

第399回集談会

日時：2008年8月25日（月）16:30～

場所：402講義室

座長：薬品反応化学教室准教授 中野博人先生（内線 3964）

演者：分子構造解析学教室講師 八百板康範先生（内線 3916）

演題：7員環構造を有するセスキテルペノイドの立体配座解析

要旨：分子内に7員環を有する化合物はフレキシブルな構造であるために、溶媒や温度により種々の立体配座をとることが知られている。演者は、7員環構造を有するセスキテルペノイドである lactarorufin A (1) 及び B (2) の構造決定において、これらの化合物が溶液中で複数の配座異性体として存在することを見出した。本集談会では、温度可変 NMR を用いたこれらの化合物の立体配座解析の結果について述べる。すなわち、1 及び 2 の ^{13}C -NMR スペクトルを、 CD_3OD 中、室温で測定したところ、一部のシグナルに配座異性体間の相互変換に由来する広幅化が観察された。更に、温度可変 NMR (600 MHz, CD_3OD , 20°C ~ -80°C) の検討を行い、 -80°C において2種の配座異性体に由来するシグナルの存在を確認した。これらの配座については各種二次元 NMR スペクトルより、主要な配座異性体はいす形を、準安定な配座異性体はねじれ舟形をとることが判明した。この結果は、これまでに lactarorufin 類について知られていた hinge 型配座とは異なるものであり、その配座の多様性の要因についても併せて述べる。