26	60.43	2.06	29.32	1.87	24.60	3.69		--	--	--	--		
		--	--	--	--	1.59	--	--	--	3.59		--	--	--	--		
9	ILE	120.21	7.93	3.91	58.34	1.58	35.96	1.25	24.41	0.69	10.00	--	--	--	--	HG'	CG'
		--	--	--	--	--	--	0.97	--	--	--	--	--	--	--	0.64	14.68
10	TYS	119.93	8.06	4.56	54.75	3.03	36.52	--	--	7.12	130.21	7.08	121.25	--	--		
		--	--	--	--	2.81	--	--	--	--	--	--	--	--	--		
11	ASP	122.45	8.17	4.51	51.17	2.62	38.72	--	--	--	--	--	--	--	--		
		--	--	--	--	2.47	--	--	--	--	--	--	--	--	--		
12	ILE	121.69	8.04	3.97	59.04	1.74	36.00	1.32	24.66	0.78	10.69	--	--	--	--	HG'	CG'
		--	--	--	--	--	--	1.08	--	--	--	--	--	--	--	0.71	14.73
13	ASN	121.23	8.32	4.52	50.75	2.54	36.22	--	--	--	--	--	--	7.55	6.78		
14	TYS	120.36	7.96	4.36	55.53	2.90	36.37	--	--	6.97	130.29	7.07	121.54	--	--		
		--	--	--	--	2.85	--	--	--	--	--	--	--	--	--		
15	TYR	121.02	7.92	4.45	55.34	2.94	36.19	--	--	7.02	130.58	6.72	115.48	--	--		
		--	--	--	--	2.82	--	--	--	--	--	--	--	--	--		
16	THR	115.75	7.83	4.23	58.63	4.09	67.24	1.07	18.61	--	--	--	--	--	--		
17	SER	118.13	8.19	4.31	55.71	3.79	61.00	--	--	--	--	--	--	--	--		
		--	--	--	--	3.75	--	--	--	--	--	--	--	--	--		
18	GLU	123.25	8.31	4.14	53.73	1.97	27.51	2.15	33.49	--	--	--	--	--	--		
		--	--	--	--	1.82	--	--	--	--	--	--	--	--	--		
	CONH2		7.46	6.99									AcNH	1.86	21.75		

Ac-D-Tysn-QVSSPI-Tysn-DIN-Tysn-YTSEG-ate -Ala(biotin)-CONH ₂ (12)																		
Pos#	Res	NH	HA	CA	HB	CB	HG	CG	HD	CD	HE	CE	amide	amide				
2	ASP	8.09	4.44	51.50	2.51	38.31	--	--	--	--	--	--	--	--				
		--	--	--	2.38	--	--	--	--	--	--	--	--	--				
3	TYSN	8.03	4.54	54.52	3.07	36.48	--	--	7.14	129.28	7.27	130.51	--	--	CH ₂ SO ₃			
		--	--	--	2.94	--	--	--	--	--	--	--	--	--	4.07	56.47		
4	GLN	8.24	4.25	52.80	1.95	26.59	2.17	30.91	--	--	--	--	7.46	6.75				
		--	--	--	1.85	--	--	--	--	--	--	--	--	--				
5	VAL	8.13	4.06	59.43	2.01	30.10	0.87	17.59	--	--	--	--	--	--				
6	SER	8.34	4.43	55.32	3.76	60.85	--	--	--	--	--	--	--	--				
7	SER	8.26	4.68	53.32	3.77	60.71	--	--	--	--	--	--	--	--				
		--	--	--	3.72	--	--	--	--	--	--	--	--	--				
8	PRO	--	4.31	60.43	2.10	29.23	1.90	24.51	3.70	47.97	--	--	--	--				
		--	--	--	1.67	--	--	--	3.61	--	--	--	--	--				
9	ILE	7.98	3.96	58.44	1.62	35.97	1.26	24.54	0.72	10.01	--	--	--	--	HG'	CG'		
		--	--	--	--	--	1.00	--	--	--	--	--	--	--	0.67	14.57		
10	TYSN	8.01	4.59	54.27	3.06	36.67	--	--	7.11	129.13	7.21	130.45	--	--	CH ₂ SO ₃			
		--	--	--	2.87	--	--	--	--	--	--	--	--	--	3.99	56.47		
11	ASP	8.19	4.55	51.05	2.65	38.72	--	--	--	--	--	--	--	--				
		--	--	--	2.50	--	--	--	--	--	--	--	--	--				
12	ILE	8.05	4.00	59.03	1.78	35.95	1.33	24.60	0.80	10.59	--	--	--	--	HG'	CG'		
		--	--	--	--	--	1.13	--	--	--	--	--	--	--	0.75	14.65		
13	ASN	8.34	4.54	50.90	2.55	36.02	--	--	--	--	--	--	7.58	6.79				
14	TYSN	7.95	4.40	55.44	2.93	36.34	--	--	6.95	129.13	7.20	130.50	--	--	CH ₂ SO ₃			
		--	--	--	2.87	--	--	--	--	--	--	--	--	--	4.04	56.47		
15	TYR	7.94	4.49	55.30	2.99	35.99	--	--	7.04	130.56	6.73	115.51	--	--				
		--	--	--	2.87	--	--	--	--	--	--	--	--	--				
16	THR	7.88	4.29	58.66	4.16	67.17	1.10	18.53	--	--	--	--	--	--				
17	SER	8.19	4.34	55.81	3.83	61.00	--	--	--	--	--	--	--	--				
		--	--	--	3.78	--	--	--	--	--	--	--	--	--				
18	GLU	8.36	4.22	54.10	2.00	27.46	2.18	35.22	--	--	--	--	--	--				
		--	--	--	1.86	--	--	--	--	--	--	--	--	--				
19	GLY	8.25	3.89	42.49	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--				
20	PEG	8.28	4.42	53.45	3.75	69.50	3.54	69.88	3.50	69.35	3.61	69.47	3.52	69.44	3.91	42.48	3.84	68.62
		--	--	--	3.67	--	--	--	--	--	--	--	--	--				
	CONH ₂	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	7.55	7.10	Ac(NH)	1.88	21.75	

	triazole	CH:	7.83	134.25	--	CH2:	4.48	49.88	--	NH:	8.36	--	--	--				
	Biotin	imide	2.16	33.47	1.51	24.90	1.23	27.71	1.56	27.47	3.16	55.29	4.47	60.27				
			6.34	--	--	1.43	--	--	--	1.43	--	--	--	--				
			6.29	--	--	--	--	--	--	--	2.86	39.71	4.25	62.03				
			--	--	--	--	--	--	--	--	2.66	--	--	--				