フラン Diels-Alder 反応を鍵としたナキテルピオシンの合成研究

(富山県大工 1 ・富山県大生医工研セ 2) ○西川 日葵 1 ・松雪 洋恵 1 ・深谷 圭介 1,2 ・占部 大介 1,2

Synthetic Study of Nakiterpiosin Using Furan Diels-Alder Reaction (¹Toyama Pref. Univ., ²Biotech. Res. Cent. Toyama Pref. Univ.) O Nikki Nishikawa, ¹ Yoe Matsuyuki, ¹ Keisuke Fukaya, ^{1,2} Daisuke Urabe^{1,2}

Nakiterpiosin is a hexacyclic compound isolated from the sponge *Terpios hoshinota*¹⁾. Aiming at construction of the indanone framework of nakiterpiosin, we planned a furan Diels-Alder reaction. Transition state calculations were employed to design an optimal substrate for the cycloaddition. As a result of calculations with various virtual substrates, alkynyl ketone **2** was identified as the optimal substrate for its low activation barrier and product stability. Substrate **2** was synthesized and subjected to thermal conditions, successfully providing the indanone framework. Efforts are currently underway to convert product **4** to nakiterpiosin.

Keywords: Natural Products Synthesis; Nakiterpiosin, Computational Chemistry

ナキテルピオシンは海綿 Terpios Hosinota から単離・構造決定された 6 環性化合物である ¹⁾。本研究ではナキテルピオシンの全合成を目指し、フラン Diels-Alder 反応によるインダノン骨格の構築を検討した。まず、目的の環化付加を実現するために、遷移状態計算により、最適な環化付加基質を探索した。様々な仮想基質での計算の結果、反応障壁の低さと生成物の安定性から、アルキニルケトン 2 が最適な基質であると仮定した。実際にジケトン 1 を原料とし設計基質 2 を合成した。2 を熱的条件に付したところ、インダノン骨格構築に成功した。現在、得られた生成物 4 からナキテルピオシンへの変換を試みている。

1) Teruya, T.; Nakagawa, S.; Koyama, T.; Arimoto, H.; Kita, M.; Uemura, D. *Tetrahedron*, **2004**, 60, 6989.