

PRESS RELEASE (2025-10-29)



日本大学生物資源科学部

海洋生物学科

〒252-0880 神奈川県藤沢市亀井野 1866

TEL : 0466-84-3356

E-mail: suo.rei @nihon-u.ac.jp

URL: <http://www.msr-nihon-university.org/>

天然有機化合物に共通する末端構造の立体配置を、微量試料から決定可能な分析手法を開発

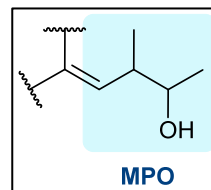
研究成果のポイント

- 天然物の末端構造を分析可能な断片分子に構造変換する化学反応条件を確立
- 構造決定に必要な 4 種類の立体異性体を効率的に合成し、LC-MS による一斉分離を実現
- 海洋由来の糸状菌から単離した微量の天然物「カプスラクトン」に本手法を適用し、有用性を実証

研究成果の詳細

(研究背景)

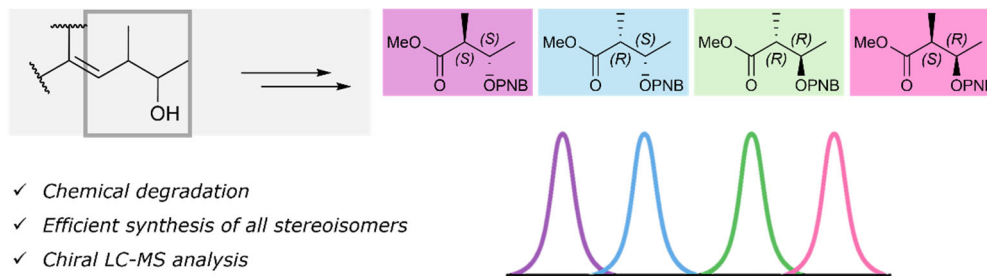
天然有機化合物（天然物）は医薬品や農薬開発において重要な化合物資源です。現在使用されている医薬品の多くは天然物に由来しており、新薬開発における天然物研究の重要性は今なお高まっています。しかしながら、天然物には複雑な 3 次元構造（立体配置）を有することが多く、これを正しく決定することは容易ではありません。特に、一部のポリケチド系天然物の分子末端部に共通して見られる「3-メチルペント-4-エン-2-オール（MPO）構造」は柔軟性が高く、計算化学によるスペクトルデータのシミュレーションや、X 線結晶構造解析では信頼性や汎用性が十分ではありませんでした。また従来の誘導体化法（Mosher 法など）も、官能基の制約や試料量の制限により適用困難な場合がしばしばあり、MPO 構造の立体配置が未決定の天然物は多数存在しています。私たちは、海洋由来の糸状菌 *Fusarium* sp. から MPO 構造を含む天然物「カプスラクトン」を単離したことを契機に、その構造解析を進める中で新しい分析手法の確立を目指しました。



(研究成果)

私たちは、MPO 構造の立体配置を以下の手順で明らかにする新手法を開発しました。

1. 天然物を化学反応によって、MPO 構造を含む小さな断片分子に構造変換
2. 得られた断片分子の構造の候補となる 4 種類の立体異性体を網羅的に化学合成
3. キラルカラムを用いた LC-MS 分析 (LC-MS: 高分解能液体クロマトグラフィー質量分析法) によって、天然物由来の断片分子と溶出時間が一致する合成化合物を特定



この方法を用いて、上述の天然物「カプスラクトン」の立体配置を、わずか 100 μg という極めて少量の試料から決定することに成功しました。本手法は MPO 構造を含む様々な天然物に適用可能であり、微量試料でも信頼性の高い構造解析を実現する汎用的な技術です。

発表論文の概要

研究論文名

A Chiral LC-MS Strategy for Stereochemical Assignment of Natural Products Sharing a 3-Methylpent-4-en-2-ol Moiety in Their Terminal Structures

著者

Rei Suo (日本大学 生物資源科学部 専任講師)

Raku Irie (横浜市立大学 理学部 助教)

Hinako Nakayama (日本大学 生物資源科学部 修士 1 年生)

Yuta Ishimaru (日本大学 生物資源科学部 当時 学部 4 年生)

Yuya Akama (日本大学 生物資源科学部 当時 修士 2 年生)

Masato Oikawa (横浜市立大学 理学部 教授)

Shiro Itoi (日本大学 生物資源科学部 教授)

公表雑誌: *The Beilstein Journal of Organic Chemistry* (Beilstein-Institut)

公表日: 2025 年 10 月 23 日

お問い合わせ先

日本大学生物資源科学部海洋生物資源科学科 増殖環境学研究室

専任講師 周防 玲 (すおう れい) TEL 0466(84)3356 E-mail: suo.rei@nihon-u.ac.jp