

Analytical Data

No.	Compound	MS Data		Amino Acid Composition						
		Type	M+H	M+H	Ala	Met	Leu	Cha	Arg	Other
			(calc)	(found)						
1	Ac-(Cha)RAMASL-NH ₂	FAB	842	842.6	0.93	0.87	1.02	0.86	1.01	
2	Ac-(L-Nba)RAMASL-NH ₂	FAB	854	854.5	0.87	0.63	1.06	-	0.91	0.79 Nba
3	Ac-(L-hCha)RAMASL-NH ₂	FAB	856	856.5	0.85	0.61	1.08	-		1.94 Arg + hCha
4	Ac-(pCH ₃ -Cha)RAMASL-NH ₂	FAB	856	856.4	0.89	0.61	0.98	-	1.05	1.00 pCH ₃ -Cha
5	Ac-(pCH ₃ -Cha)RAMASL-NH ₂	FAB	856	856.4	0.90	0.87	0.98	-	0.99	0.82 pCH ₃ -Cha
6	Ac-(2-(S)-exo-L-Nba)RAMASL-NH ₂	FAB	854	854.5	0.60	0.55	0.90	-	0.98	
7	Ac-(2-(R)-exo-L-Nba)RAMASL-NH ₂	FAB	854	854.5	0.54	0.63	0.89	-	1.22	
8	Ac-(Mdp)RAMASL-NH ₂	FAB	880	880.5	0.82	0.83	2.16*	-	0.98	* Cha + Mdp
9	Ac-(L-m-I-Phe)RAMASL-NH ₂	FAB	962	962.4	0.80	0.56	1.00	-	1.41	
10	Ac-(2-(S)-Bcoa)RAMASL-NH ₂	FAB	868	868.5	0.97	1.00	1.03	-	1.79	
11	Ac-(L-m-F-Phe)RAMASL-NH ₂	FAB	854	854.4	0.78	0.77	0.96	-	1.13	1.01 m-F-Phe
12	Ac-(Cha)VAMASL-NH ₂	FAB	785	785.4	0.84	0.98	1.04	1.08	-	0.99 Val
13	Ac-(Cha)OAMASL-NH ₂	FAB	800	800.5	0.83	0.87	1.05	0.98	-	0.97 Orn
14	Ac-(Cha)O(Me) ₂ AMASL-NH ₂	FAB	828	828.7	0.83	0.92	1.02	0.88	-	1.03 Orn(CH ₃) ₂

15	Ac-(Cha)KAMASL-NH ₂	FAB	814	814.5	0.82	2.00	0.77	1.03	0.86	-	0.97 Lys
16	Ac-(Cha)K(Me) ₂ AMASL-NH ₂	FAB	842	842.6	0.86	2.14	0.93	1.01	0.90	-	0.77 Lys(CH ₃) ₂
17	Ac-(Cha)(alle)AMASL-NH ₂	ES	821	821.3	0.93	2.01	0.86	1.07	0.94	-	1.12 alle
			M+Na	M+Na							
18	NH ₂ (CH ₂) ₄ CO-(Cha)(alle)AMASL-NH ₂	ES	856	856.1	0.89	2.00	0.83	1.00	nd		0.9 alle
19	Ac-(Cha)RPMASL-NH ₂	FAB	868	868.6	0.78	0.99	1.00	0.98	0.90	1.05	0.99 Pro
20	Ac-(Cha)R(Phg)MASL-NH ₂	FAB	904	904.5	0.91	1.04	1.16	1.01	0.82	0.97	
21	Ac-(Cha)R(MePhg)MASL-NH ₂	ES	918	918.8	0.89	1.04	0.89	1.02	0.79	0.94	
22	Ac-(Cha)R(Disc)MASL-NH ₂	FAB	916	916.4	0.85	1.09	1.00	1.00	0.83	0.90	
23	Ac-(Cha)R(Tic)MASL-NH ₂	FAB	930	930.5	0.93	1.03	0.92	nd	0.53	1.04	
24	Ac-(Cha)R(CAcm)MASL-NH ₂	FAB	945	945.5	0.79	0.99	0.88	1.07	0.97	0.97	
25	Ac-(Cha)RA(Nle)ASL-NH ₂	FAB	824	824.7	0.86	2.07	-	1.00	0.98	0.94	0.98 Nle
26	Ac-(Cha)RAIASL-NH ₂	FAB	824	824.5	0.59	1.95	-	0.95	0.56	1.10	0.73 Ile
27	Ac-(Cha)RALASL-NH ₂	FAB	824	824.3	0.55	1.87	-	2.03	0.53	1.10	
28	Ac-(Cha)RAM(CAcm)SL-NH ₂	FAB	945	945.5	0.77	0.96	0.80	1.03	0.99	1.01	
29	Ac-(Cha)RAMPSL-NH ₂	FAB	868	868.5	0.78	-	0.86	0.97	0.79	0.92	0.25 Pro
30	Ac-(Cha)RAM(Pip)SL-NH ₂	FAB	889	889.5	0.79	1.02	0.80	nd	0.48	0.98	

