

实用天然产物手册

海洋天然产物

● 林文翰 主编



化学工业出版社

实用天然产物手册

ISBN 7-5025-7862-5



9 787502 578626 >

销售分类建议：生物/生物技术

ISBN 7-5025-7862-5

定价：48.00元

《实用天然产物手册》编委会

主 任 杨峻山

编 委 杨秀伟 赵玉英 庾石山 杨峻山

赵毅民 林瑞超 林文翰 张致平

邓明鲁 吴良士 项 彬

本分册编写人员名单

主 编 林文翰

副主编 邱 彦

编 者 林文翰 邱 彦 金鹏飞 吕 芳

李 想 付宏征

新华书店
PDG

内 容 提 要

本书是《实用天然产物手册》中的一本。

本书总结了近几十年国际上对海洋活性天然产物研究的主要化学结构及其生物活性。根据最新海洋天然产物数据库 Marinlit 记载,目前国际上发现海洋天然产物 18000 多种。本书选择了具有特征结构和具有一定生物活性的海洋天然产物 374 种,分别从结构式、分子式、相对分子质量、理化常数及谱学数据、来源、分析方法、生物活性与毒性等方面加以介绍,并附有英文索引。

本书内容新颖、简洁、实用,可供从事海洋生物学研究的科研人员、研究生和相关读者参考。

鄧平 鄧平
PDG

序 言

天然产物是指天然存在的物质,包括人、动物、植物、矿物、昆虫、海洋生物以及微生物等。也有学者将动物、植物、昆虫、海洋生物和微生物体内的组成成分或其代谢产物以及人和动物体内许许多多内源性的化学成分统称作天然产物,其中主要包括蛋白质、多肽、氨基酸、核酸、各种酶类、单糖、寡糖、多糖、糖蛋白、树脂、胶体物、木质素、维生素、脂肪、油脂、蜡、生物碱、挥发油、黄酮、糖苷类、萜类、苯丙素类、有机酸、酚类、醌类、内酯、甾体化合物、鞣酸类、抗生素类等天然存在的化学成分。

人类在其进化过程中,首先接触的和赖以生存的都是这些天然物质,给我们提供了食物、衣物、防病治病的药物和日常使用的东西。早期人类就是利用大自然为我们提供的这些天然物质生存、繁衍。随着人类社会的发展,逐渐对大自然加深认识,懂得了如何利用这些天然物质,改造加工这些天然物质,使它们更好地为人类服务。特别是近代科学技术的迅猛发展,人们逐渐地对组成这些天然物质的化学成分或其代谢产物进行深入的研究,从分子水平上认识这些天然物质,并进一步研究它们的利用价值,从而发现人类生存需要的蛋白质、维生素、脂肪、碳水化合物以及用以防病治病的药物、防治病虫害的农药、人们日常生活中的香料、甜味料、色素、保健饮料以及化学工业用的各种化学原料等。人类进入 21 世纪以来,世界上掀起了回归大自然的热潮,天然产物与人们生活的关系也到了一个新的阶段,天然产物似乎成了人们最为依赖和信任的朋友。

我们国家地大物博,自然资源非常丰富。在我国数千年发展的历史长河中,人们为了生存,很早就对大自然有了较为深入的认识,并掌握了如何利用大自然的资源,为我们生产更好更多的产品,为人类的生活生产服务,在同各种疾病的斗争中积累了丰富的经验,创造了人类独一无二的中医中药,是我们国家民族文化的瑰宝,对我国的繁荣昌盛发挥了巨大作用,也是我国人民对人类做出的巨大贡献。但是由于历史上的各种原因,我国在天然物质的开发利用中相对滞后。为了充分合理利用我国的自然资源,发展我国在天然物质的现代研究,提高我们的研究水平,同时也为更好地利用这些天然产物,发展我们的化学工业、制药工业、香料工业、保健食品、化妆品工业等,我们将国内外报道的具有生物学活性和实用价值天然产物汇编成册,以供同行在开发利用我国的自然资源的实践中参考。

本书第一批共十二个分册:生物碱;黄酮类;皂苷类;萜类;苯丙素;其他天然产物;海洋天然产物;抗生素与微生物产生的生物活性物质;动物药物;生化药物;岩石与矿物;天然色素。

