

海洋産シアノバクテリア由来新規 Madangolide 類縁体の単離と構造決定

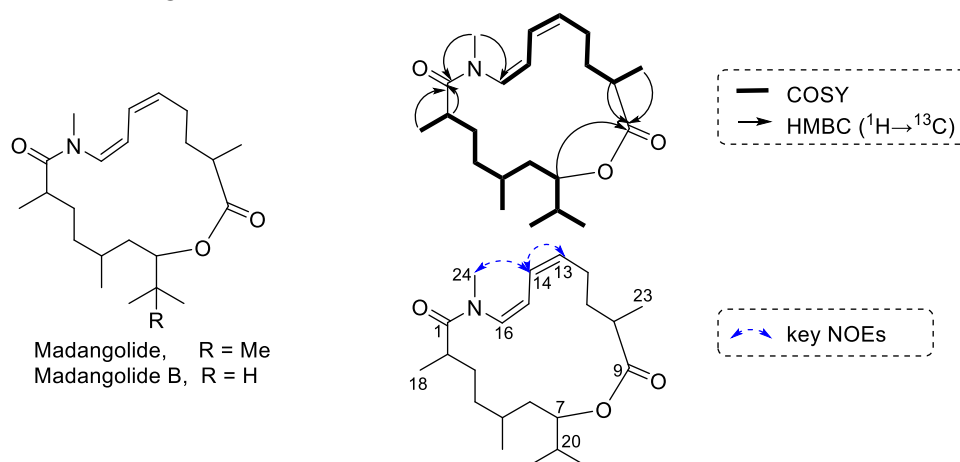
(慶大理工) ○萩原 大尋・岩崎 有紘・末永 聖武

Isolation and Structure Determination of a New Madangolide Analog from Marine Cyanobacterium. (*Faculty of Science and Technology, Keio University*) ○Masahiro Hagihara, Arihiro Iwasaki, Kiyotake Suenaga

Madangolide B, a new analog of madangolide, was isolated from a marine cyanobacterium collected at Nanjo city, Okinawa. The planar structure was determined by the analyses of the 2D NMR data including COSY, HMQC, and HMBC spectra. The geometry of the diene moiety was elucidated by the NOE correlations as shown in the figure. Madangolides have four stereocenters, and, therefore, sixteen stereoisomers are possible. We calculated their theoretical NMR data except for the eight enantiomers by using the DFT method. The comparison between experimental and theoretical NMR data suggested the plausible relative configuration of madangolides.

Keywords : Marine Natural Products; Cyanobacteria; Macrolide; Computational Chemistry

沖縄県南城市で採集した海洋シアノバクテリアより、不飽和エナミド構造を持つ 17 員環マクロライド madangolide¹⁾ の新規類縁体 (madangolide B) を単離した。平面構造は各種二次元 NMR データ (COSY, HMQC, HMBC) を解析することで決定した。ジエンの幾何配置は、下図に示す NOE 相関により決定した。Madangolide 類には 4 カ所の不斉点があり、16 種類の立体異性体が考えられる。これらの異性体のうち、エナンチオマーを除く 8 種類に関して DFT 計算を行い、理論 NMR データを算出した。理論 NMR データと実測データを比較することで、これまで平面構造の報告しなかった madangolide 類の相対立体配置を推定した。



1) Klein, D.; Braekman, J. C.; Daloze, D.; Hoffmann, L.; Castillo, G.; Demoulin, V. *J. Nat. Prod.* **1999**, 62, 934-936.