

23PO-am049

Verticine の立体配座解析

○八百板 康範¹, 町田 浩一¹ (¹東北医薬大薬)

【目的】 Verticine (**1**) は, 日本薬局方収載生薬パイモ (貝母) より得られるステロイドアルカロイドである. その構造は, 化学反応並びにスペクトルデータより決定され, ¹) また, X 線結晶解析も行われている. ²) しかし, これまで溶液中における立体配座については検討されていなかった. そこで今回, この点を明らかにすることを目的に, NMR データから **1** の立体配座解析を行ったので報告する.

【結果・考察】 立体配座解析に先立ち, 各種二次元 NMR スペクトルから **1** の ¹H- (600 MHz) 及び ¹³C-NMR (150 MHz) シグナルの帰属を行い, その結果を基に検討を行った. 先ず, ROESY スペクトルにおいて, 19 位のメチル基と 2β位, 4β位, 6 位及び 8 位の水素, 5 位の水素と 3 位及び 7α位の水素との間に ROE が認められることから, A 環及び B 環はいす形配座をとることが判明した. C 環及び D 環については, 各種二次元 NMR スペクトルから, それぞれ, 封筒形配座及びいす形配座をとることを確認した. また, ROESY スペクトルにおいて, 21 位のメチル基と 16α位及び 23α位の水素との間に ROE が認められること並びに HMBC スペクトルにおいて, 18β位の水素から 17 位及び 22 位の炭素, 26β位の水素から 22 位及び 24 位の炭素に, それぞれ, 相関が認められることから, E 環及び F 環はいす形配座をとることが明らかとなった.

1) Ito S. *et al.*, *Chem. Pharm. Bull.*, **11**, 1337 (1963).

2) Zhang J.-N. *et al.*, *Acta Cryst.*, **C56**, 907 (2000).

