## 博士論文要旨

## 論文題名:セイタカアワダチソウの 二次代謝産物に関する天然物化学的研究

立命館大学大学院薬学研究科 薬学専攻博士課程 ニシドノ ユウト 西殿 悠人

セイタカアワダチソウ(Solidago altissima L.)は、キク科アキノキリンソウ属の多年生草本である。著者は、セイタカアワダチソウを介する生物間相互作用を化学的に解明すること、また、そのような生物間相互作用を著者の専門分野である生薬学の研究に応用することを志向している。本研究では、その前段階として、セイタカアワダチソウに含まれる二次代謝産物の構造を明らかにすることを試みた。特に、本研究では、天然物化学の観点から魅力的な構造のクレロダンジテルペン類およびポリアセチレン化合物を網羅的に単離し、それらの構造を各種スペクトルデータおよび物理化学的性質に基づき、確立した。

第一章では、セイタカアワダチソウに含まれるクレロダンジテルペン類の構造決定について報告した。著者は、セイタカアワダチソウ地下部から、5種の新化合物を含む 15種のクレロダンジテルペン類を単離、構造決定した。このうち、4種の新化合物を、非常に稀な立体構造である CT 型の ent-neo-クレロダンジテルペンと決定した。さらに、クレロダン骨格の相対立体配置を決定するための 「3C NMR ケミカルシフトパターンを確立した。そして、それを既知のクレロダンジテルペン類に適用し、立体構造の改訂が必要と推測される既知化合物を見出した。第二章では、セイタカアワダチソウに含まれるポリアセチレン化合物の構造決定について報告した。著者は、セイタカアワダチソウ地下部から、3種の新化合物を含む8種のポリアセチレン化合物を単離、構造決定した。このうち、2種の新化合物を、10位にアシルオキシ基を有するマトリカリアラクトンと決定した。さらに、単離したポリアセチレン化合物の化学分類学的特性を明らかにした。

第三章では、セイタカアワダチソウ地下部から調製した抽出物および単離した化合物の植物成長阻害活性について報告した。

全体を通じて、著者は、セイタカアワダチソウ地下部の詳細な成分研究を実施し、8種の新化合物を含む 23種の化合物を単離、構造決定するとともに、いくつかの化合物の植物成長阻害活性を明らかにした。また、単離した化合物の情報に基づき、立体化学および化学分類学の観点から重要な知見を得た。本研究で得られた結果は、セイタカアワダチソウを介する生物間相互作用の理解を促進するものである。

## **Abstract of Doctoral Dissertation**

## Title: Natural Product Chemistry Studies on Secondary Metabolites from *Solidago altissima* L.

Doctoral Program in Pharmacy
Graduate School of Pharmacy
Ritsumeikan University

ニシドノ ユウト NISHIDONO Yuto

Solidago altissima L. is a herbaceous perennial plant of the Asteraceae family that has been recognized as a rich source of secondary metabolites. Some of these compounds and their mixtures may be responsible for the biological interactions between S. altissima L. and various organisms. In order to chemically elucidate these interactions, I investigated the phytochemical properties of S. altissima L.

In Chapter 1, I described the isolation and structural elucidation of clerodane diterpenes. Five new clerodane diterpenes and ten known ones were isolated from the underground part of *S. altissima* L.. Four new compounds were determined to be rare *ent-neo*-clerodanes comprising the *cis*-A/B ring and a *trans*-configuration between the methyl groups at C-8 and C-9. Moreover, the basic rules for the stereochemical elucidation of the four clerodane types were established. By adapting it to the known clerodane diterpenes, I found the reported stereochemistry of some compounds to be in need of revision.

In Chapter 2, I detailed the isolation and structural elucidation of polyacetylenes. Eight polyacetylenes, including three undescribed compounds, were isolated from the underground parts of *S. altissima* L.. The presence of matricaria lactones with an acyloxy group at C-10 was reported for the first time. Additionally, the chemotaxonomic significance of the isolated polyacetylenes was clarified.

In Chapter 3, I reported the plant growth inhibitory activity of *S. altissima* L. extract and isolated compounds.

In conclusion, I investigated the constituents of the underground parts of *S. altissima* L. and identified 23 compounds, including eight new compounds. I also clarified their significance in terms of stereochemistry and chemotaxonomy. These findings help explain the biological interactions between *S. altissima* L. and various organisms.