本书内容丰富详实,特色突出,不仅是正在学习的研究生的必备参考书,也是研究人员案头的得力工具,既是从事天然产物开发的重要数据库,也是各大企业技术人员对产品质量控制、工艺研究、开发新产品的重要参考资料。成书后,会更进一步推动天然物质的研究,提高研究水平。同时也会起到更加合理地利用我国自然资源、发扬光大我国传统医学的作用,使之达到永续利用。使我国的天然产物产品走上国际市场。

前 言

海洋生物具有特殊生态环境（高盐、高压、缺氧、缺少光照等），在其生长和代谢过程中，产生了大量具有奇特结构的天然产物和具特殊生理活性和功能的物质，成为开发新型海洋药物和功能食品的一个巨大的天然产物宝库。随着海洋在沿海国家可持续发展中的战略地位日益突出，以及全方位开发利用海洋生物资源的社会需求日益增长，海洋生物技术受到了国际上发达国家和发展中国家的高度重视。目前开发利用海洋生物资源已成为世界各国竞相研究的一个重要领域和发展方向。研究开发海洋天然产物，如海洋药物、功能食品、生物材料等，对充分利用我国丰富的海洋资源，提高科学技术水平，发展国民经济都具有重要的战略意义。

海洋药理学是一门新兴的交叉应用学科，是当代药学研究的新领域。最近 30 多年来，药物学家从海洋生物中发现了大量对人类重大疾病具有显著治疗功效、有开发价值的活性物质，包括抗肿瘤、抗细菌、抗真菌、增强免疫、抗炎症、抗病毒（包括抗艾滋病），保健，化妆等多个医药学领域。

海洋药物的研究起始于 20 世纪 60 年代初。美国是最早开展海洋生物活性物质研究的国家。随后各国学者相继开展了海洋生物抗肿瘤、抗病毒、抗真菌、抗心脑血管病、抗艾滋病等活性成分的研究。在过去的几十年间，16000 多种海洋天然产物被发现，其中有重要生物活性并已申请专利的新化合物有 200 多种。在已发现的这些化合物中，不仅包括陆地生物中已存在的各种化学结构类型，并且还存在很多特殊独有的新颖化学结构类型。从海洋生物中发现了一系列高效低毒的活性化合物，其中有些已进入临床前或临床实验阶段。欧洲、美国、日本等每年用于海洋药物开发研究的经费皆大于 1 亿美元。我国目前已有多种海洋药物获国家批准进入临床研究或进入市场。海洋药物的研究和开发正向产业化发展。目前世界海洋生物总产值约达 1.5 万亿美元。

本书总结了近几十年国际上对海洋活性天然产物研究的主要化学结构及其生物活性。根据最新海洋天然产物数据库 Marinlit 记载，目前国际上发现海洋天然产物 18000 多种。由于本书篇幅有限，只能选择具有特征结构和具有一定生物活性的海洋天然产物，以供从事海洋生物学研究的科研人员、研究生和相关读者参考。

本书按来源分为四部分，分别为海绵天然产物、珊瑚天然产物、海藻天然产物和其他海洋天然产物。每一部分依英文名称字母顺序排列。需要说明的是，本书产物尚无统一中文译名，只列出其英文名称。

由于作者水平和时间所限，本书中的错误和缺点在所难免，敬请同行专家和同仁批评指正，不胜感激。

林文翰

2005 年 8 月 于北京大学天然药物及仿生药物国家重点实验室

(京)新登字 039 号

图书在版编目(CIP)数据

海洋天然产物/林文翰主编. —北京:化学工业出版社,
2005.11

(实用天然产物手册)

ISBN 7-5025-7862-5

I. 海… II. 林… III. 海洋生物-手册 IV. Q178.53-62

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2005) 第 131221 号

实用天然产物手册

海洋天然产物

林文翰 主编

责任编辑:徐蔓 李彦玲

文字编辑:管景岩

责任校对:洪雅姝

封面设计:郑小红

*

化学工业出版社出版发行

(北京市朝阳区惠新里 3 号 邮政编码 100029)