31	Ac-(Cha)RAM(β -PhPro)SL-NH ₂	ES	944	944.9	0.90	1.00	0.91	1.00	0.87	1.00
32	Ac-(Cha)RAMAS(MeL)-NH ₂	FAB	856	856.4	0.73	1.91	0.67	-	1.02	1.07
33	Ac-(Cha)RAMAS(tLeu)-NH ₂	FAB	842	842.5	1.00	2.20	1.00	-	0.96	0.93 0.91 tLeu
34	Ac-(Cha)RAMASL-N(CH ₃) ₂	FAB	870	870.5	1.11	2.03	1.11	0.96	0.91	0.88
35	Ac-(Cha)RAMAS-NH ₂	FAB	729	729.6	0.88	2.07	0.98	-	0.96	0.95
36	Ac-(Cha)RAMA-NH ₂	FAB	642	642.4	-	1.96	1.02	-	1.12	1.02
37	Ac-(Cha)RAM-NH ₂	FAB	571	571.4	-	0.99	1.01	-	1.08	0.99
38	Ac-(Cha)RA-NH ₂	FAB	440	440.3	-	1.25	-	-	nd	0.75
39	Ac-(Cha)RMM-NH ₂	FAB	631	631.2	-	-	2.14	-	0.93	1.07
40	Ac-(Cha)RMMASL-NH ₂	FAB	902	902.5	0.81	1.03	1.92	1.04	0.96	1.00
41	Ac-(Cha)RMMAS-NH ₂	FAB	789	789.4	0.90	1.04	1.95	-	0.81	1.01
42	Ac-(Cha)RMMMA-NH ₂	FAB	702	702.3	-	1.04	2.01	-	0.76	0.96
43	Ac-(Cha)RMM-NH(mannosamine)	ES	793	793.2	-	-	2.02	-	0.95	1.03
48	Ac-(Cha)RMMMA-NHCH(CH ₂ OH) ₂	FAB	776	776.4	-	0.86	2.19	-	0.77	1.18
49	Ac-(Cha)RMMMA-NHCH ₂ CH ₂ OH	FAB	746	746.3	-	1.15	2.02	-	0.83	0.72
50	Ac-(Cha)RAMA(MeS)L-NH ₂	FAB	856	856.6	0.3	1.7	1.0	0.8	nd	0.9
51	Ac-(Cha)RAM(MeA)SL-NH ₂	FAB	856	856.5	0.83	0.98	0.87	0.98	0.93	1.03

52	Ac-(Cha)RA(MeM)ASL-NH ₂	FAB	856	856.4	0.96	2.33	-	0.87	1.11	0.74	
53	Ac-(Cha)R(MeA)MASL-NH ₂	FAB	856	856.4	0.87	1.00	0.83	0.99	0.89	1.02	
54	Ac-(Cha)(MeR)AMASL-NH ₂	FAB	856	856.5	0.84	2.04	0.96	1.00	0.90	-	
55	Ac-(MeCha)RAMASL-NH ₂	FAB	856	856.5	0.65	1.81	0.91	0.94	1.34	-	
56	Ac-(Cha)RAM(MeA)S(MeL)-NH ₂	FAB	870	870.6	0.93	1.04	0.89	-	0.80	1.08	
57	Ac-(Cha)R(MeA)M(MeA)S(MeL)-NH ₂	FAB	884	884.6	0.85	-	0.98	-	0.96	1.06	
58	Ac-(Cha)R(MeA)(Haic)S(MeL)-NH ₂	FAB	896	896.4	1.05	-	-	-	0.99	0.97	
59	Ac-(Cha)R(Tic)M(MeA)S(MeA)-NH ₂	FAB	916	916.4	0.97	-	1.02	-	0.81	1.20	
60	Ac-(Cha)R(MePhg)MAS(tLeu)-NH ₂	ES	918	918.5	0.95	1.01	1.02	-	1.06	1.12	0.83 tLeu
61	Ac-(Cha)R(tLeu)M(MeA)S(tLeu)-NH ₂	ES	898	898.5	1.07	-	0.92	-	0.92	1.30	2.10 tLeu
62	Ac-(Cha)R(MeA)M(β -PhPro)S(MeA)-NH ₂	ES	930	930.5	0.91	-	1.00	-	1.00	1.08	
63	Ac-(Cha)R(MePhg)(Haic)S(MeA)-NH ₂	ES	916	916.7	1.01	-	-	-	0.96	1.03	
64	Ac-(Cha)R(MePhg)(Haic)S(tLeu)-NH ₂	ES	944	944.7	0.94	-	-	-	1.00	1.07	0.78 tLeu
65	Ac-(Cha)R(Tic)(Haic)S(MeA)-NH ₂	ES	928	928.7	0.91	-	-	-	0.96	1.13	
66	Ac-(Cha)R(Tic)M(β -PhPro)S(MeA)-NH ₂	ES	1004	1004.7	0.92	-	1.01	-	0.99	1.08	
67	Ac-(Cha)R(MePhg)M(MeA)S(tLeu)-NH ₂	ES	932	nd	1.05	-	0.94	-	0.94	1.03	
68	Ac-(Cha)R(MePhg)(Haic)S(MeL)-NH ₂	ES	958	958.5	0.97	-	-	-	0.98	1.05	
69	Ac-(Cha)R(MeA)M(β -PhPro)S(tLeu)-NH ₂	ES	958	958.5	0.95	-	0.99	-	nd	1.05	

