

南中国海软珊瑚 *Lobophytum* sp. 中的一个新的神经酰胺^{*}

刘 虹, 曾陇梅, 苏镜娱
(中山大学化学与化学 工程学院, 广东 广州 510275)

摘 要: 从采自南中国海域的豆荚软珊瑚中分离得到一个新的神经酰胺, 通过波谱分析及化学转化等方法确定了它的化学结构。
关键词: 豆荚软珊瑚 *Lophytum* sp.; 神经酰胺; (2*S*, 3*S*, 4*R*)-*N*[2-(1, 3, 4-三羟基-正十八烷基)]-正十八碳酰胺
中图分类号: O629. 6 **文献标识码:** A **文章编号:** 0529-6579 (2004) 03-0124-02

软珊瑚是神经酰胺的丰富来源, 我们在对软珊瑚次生代谢产物的系统研究中, 从豆荚软珊瑚 *Lophytum* sp. 中分离得到了一个新的鞘氨醇类神经酰胺。

化合物 (1, 图 1), 白色无定型粉末状固体, θ_{mp} 113 ~ 115 °C, $[\alpha]_{\text{D}}^{20} + 13. 2$ (*c* 0. 2, pyridine); EIMS m/z : 583 $[M]^+$ 和元素分析(*w* /%, 括号里为计算值): C 73. 94(73. 03), H 12. 46(12. 60), N 2. 29 (2. 39), O 11. 21(10. 96), 确定分子式为 C₃₆H₇₃NO₄。
IR 3 369 cm⁻¹ 显示含有羟基, 1 548, 1 613 cm⁻¹ 表明存在 1 个仲酰胺。表 1 表明, ¹H NMR 有 2 个末

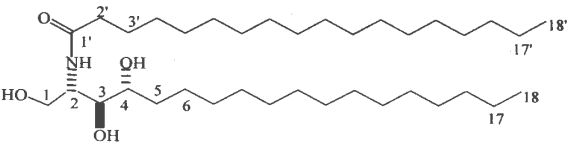


图 1 化合物 1 的结构
Fig 1 Structure of compound 1

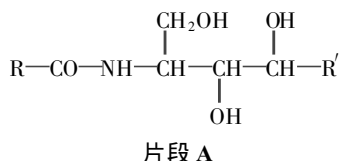
端甲基的信号 δ 0. 87(6H, t, *J* = 6. 5 Hz), 24 个亚甲基的信号 δ 1. 30(48H, br s), 1 个酰胺基质子的信号 δ 8. 46(1H, d, *J* = 8. 5 Hz)。

表 1 化合物 1 的 ¹H NMR 和 ¹³C NMR 数据(pyridine-*d*₅)
Tab 1 ¹H and ¹³C NMR data of 1(pyridine-*d*₅)

C/H	¹³ C NMR	¹ H NMR(<i>J</i> / Hz)	Key ¹ H- ¹ H COSY
1	62. 2(t)	4. 47(1H, dd, 10. 5, 5. 0) 4. 50 (1H, dd, 10. 5, 5. 0)	H- 2
2	53. 8(d)	5. 08 (1H, m)	N- H, H- 1, H- 3
3	76. 8(d)	4. 38 (1H, dd , 6. 5, 5. 0)	H- 2, H- 4
4	73. 1(d)	4. 28 (1H, m)	H- 3, H- 5
5	34. 0(t)	1. 95 (2H, m)	H- 4, H- 6
6	26. 5(t)	2. 24 (1H, m), 1. 70 (1H, m)	H- 5
7- 17	29. 6 ~ 30. 3(t)	1. 26 ~ 1. 33(22H, m)	
18	14. 3(q)	0. 87 (3H, t, 6. 5)	
N- H		8. 46 (1H, d, 8. 5)	H- 2
1'	173. 4 (s)		
2'	36. 9(t)	2. 46 (2H, t, 7. 5)	H- 3'
3'	26. 4(t)	1. 82 (2H, m)	H- 2'
4'	23. 0(t)	1. 38 (2H, m)	H- 3'
5'- 17'	29. 6 ~ 30. 3(t)	1. 26 ~ 1. 33 (26H, m)	
18'	14. 3(q)	0. 87 (3H, t, 6. 5)	

^{*} 收稿日期: 2003- 12- 01
基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (29932030)
作者简介: 刘虹 (1977 年生), 女, 硕士, 现在广州市东山疾病预防控制中心工作; 通讯联系人: 曾陇梅;
E-mail: ceszlm@zsu. edu. cn
(C)1994-2019 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

^{13}C NMR 和 DEPT 显示分子中有 1 个季碳, 3 个次甲基, 30 个亚甲基和 2 个甲基, 其中 δ 173.4 表明含有 1 个 (CONH); δ 53.8, 76.8, 73.1, 62.2 分别表示含有 1 个 (CHNH), 1 个 (CHOH), 1 个 (CHOH) 和 1 个 (CH₂OH)。以上的波谱分析可以表明 **1** 是一个鞘氨醇类的神经酰胺^[1], 结合 $^1\text{H}-^1\text{H}$ COSY 和 HMQC 表明分子中存在结构片段 A。



将化合物 **1** 甲醇解, 经 GC/MS^[2] 分析证明醇解产物为正十八酸甲酯, 剩下的部分应是含有 3 个羟基和 1 个氨基的正十八碳鞘氨醇。化合物 **1** 中的 H-1, H-2, H-3 和 H-4 的化学位移和偶合常数与已知的化合物 (2S, 3S, 4R) 2-N-(十六烷

基) 鞘氨醇 (**2**)^[3] 相同, 且 **1** 和 **2** 的旋光值 ($[\alpha]_{\text{D}}^{26} + 14.15$)^[3] 也基本一致。根据以上物理常数的比较, 确定化合物 **1** 和 **2** 在 2, 3 和 4 位具有相同的立体构型。**1** 的结构确定为 (2S, 3S, 4R) N-[2-(1, 3, 4-三羟基-正十八烷基)]-正十八碳酰胺。

参考文献:

- [1] LOURENCO A, LOBO A M, RODRIGUEZ B. Ceramides from the fungus [J]. *Phytochemistry*, 1996, 43 (3): 617.
- [2] NATORI T, MORITA M, AKIMOTO K. Agelasphins, novel antitumor and immunostimulatory cerebroside from the marine sponge *Agelas mauritianus* [J]. *Tetrahedron*, 1994, 50 (9): 2771.
- [3] GAO J M, DONG Z J, LIU J K. A new ceramide from the basidiomycetes *Armillaria mellea* [J]. *Chinese Chem Letters*, 2001, 12 (2): 139.

A New Ceramide from the Soft Coral *Lobophytum* sp.

LIU Hong, SU Jing yu, ZENG Long mei

(School of Chemistry and Chemical Engineering, Sun Yat-sen University, Guangzhou 510275, China)

Abstract: A new phytosphingosine type ceramide has been isolated from the South China Sea soft coral *Lobophytum* sp. Its structure was established as (2S, 3S, 4R) N-[2-(1, 3, 4 trihydroxy octadecanyl)] octadecanamide by spectroscopic methods and chemical conversion.

Key words: *Lobophytum* sp.; ceramide; (2S, 3S, 4R) N-[2-(1, 3, 4 trihydroxy octadecanyl)] octadecanamide