购书咨询:(010)64982530

(010)64918013

购书传真:(010)64982630

<http://www.cip.com.cn>

*

新华书店北京发行所经销

北京市彩桥印刷厂印刷

三河市前程装订厂装订

开本 787mm×1092mm 1/16 印张 16 字数 496 千字

2006 年 1 月第 1 版 2006 年 1 月北京第 1 次印刷

ISBN 7-5025-7862-5

定价:48.00 元

版权所有 违者必究

该书如有缺页、倒页、脱页者,本社发行部负责退换

目 录

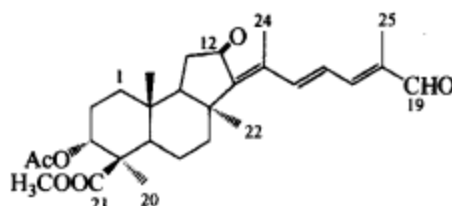
A 海绵天然产物	1
B 珊瑚天然产物	152
C 海藻天然产物	178
D 其他海洋天然产物	190
英文索引	241

蘇平知覺
PDG

A 海绵天然产物

A0001 3-O-Acetyljaspiferal D

【结构式】



【分子式】 $C_{28}H_{38}O_6$

【相对分子质量】 m/z 470

【理化常数及谱学数据】 黄色无定形物质; $[\alpha]^{25}_D - 198.4^\circ$ (c 1, $CHCl_3$); UV(OH) λ_{max} (nm): 288(3.1), 339(3.8), 385(sh); IR(KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 1710, 1670; 1H NMR($CDCl_3$) δ : 9.51(1H, s, H-19), 7.06(1H, d, $J = 15.4$ Hz, H-15), 7.02(1H, dd, $J = 15.4, 10.8$ Hz, H-16), 6.98(1H, d, $J = 15.4$ Hz, H-17), 5.43(1H, brs, H-3), 3.65(3H, s, OCH_3), 2.43(1H, brd, $J = 10.5$ Hz, H-5), 2.35(3H, s, H-25), 2.30(1H, m, H-11), 2.18(1H, m, H-11a), 2.17(2H, m, H-7), 2.10(1H, m, H-2a), 2.09(3H, s, AcO), 2.06(3H, s, H-26), 1.93(3H, s, H-25), 1.83(1H, m, H-9), 1.81(1H, m, H-1a), 1.76(2H, m, H-6), 1.73(1H, m, H-2b), 1.47(3H, s, H-22), 1.18(3H, s, H-20), 1.25(1H, m, H-1b), 0.83(3H, s, H-23); ^{13}C NMR($CDCl_3$) δ : 207.8(s, C-12), 198.2(d, C-19), 179.8(s, C-21), 172.5(s, $OCOCH_3$), 150.3(s, C-13), 149.5(d, C-17), 142.5(s, C-18), 141.4(s, C-15), 138.9(s, C-14), 130.5(d, C-16), 74.8(d, C-3), 52.5(q, OCH_3), 50.3(d, C-9), 48.1(s, C-4), 45.1(s, C-8), 42.5(d, C-5), 37.4(t, C-11), 37.1(t, C-7), 36.4(s, C-10), 29.4(t, C-1), 25.4(t, C-2), 25.1(q, C-22), 24.5(t, C-6), 23.2(q, C-20), 22.0(q, $OCOCH_3$), 20.4(t, C-6), 19.8(q, C-23), 14.3(q, C-24), 10.4(q, C-25); HREIMS m/z 470.2689(calcd for $C_{28}H_{38}O_6$, 470.2668).

【来源】 海绵 *Jaspis stellifera*

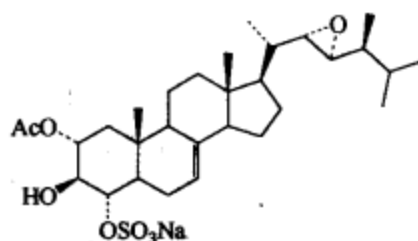
【生物活性与毒性】 体外试验显示对 L1220 细胞系具有微弱的细胞毒作用, 其 IC_{50} 值大于 $3.3 \mu g/mL$ 。

【参考文献】 1. Zampella A, et al. J Nat Prod, 2000, 63: 943

2. Kobayashi J, et al. Tetrahedron, 1996, 52: 5745

A0002 Acanthosterol sulfate J

【结构式】



【分子式】 $C_{30}H_{47}NaO_8S$

【相对分子质量】 m/z 590

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]^{25}_D - 25^\circ$ (c 0.092, MeOH); UV(MeOH) λ_{max} (lg ϵ): 208(4.4) nm; IR(KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3340, 1640, 890; 1H NMR(600MHz, MeOH- d_4) δ : 5.26(1H, brd, 4.2, H-7), 4.25(1H, dd,

