

51

Supplementary Table 1. Distances derived from ROE data for Hexamer 1.

Atom 1	Atom 2	Target	Upper Bound	Lower Bound
C _β H2	NH2	2.81	3.32	2.39
C _β H1	NH2	4.04	4.65	3.44
C _β H1	NH4	3.86	4.44	3.28
C _β H2	NH4	2.88	3.31	2.45
C _β H4	NH4	2.79	3.21	2.37
C _β H4	NH6	3.4	3.7	3
C _β H6	NH6	2.75	3.17	2.34
C _β H3	NH5	2.82	3.24	2.4
C _β H5	NH5	2.72	3.13	2.31
C _β H1	NH3	3.08	3.55	2.62
C _β H3	NH3	2.76	3.17	2.34
C _β H1	NH1	2.77	3.18	2.35
C _α H2	NH2	2.91	3.35	2.48
C _α H1	NH2	2.38	2.74	2.02
C _α H4	NH4	2.28	2.62	1.94
C _α H5	NH6	2.42	2.78	2.05
C _α H6	NH6	2.86	3.29	2.44
C _α H4	NH5	2.36	2.71	2
C _α H5	NH5	2.81	3.23	2.39
C _α H2	NH3	2.33	2.68	1.98
C _α H3	NH3	2.69	3.09	2.29
C _α H1	NH1	2.8	3.22	2.38
C _β H6	C _α H6	2.75	3.16	2.33
C _β H4	C _α H6	2.71	3.12	2.31
C _β H5	C _α H5	2.64	3.03	2.24
C _β H4	C _α H4	2.72	3.12	2.31
C _β H3	C _α H5	2.41	2.77	2.05
C _β H1	C _α H3	2.49	2.86	2.11
C _β H1	C _α H1	2.74	3.15	2.33
C _β H2	C _α H2	2.71	3.12	2.31
C _α H4	C _β H2	2.56	2.9	1.84
C _β H6	C _ε H6'	2.36	2.72	2.01
C _β H5	C _ε H5'	2.42	2.78	2.06
C _β H5	C _ε H5''	3.02	3.48	2.57
C _β H4	C _ε H4'	2.3	2.64	1.95
C _β H5	C _δ H4'	2.77	3.19	2.36
C _β H3	C _ε H3'	2.34	2.69	1.99
C _β H2	C _ε H2'	2.34	2.69	1.99

52

C _β H2	C _ε H2"	2.75	3.16	2.34
C _β H1	C _ε H1'	2.34	2.69	1.99
C _β H1	C _ε H1"	2.72	3.13	2.31
C _β H1	C _γ H1'	3.3	3.79	2.8
C _β H3	C _γ H3'	3.23	3.71	2.74
C _β H4	C _γ H4'	3.15	3.63	2.68
C _β H5	C _γ H5'	3.54	4.07	3.01
C _β H2	C _γ H2'	3.47	4	2.95
C _α H6	C _γ H6"	2.58	2.97	2.2
C _α H5	C _γ H5"	2.35	2.7	2
C _α H5	C _γ H5'	2.99	3.44	2.54
C _α H4	C _γ H4"	2.09	2.41	1.9
C _α H1	C _γ H1"	2.37	2.73	2.02
C _α H2	C _γ H2'	2.4	2.76	2.04
NH6	C _β H5	3.82	4	2.7
NH3	1_O'NT'	3	3.5	1.9
NH4	1_O'	3	3.5	1.9
NH5	2_O'	3	3.5	1.9
NH6	3_O'	3	3.5	1.9