70	Ac-(Cha)R(Tic)M(β -PhPro)S(MeL)-NH ₂	ES	1046	1046.5	0.94	-	1.02	-	nd	1.04
71	Ac-(Cha)R(Tic)M(β -PhPro)S(tLeu)-NH ₂	ES	1032	1032.4	0.96	-	0.99	-	nd	1.05
72	Ac-(Cha)RA(Odapdc)SL-NH ₂	FAB	863	863.6	0.79	0.93	-	1.10	0.87	1.10
73	Ac-(Cha)R(MeA)(Haic)-NHCH(CH ₂ OH) ₂	FAB	756	756.4	-	-	-	-	1.01	0.99

Binding Data in SPA Assay for MHC Class II Inhibitory Peptides/Peptide Mimetics

Compound	DRB1*0401		DRB1*0101	
	IC50 (uM)	Rel. pot.	IC50 (uM)	Rel. pot.
Ac-(D-Nba)-RAMASL-NH2	0.059	0.36	0.185	0.09
Ac-(L-Nba)-RAMASL-NH2	0.011	1.71	0.039	0.52
Ac-(D-hNpa)-RAMASL-NH2	0.550	0.02	2.000	0.02
Ac-(L-hNpa)-RAMASL-NH2	0.265	0.05	2.750	0.01
Ac-(DL-hAda)-RAMASL-NH2	0.036	0.28	0.238	0.07
Ac-(Cha)RAMASL-NH2	0.039	1.00	0.068	1.00
Ac-(D-hCha)-RAMASL-NH2	0.505	0.05	0.500	0.12
Ac-(L-hCha)RAMASL-NH2	0.023	1.19	0.032	1.25
Ac-cis-ptBu-(Cha)RAMASL-NH2	2.250	0.01	1.000	0.04
Ac-cis-ptBu-(Cha)RAMASL-NH2	0.235	0.11	0.270	0.15
Ac-trans-ptBu-(Cha)RAMASL-NH2	8.500	0.004	4.900	0.009
Ac-trans-ptBu-(Cha)RAMASL-NH2	1.400	0.022	2.100	0.020
Ac-(pCH3-Cha)RAMASL-NH2	0.033	0.928	0.046	1.173
Ac-(pCH3-Cha)RAMASL-NH2	0.018	1.706	0.042	1.373
Ac-(p-OCH3-Phe)-RAMASL-NH2	0.042	0.79	0.210	0.28
Ac-(F5-L-Phe)-RAMASL-NH2	0.100	0.32	1.300	0.04
Ac-(F5-D-Phe)-RAMASL-NH2	12.00	0.003	5.850	0.015
Ac-(α -CH3-D-Cha)-RAMASL-NH2	3.500	0.010	3.050	0.018
Ac-(α -CH3-L-Cha)-RAMASL-NH2	0.055	0.63	0.053	0.91
Ac-(MeCha)RAMASL-NH2	0.041	0.67	0.193	0.25
Ac-(2-(S)-endo-L-Nba)-RAMASL-NH2	0.057	0.68	0.100	0.64
Ac-(2-(R)-endo-L-Nba)-RAMASL-NH2	0.060	0.65	0.175	0.37
Ac-(D-Ina)-RAMASL-NH2	3.900	0.010	2.250	0.028
Ac-(L-Ina)-RAMASL-NH2	0.065	0.60	0.195	0.33
Ac-(2-(S)-exo-L-Nba)-RAMASL-NH2	0.035	0.92	0.068	0.96
Ac-(2-(R)-exo-L-Nba)-RAMASL-NH2	0.022	1.53	0.052	1.31
Ac-(Mdp)-RAMASL-NH2	0.020	1.65	0.051	1.31
Ac-(D-mPP)-RAMASL-NH2	3.850	0.009	17.00	0.004
Ac-(L-mPP)-RAMASL-NH2	0.235	0.13	3.150	0.02
Ac-(Phaz)-RAMASL-NH2	0.365	0.10	1.775	0.03
Ac-(L-Dmp)-RAMASL-NH2	0.038	0.78	0.370	0.15
Ac-(D-Dmp)-RAMASL-NH2	2.600	0.013	3.450	0.017
Ac-(D-2-Tet)-RAMASL-NH2	12.50	0.004	11.00	0.007
Ac-(L-2-Tet)-RAMASL-NH2	0.160	0.30	0.540	0.13
Ac-(D-mIP)-RAMASL-NH2	2.550	0.19	1.200	0.06
Ac-(L-mIP)-RAMASL-NH2	0.030	1.56	0.105	0.61
Ac-(D-pMP)-RAMASL-NH2	1.900	0.025	1.800	0.036
Ac-(L-pMP)-RAMASL-NH2	0.063	0.69	0.285	0.22
Ac-(D-pPP)-RAMASL-NH2	1.400	0.031	2.500	0.025
Ac-(L-pPP)-RAMASL-NH2	0.060	0.73	0.250	0.26
Ac-(2R-Bcoa)-RAMASL-NH2	0.083	0.57	0.210	0.38
Ac-(2S-Bcoa)-RAMASL-NH2	0.039	1.22	0.120	0.68
Ac-(D-DMCha)-RAMASL-NH2	3.050	0.015	2.575	0.031
Ac-(L-DMCha)-RAMASL-NH2	0.225	0.24	0.345	0.23
Ac-(DL-DMNba)-RAMASL-NH2	0.310	0.19	0.415	0.19
Ac-(L-mAll-Tyr)-RAMASL-NH2	1.450	0.041	10.00	0.008
Ac-(DL-mNO2Phe)-RAMASL-NH2	0.088	0.70	0.670	0.12
Ac-(DL-pNO2Phe)-RAMASL-NH2	0.420	0.14	2.575	0.03
Ac-(D-Tcda)-RAMASL-NH2	1.200	0.028	1.650	0.039
Ac-(L-Tcda)-RAMASL-NH2	0.115	0.29	0.240	0.27
Ac-(D-mAc-Phe)-RAMASL-NH2	33.56	0.001	76.20	0