9.6, 9.0, H-4), 4.08(1H, ddd, 12.6, 9.0, 4.2, H-2), 3.65(1H, t, 9.0, H-3), 2.51(1H, dd, 7.2, 2.4, H-23), 2.50(1H, dd, 7.2, 2.4, H-22), 2.36(1H, brd, 15.6, H-6 α), 2.07(1H, dd, 12.6, 4.2, H-1 β), 2.04(3H, s, AcO), 2.02(1H, brd, 13.2, H-12 β), 1.96(1H, m, H-16 α), 1.87(1H, m, H-9), 1.87(1H, m, H-6 β), 1.82(1H, m, H-14), 1.71(1H, m, H-25), 1.61(1H, m, H-16 β), 1.59(1H, m, H-15 α), 1.57(1H, m, H-11 α), 1.52(1H, m, H-5), 1.50(1H, m, H-15 β), 1.48(1H, m, H-11 β), 1.46(1H, m, H-17), 1.31(1H, m, H-12 α), 1.26(1H, m, H-20), 1.18(1H, t, 12.6, H-1 α), 1.00(3H, d, 6.6, H-21), 1.04(1H, m, H-24), 0.97(3H, d, 6.6, H-27), 0.94(3H, s, H-19), 0.93(3H, d, 6.6, H-26), 0.90(3H, d, 6.6, H-28), 0.55(3H, s, H-18); ^{13}C NMR (150MHz, MeOH- d_4) δ : 12.2(C-18), 13.4(C-28), 15.4(C-19), 16.7(C-21), 19.3(C-26), 20.7(C-27), 21.1(AcO), 26.4(C-6), 32.6(C-25), 40.0(C-20), 40.4(C-12), 42.2(C-1), 43.3(C-24), 46.3(C-5), 50.6(C-9), 55.6(C-14), 57.2(C-17), 61.4(C-23), 64.2(C-22), 74.2(C-2), 78.1(C-3), 84.2(C-4), 118.7(C-7); FABMS (negative, TEA) m/z 567 ($\text{M} - \text{Na}$) $^-$; HRFABMS (negative, PEG sulfate) m/z 567.3016 (calcd for $\text{C}_{30}\text{H}_{47}\text{O}_8\text{S}$ 567.2992)。

【来源】 海绵 *Acanthodendrilla* sp. [1]

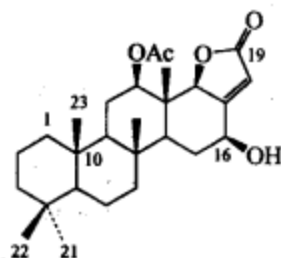
【分析方法】 样品分别用甲醇、BuOH 萃取, BuOH 萃取部分硅胶柱层析 (CHCl_3 -MeOH 85:15), ODS 柱层析 (MeOH- H_2O), 反相 HPLC (MeOH) 得到纯化化合物 [1]。

【生物活性与毒性】 抗真菌活性, 酵母菌 *Saccharomyces cerevisiae* 检测, 抑制区域 (mm): A364A 10; STX338-2C 11; 14028g11 [1]。

【参考文献】 1. Tsukamoto S, et al. J Nat Prod, 1998, 61: 1374

A0003 12-O-Acetyl-16-O-deacetyl-16-*epi*-sclerolbutenolide

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{27}\text{H}_{40}\text{O}_5$

