

比旋光度計算と不斉合成による (+)-オキソプロパリンDの 絶対配置決定に関する研究

桑田剛志*、福井 都、秦 季之、町支臣成、延廣順子、小野行雄、日比野俐

Chemical & Pharmaceutical Bulletin, **51** (1), 20-23 (2003)

The absolute configuration of (+)-oxopropaline D by theoretical calculation of specific rotation and asymmetric synthesis

Takeshi Kuwada * , Miyako Fukui, Toshiyuki Hata, Tominari Choshi,
Junko Nobuhiro, Yukio Ono, and Satoshi Hibino

ABSTRACT : The specific optical rotation of (*R*)-oxopropaline D calculated by two *ab initio* MO methods were $+52 \pm 31^\circ$ and $+61 \pm 29^\circ$, respectively, and (+)-oxopropaline D was presumed to have an *R*-configuration. On the basis of this theoretical results, the reaction of 1-lithio- β -carboline with (*R*)-glyceraldehyde acetonide followed by oxidation with MnO_2 gave (*R*)-oxopropaline D acetonide, which was consistent with the previously synthesized (+)-oxopropaline D acetonide in all respects. From the results of theoretical calculations and the experimental synthesis, we determined that natural (+)-oxopropaline D has an *R*-configuration.

抄録 (+)-オキソプロパリンD (*Streptomyces* sp. G324) の全合成については、すでに報告しているが、その絶対配置は、不明であったことから、絶対配置の決定を検討した。まず、(*R*)-オキソプロパリンDの絶対配置を*ab initio* MO法により比旋光度を計算したところ、+ (プラス) の比旋光度の数値が得られ、*R*-配置と予測できた。そこで、キラル素子として(*R*)-グリセルアルデヒド誘導体を利用した不斉合成を検討した結果、以前合成した化合物と比旋光度等が一致した。このことから、天然物 (+)-オキソプロパリンDの絶対配置は、*R*であることが分かった。

* Institute of Medicinal Chemistry , Taisho Pharmaceutical Co. Ltd.

大正製薬 (株) 医薬研究所