Ac-(L-mAc-Phe)-RAMASL-NH2	0.140	0.20	1.822	0.025
Ac-(D-mOCH3-Phe)-RAMASL-NH2	0.942	0.03	0.654	0.07
Ac-(L-mOCH3-Phe)-RAMASL-NH2	0.109	0.26	0.642	0.07
Ac-(DL-m,p(OCH3)2-Phe)-RAMASL-NH2	2.785	0.01	14.47	0.004
Ac-(D-pAc-Phe)-RAMASL-NH2	2.697	0.010	9.175	0.005
Ac-(L-pAc-Phe)-RAMASL-NH2	0.164	0.16	2.873	0.015
Ac-(D-3,3-DMhCha)-RAMASL-NH2	0.641	0.074	0.997	0.065
Ac-(L-3,3-DMhCha)-RAMASL-NH2	0.091	0.52	0.440	0.15
Ac-(D-4-(2,6-DMHA))RAMASL-NH2	158.8	0	209.1	0
Ac-(L-4-(2,6-DMHA))RAMASL-NH2	1.624	0.023	17.88	0.003
Ac-(D-p-F-Phe)RAMASL-NH2	0.320	0.11	0.319	0.17
Ac-(L-p-F-Phe)RAMASL-NH2	0.044	0.78	0.188	0.29
Ac-(D-m-CF3-Phe)RAMASL-NH2	0.988	0.034	0.815	0.067
Ac-(L-m-CF3-Phe)RAMASL-NH2	0.084	0.41	0.280	0.19
Ac-(D-m-iBu-Phe)RAMASL-NH2	6.194	0.005	9.845	0.006
Ac-(L-m-iBu-Phe)RAMASL-NH2	0.090	0.40	0.692	0.09
Ac-(D-p-Br-Phe)RAMASL-NH2	18.26	0.002	10.50	0.006
Ac-(L-p-Br-Phe)RAMASL-NH2	0.036	0.88	0.275	0.23
Ac-(D-o-iPr-Phe)RAMASL-NH2	215.7	0	> 300	0
Ac-(L-o-iPr-Phe)RAMASL-NH2	2.292	0.014	12.78	0.005
Ac-(D-o-CH3-Phe)RAMASL-NH2	61.54	0	200 0	
Ac-(L-o-CH3-Phe)RAMASL-NH2	0.148	0.200	3.289	0.019
Ac-(DL-o-F-Phe)RAMASL-NH2	0.333	0.11	2.491	0.025
Ac-(L-3-Pal)RAMASL-NH2	3.164	0.012	34.87	0.002
Ac-(D-3-Pal)RAMASL-NH2	100.0	0	> 100	0
Ac-(D-o-Bzl-Phe)RAMASL-NH2	245.6	0	200 0	
Ac-(L-o-Bzl-Phe)RAMASL-NH2	4.299	0.009	27.49	0.002
Ac-(D-3-Tha)RAMASL-NH2	4.490	0.009	16.34	0.004
Ac-(L-3-Tha)RAMASL-NH2	0.255	0.16	2.343	0.028
Ac-(L-4-Pal)RAMASL-NH2	3.445	0.012	27.42	0.002
Ac-(D-4-Pal)RAMASL-NH2	100	0	97.95	0
