

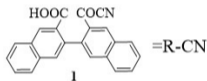
# 28AB-am287S

美白成分ロドデノールの誘起 CD 励起子法による絶対配置決定法

○篠佳秀<sup>1</sup>, 細井信造<sup>1</sup>, 岡本恭輔<sup>1</sup>, 岩崎宏樹<sup>1</sup>, 小島直人<sup>1</sup>, 山下正行<sup>1</sup> (<sup>1</sup>京都薬大)

[背景・目的] 当研究室では、新規 CD 発色試薬 (**1**) を用いた誘起円二色性 (ICD) に基づく絶対配置決定法を開発し、これまでにいくつかの生理活性天然物に適用し、その有効性を確認している。<sup>1,2)</sup> ロドデノール (**2**) はメラニンの生成を抑えることで美白効果があるとして、認可を受けた新規医薬部外品有効成分である。ところが、2013 年、**2** を含有した化粧品の使用後に白斑等の症例が相次いで報告され、大きな社会問題となっている。本成分は二級水酸基を有し、その不斉中心の絶対配置の違いが活性に及ぼす影響に興味を持たれる。

そこで、**2** の両エナンチオマーを調製し絶対配置の決定について検討した。さらに、水酸基の位置異性体 (**5**、**7**) も調製し、水酸基の位置の影響についても検討した。



[方法・結果] **2** を光学分割し得られた (*S*)-**3a**、(*R*)-**3b** を **1** と縮合し、**4a**、**4b** へと導いた。それらの CD スペクトルを測定したところ、誘起 CD が観察され、絶対配置及びコットン効果の符号との間により相関が認められた。位置異性体 (**6**、**8**) の CD スペクトルについても報告する。

