

## Die sintese en kristalstrukture van verskeie beskermde jodo-alanienamino sure

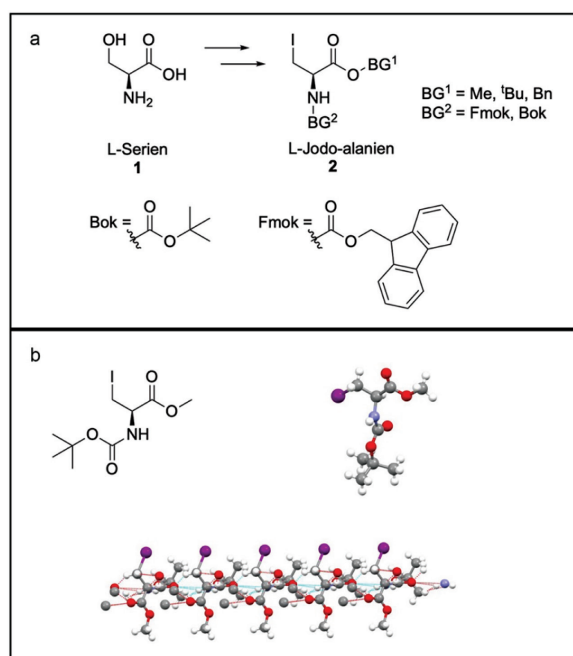
FJ De Beer, VA Azov, DV Kama, FJF Jacobs

Departement Chemie, Universiteit van die Vrystaat, Suid-Afrika  
Korresponderende outeur: VA Azov E-pos: [azovv@ufs.ac.za](mailto:azovv@ufs.ac.za)

**The synthesis and crystal structures of various protected iodo-alanine amino acids:** Iodo-alanine is an important intermediate in the synthesis of non-canonical amino acids. This compound has been used primarily as the starting material in palladium-catalysed Negishi coupling to produce unnatural amino acids. Although iodo-alanine derivatives are well known in the realms of amino acid synthesis, their various crystal structures have not been reported. A range of these compounds has been prepared and their crystal data collected.

Daar is sowat twintig proteïenogeniese aminosure wat natuurlik in biologiese wesens voorkom. Hierdie aminosure is die boublkke van proteïene. Proteïene is komplekse molekulêre masjiene wat 'n magdom funksies in die liggaam verrig. Inderdaad, sonder proteïene en aminosure sou lewe op ons planeet nie moontlik wees nie. 'n Aminosuur bestaan uit 'n alfa-koolstof verbind aan 'n waterstof, karboksielsuur, amiengroep en 'n substituent-R-groep. Die twintig kanoniese aminosure verskil slegs in hul substituentgroepe. Elke substituentgroep gee 'n spesifieke chemiese karakter aan die aminosuur. Sintetiese chemie laat ons toe om aminosure te maak met substituentgroepe wat nie natuurlik bekombaar is nie. Die sintese van hierdie nie-kanoniese aminosure laat ons toe om boublkke te vorm met ander chemiese tendense as dié wat natuurlik beskikbaar is. Nie-kanoniese aminosure, wat bestaan uit 'n substituentgroep en deur 'n koolstof-koolstofbinding aan die aminosuurgeraamte geheg word, word gesintetiseer met behulp van jodo-alanien (2) en 'n gehalogeneerde substituentgroep wat deelneem aan 'n palladiumgekataliseerde Negishi-koppeling (Jackson et al. 2010). Jodo-alanien word dikwels uit L-serien berei (1). Serien is 'n natuurlike aminosuur wat goedkoop en maklik bekombaar is. Aminosure word aan mekaar gebind om peptiede te vorm deur middel van 'n proses bekend as vastefase-peptiedsintese (VFPS).

Die proses behels dat die karboksielsuur en amiengroepe van die aminosuur deur spesifieke beskermende groepe beskerm word. Die gewildste amienbeskermingsgroepe vir VFPS is die fluorenielmetieloksikarboniel- (Fmok-) en *ters*-butieloksikarboniel- (Bok-) groepe. Die opsomming van die sintese van verskeie jodo-alanien-afgeleide verbindings kan in Figuur 1(a) gesien word. Ons het 'n reeks van hierdie verbindings berei en die kristaldata van elk versamel. Alhoewel hierdie verbindings gereedelik gebruik word in die sintese van nie-kanoniese aminosure, was die kristaldata tot nou toe onbekend. Die kristaldata van 'n reeks jodo-alanienverbindings is vir die eerste keer tydens die Studentesimposium in Natuurwetenskappe van 2021 bekendgestel.



Figuur 1(b) wys die chemiese struktuur van *N*-Bok-jodo-alanien metielester as voorbeeld. Die ooreenstemmende kristalstruktuur en verpakking is ook in Figuur 1(b) te sien. Interessante kristaldata, onder meer bindingslengtes en verskeie intermolekulêre kragte in die eenheidselle van die kristalle, is vir elke verbinding verkry.

Van hierdie jodo-verbindings is sensitief vir kolomchromatografie, 'n algemene suiwingstegniek om die verskillende komponente van chemiese reaksies te skei, en die suiwer bindings te verkry. Die sintese van hierdie bindings was dus so beplan dat die finale reinigingstap nie die afbreek van die verbindings veroorsaak nie. Die metodologie om die afbreekproses van hierdie verbindings te bekamp, sal bespreek word.

**Figuur 1:** (a) Sinteseopsomming van verskeie jodo-alanien-afgeleide verbindings (b) Kristalstruktuur en eenheidsel-verpakking van *N*-Bok-jodo-alanien metielester.

## Verwysings

Jackson, R.F.W., Ross, A.J., Lang, H.L., 2010, Much improved conditions for the Negishi cross-coupling of iodoalanine derived zinc reagents with aryl halides. *The Journal of Organic Chemistry* 75 (1), 245-248. <https://doi.org/10.1021/jo902238n>.