53

Supporting Table 2. Distances derived from ROESY data for Octamer 2.^a

Atom1	Atom2	Target	Upper Bound	Lower Bound
C _ε H2 ^b	NH2	2.94	3.23	1.90
C _β H1	NH2	2.40	2.65	1.90
C _β H2	NH2	3.04	3.35	1.90
C _α H1	NH2	4.11	4.52	1.90
C _α H2	NH2	2.94	3.23	1.90
C _ε H4"	NH4	2.92	3.21	1.90
C _α H1	NH4	3.81	4.19	1.90
C _α H3	NH5	3.03	3.33	1.90
C _α H5	NH5	2.86	3.15	1.90
C _ε H6"	NH6	2.94	3.24	1.90
C _β H6	NH6	2.93	3.22	1.90
C _α H6	NH6	2.91	3.2	1.90
C _α H4	NH6	3.11	3.42	1.90
C _β H5	NH6	2.34	2.58	1.90
C _β H8	NH8	2.91	3.2	1.90
C _β H7	NH8	2.4	2.64	1.90
C _α H8	NH8	2.73	3.01	1.90
C _ε H8"	NH8	3.08	3.39	1.90
C _α H7	NH8	2.86	3.5	1.90
C _α H5	NH7	2.99	3.29	1.90
C _β H7	NH7	2.76	3.03	1.90
C _β H6	NH7	2.33	2.56	1.90
C _α H7	NH7	2.69	2.96	1.90
C _ε H7"	NH7	2.92	3.21	1.90
C _α H3	NH3	2.81	3.09	1.90
C _β H2	NH3	2.33	2.57	1.90
C _β H3	NH3	2.78	3.05	1.90
C _α H1	NH3	3.37	3.7	1.90
C _β H1	NH1	2.85	3.13	1.90
C _α H4	NH4	3.08	3.39	1.90
C _α H2	NH4	3.13	3.44	1.90
C _α H6	C _β H8	3.1	3.41	1.90
C _α H5	C _β H7	2.65	2.92	1.90
C _α H7	C _β H7	2.9	3.19	1.90
C _α H4	C _β H6	2.52	2.77	1.90
C _β H6	NH6	2.95	3.24	1.90
C _α H5	C _β H5	2.99	3.29	1.90
C _β H5	NH6	2.38	2.62	1.90
C _α H3	C _β H3	2.6	2.99	1.90
C _α H3	C _β H5	2.6	2.99	1.90
C _β H3	NH4	2.48	2.73	1.90

C _β H4	NH4	3.06	3.36	1.90
C _α H1	C _β H1	2.93	3.22	1.90
C _α H2	C _β H2	2.95	3.24	1.90
C _β H8	C _γ H8"	2.95	3.25	1.90
C _α H8	C _ε H8'	2.81	3.09	1.90
C _α H6	C _ε H6'	2.70	2.97	1.90
C _α H1	C _ε H1'	2.60	2.86	1.90
C _β H8	C _γ H8" ^b	3.23	3.55	1.90
C _α H8	C _ε H8"	3.23	3.55	1.90
C _β H7	C _γ H7"	2.74	3.01	1.90
C _ε H3"	NH3	2.90	3.20	1.90
C _α H7	C _ε H7'	3.21	3.53	1.90
C _α H1	C _ε H1"	3.13	3.45	1.90
C _β H4	NH5	2.50	2.75	1.90
C _α H2	C _β H4	2.80	3.00	1.90
C _α H1	C _β H3	2.72	2.99	1.90
C _α H6	C _β H6	2.96	3.26	1.90
C _α H8	C _β H8	2.95	3.24	1.90
C _α H1	NH1	2.90	3.19	1.90
C _ε H5"	NH5	2.91	3.20	1.90
NH3	CONT-1	2.40	3.50	1.90
NH4	CO-1	2.40	3.00	1.90
NH6	CO-3	2.40	3.00	1.90
NH7	CO-4	2.40	3.00	1.90
NH8	CO-5	2.40	3.00	1.90
NH5	CO-2	2.40	3.00	1.90

^aObtained from the ROESY data collected at 300 msec. ^bgamma and epsilon protons are the methylene protons of the cyclopentyl ring adjacent to the β and α protons, respectively. ^cCONT refers to the carbamate carbonyl oxygen on the N-terminus protecting group.

54

55

Supporting Table 3. Distance restraints from ROESY data for tetramer 3.^a

Atom 1	Atom 2	Target	Upper Bound	Lower Bound
NH2	C _α H1	2.54	3.00	1.90
NH3	C _α H2	2.17	3.00	1.90
NH4	C _α H3	2.22	3.00	1.90
NH1	C _α H1	2.54	3.00	1.90
NH2	C _α H2	2.52	3.00	1.90
NH3	C _α H3	2.47	3.00	1.90
NH4	C _α H4	2.48	3.00	1.90
NH2	C _β H4	4.23	5.00	1.90
NH1	C _β H3	3.15	4.00	1.90
NH3	C _β H2	3.51	4.00	1.90
NH2	C _β H1	3.02	4.00	1.90
NH1	C _β H1	3.02	4.00	1.90
NH2	C _β H2	3.02	4.00	1.90
NH3	C _β H3	3.03	4.00	1.90
NH4	C _β H4	2.98	4.00	1.90
NH2	NH3	3.58	4.00	1.90
C _α H1	C _β H4	2.41	3.00	1.90
C _α H1	C _β H1	3.02	4.00	1.90
C _α H2	C _β H2	3.11	4.00	1.90
C _α H4	C _β H4	2.98	4.00	1.90

^aDerived from ROESY data at 300 msec mixing time at 277 K.