Ac-(DL-2-Tha)RAMASL-NH2	0.312	0.13	4.732	0.014
Ac-(D-m-Bzl-Phe)RAMASL-NH2	40.43	0.001	39.11	0.002
Ac-(L-m-Bzl-Phe)RAMASL-NH2	0.551	0.072	3.601	0.017
Ac-(D-m-iPr-Phe)RAMASL-NH2	13.66	0.003	11.88	0.005
Ac-(L-m-iPr-Phe)RAMASL-NH2	0.217	0.16	1.296	0.046
Ac-(D-p-I-Phe)RAMASL-NH2	1.179	0.030	9.489	0.006
Ac-(L-p-I-Phe)RAMASL-NH2	0.069	0.51	0.770	0.076
Ac-(D-o-Cl-Phe)RAMASL-NH2	2.944	0.012	11.98	0.005
Ac-(L-o-Cl-Phe)RAMASL-NH2	0.178	0.20	3.493	0.017
Ac-(D-m-F-Phe)RAMASL-NH2	2.630	0.011	2.432	0.027
Ac-(L-m-F-Phe)RAMASL-NH2	0.026	1.19	0.397	0.17
Ac-(D-p-CF3-Phe)RAMASL-NH2	2.927	0.011	9.420	0.007
Ac-(L-p-CF3-Phe)RAMASL-NH2	0.258	0.120	4.230	0.015
Ac-(D-p-Cl-Phe)RAMASL-NH2	2.968	0.011	4.393	0.015
Ac-(L-p-Cl-Phe)RAMASL-NH2	0.039	0.77	0.318	0.20
Ac-(D-3,3,5,5-TMCha)RAMASL-NH2	29.83	0.001	74.93	0
Ac-(L-3,3,5,5-TMCha)RAMASL-NH2	0.976	0.034	30.12	0.002
Ac-(Ada)-RAMASL-NH2	0.085	0.49	0.153	0.41
Ac-(D-Che)RAMASL-NH2	16.93	0.002	7.711	0.008
Ac-(L-Che)RAMASL-NH2	0.079	0.52	0.180	0.34
Ac-(DL-m-OH-Phe)RAMASL-NH2	2.735	0.018	51.21	0.001
Ac-(DL-m-Bzl-Cha)RAMASL-NH2	0.519	0.091	0.545	0.087
Ac-(D-m-Pr-Cha)RAMASL-NH2	2.693	0.017	1.671	0.029
Ac-(L-m-Pr-Cha)RAMASL-NH2	0.348	0.13	0.140	0.43
Ac-(L-m-I-Tyr)RAMASL-NH2	0.540	0.087	1.376	0.034

Ac-(D-cis-p-CH ₃ -Cha)RAMASL-NH ₂	13.77	0.003	10.90	0.006
Ac-(L-cis-p-CH ₃ -Cha)RAMASL-NH ₂	0.201	0.20	0.252	0.25
Ac-(D-trans-p-CH ₃ -Cha)RAMASL-NH ₂	8.900	0.005	7.227	0.010
Ac-(L-trans-p-CH ₃ -Cha)RAMASL-NH ₂	0.068	0.849	0.069	0.961
Ac-(Cha)RAMASL-NH ₂ *	0.017	1.00	0.026	1.00