

Leptolyngbyalide A–C/oscillariolide マクロ環部の構造・合成研究

(中央大学¹・分子研²) ○村田 佳亮¹・森 寛敏^{1,2}・不破 春彦¹

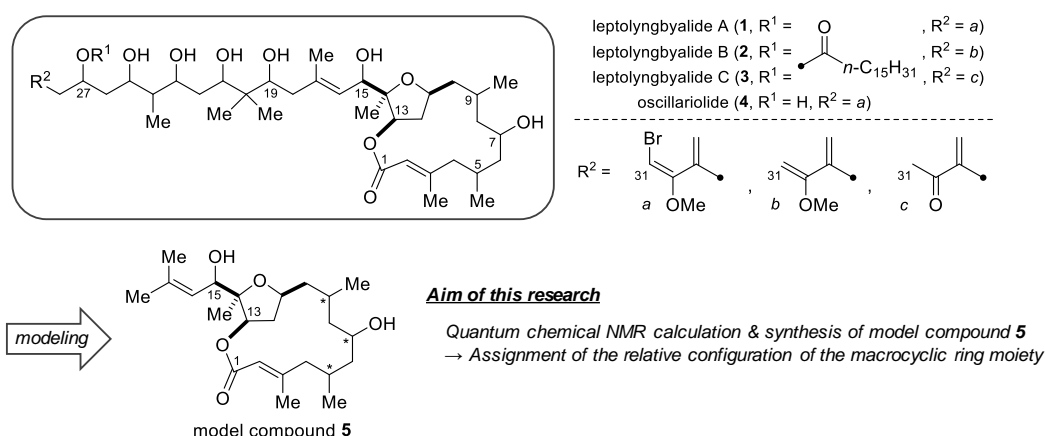
Synthetic studies for the stereochemical assignment on the macrocyclic ring moiety of leptolyngbyalide A–C/oscillariolide (¹ *Department of Applied Chemistry, Faculty of Science and Engineering, Chuo University*, ² *Institute for Molecular Science*) ○Keisuke Murata,¹ Hirotohi Mori,^{1,2} Haruhiko Fuwa¹

Leptolyngbyalide A–C¹⁾/oscillariolide²⁾ are marine polyketide macrolides isolated from cyanobacterium *Leptolyngbya* sp. PCC7375/*Oscillatoria* sp., respectively. Structurally, both compounds contain a 15-membered macrocyclic ring attached with a long polyol side chain. However, NMR-based configurational assignment of these compounds was achieved only partially due to their inherent conformational flexibility. In particular, no stereochemical information about C5, C7, C9 of the macrocyclic ring moiety is available.

In this study, we aim for determining the relative configuration of the macrocyclic ring moiety of these natural products by quantum chemical NMR calculation and model synthesis of a candidate structure.

Keywords : *Natural product chemistry, Macrolides, Stereochemical assignment, Quantum chemical NMR calculation*

Leptolyngbyalide A–C/oscillariolide (1–4)は藍藻 *Leptolyngbya* 属 PCC7375 株および *Oscillatoria* 属からそれぞれ単離された海洋マクロリドであり、15 員環マクロ環部と長鎖ポリオールを共通の構造モチーフとする。これら天然物はマクロ環骨格の柔軟性が高く、NMR による完全な立体配置決定が困難であり、特にマクロ環部の C5, C7, C9 位に関する立体情報は皆無である。本研究はマクロ環部を再現したモデル化合物 **5** に対して量子化学計算による NMR データシミュレーションを試みた後、導出された構造式を実際に合成して相対配置を明確に決定することを目的とする。



1) Piel, J. et al., *Nat. Chem. Biol.* **2019**, *15*, 813.

2) Murakami, M. et al., *Tetrahedron Lett.* **1991**, *32*, 2391.