【相对分子质量】 m/z 444

【理化常数及谱学数据】 无色无定形固体; $[\alpha]_D^{25} + 62.0^\circ$ (c 0.46, CHCl_3); UV (MeOH) λ_{max} (ϵ): 217nm (7500); IR (film) ν_{max} (cm^{-1}): 3420, 2930, 2850, 1740, 1650, 1240; ^1H NMR (500MHz, CDCl_3) δ : 5.91(1H, s, H-20), 4.99(1H, dd, 12.0, 4.5, H-12), 4.50(1H, s, H-18), 4.46(1H, dd, 13.2, 7.0, H-16), 2.16(1H, ddd, 12.2, 7.0, 3.4, H-15 α), 2.10(3H, s, OAc), 1.80(1H, brd, 12.5, H-7 β), 1.68(1H, m, H-11 α), 1.60(1H, m, H-1 β), 1.58(1H, m, H-2 α), 1.55(1H, m, H-6 α), 1.52(1H, m, H-11 β), 1.51(1H, m, H-15 β), 1.41(1H, m, H-2 β), 1.38(1H, m, H-6 β), 1.35(1H, m, H-3 β), 1.11(1H, m, H-3 α), 1.08(1H, dd, 10.0, 3.4, H-14), 0.98(1H, m, H-9), 0.97(1H, m, H-7 α), 0.88(3H, s, Me-24), 0.84(3H, s, Me-22), 0.83(1H, m, H-1R), 0.82(3H, s, Me-23), 0.80(1H, m, H-5), 0.79(3H, s, Me-21), 0.77(3H, s, Me-25); ^{13}C NMR (125MHz, CDCl_3) δ : 170.3(s), 169.6(s), 166.4(s), 111.8(d), 87.8(d), 79.2(d), 68.0(d), 58.2(d), 56.0(d), 50.1(d), 45.6(s), 41.6(t), 41.4(t), 39.6(t), 37.3(s), 37.1(s), 32.9(s), 32.7(q), 30.3(t), 23.3(t), 21.2(q), 20.9(q), 18.1(t), 17.6(t), 17.1(q), 16.0(q), 7.1(q); FABMS m/z 445 [$(\text{M} + \text{H})^+$]; HRFABMS m/z 445.2951 [calcd for $\text{C}_{27}\text{H}_{41}\text{O}_5$ (Δ - 0.3 mmu)] [1]。

【来源】 海绵 *Hyrtios* cf. *erectus* [1]

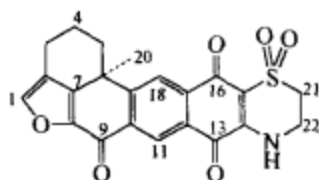
【分析方法】 样品 EtOH 提取, CCl_4 、 CH_2Cl_2 萃取部分合并, ODS 硅胶柱层析 (60%~100% MeOH), Sephadex LH-20 (hexane- CH_2Cl_2 -MeOH 4:2:1), HPLC (MeOH- H_2O 82:18) 得到纯化化合物 [1]。

【生物活性与毒性】 细胞毒活性, 抗 P-388 IC_{50} 2.1 $\mu\text{g}/\text{mL}$ ^[1]。

【参考文献】 1. Ryu G, et al. J Nat Prod, 1996, 59: 515

A0004 Adociaquinone B

【结构式】



【分子式】 $C_{22}H_{17}O_6NS$

【相对分子质量】 m/z 423

【理化常数及谱学数据】 黄色固体; $[\alpha] +21.5^\circ$ (c 1.86, CH_3CN); FABMS m/z 424 $[M+H]^+$; UV (MeOH) λ_{max} : 294 nm; IR ν_{max} (cm^{-1}): 3260, 1627, 1572, 1548, 1119; ^1H NMR (500 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ : 7.99 (H, s, H-1), 2.83 (H, dd, $J = 16.5, 7.5$ Hz, H-3a), 2.58 (H, m, H-3b), 2.20, 2.05 (2H, m, H-4), 2.64 (H, m, H-5a), 1.62 (H, dt, $J = 13.0, 4.0$ Hz, H-5b), 8.70 (H, s, H-11), 8.26 (H, s, H-18), 1.49 (3H, s, H-20), 3.38 (2H, t, $J = 6.0$ Hz, H-21), 3.86 (2H, m, H-22), 9.23 (H, brs, NH); ^{13}C NMR (125 MHz, $\text{DMSO}-d_6$): 146.2 (C-1), 121.6 (C-2), 16.2 (C-3), 17.8 (C-4), 30.3 (C-5), 36.8 (C-6), 147.9 (C-7), 143.1 (C-8), 169.4 (C-9), 137.9 (C-10), 124.7 (C-11), 130.9 (C-12), 173.7 (C-13), 147.1 (C-14), 111.3 (C-15), 178.3 (C-16), 131.8 (C-17), 123.4 (C-18), 154.6 (C-19), 31.6 (C-20), 48.2 (C-21), 39.3 (C-22)。

【来源】 海绵 *Xestospongia* sp.

【分析方法】 海绵的甲醇提取物在水和氯仿间分配, 氯仿层上硅胶柱 (氯仿-甲醇-TFA) 分离得到纯品。结构通过 (HR) MS、IR、UV 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 1. 细胞毒活性: HCT, $IC_{50} = 21 \mu\text{mol}/\text{L}$; xrs-6, $IC_{50} = 23 \mu\text{mol}/\text{L}$ 。2. 拓扑异构酶抑制剂: $IC_{90} < 11 \mu\text{mol}/\text{L}$ 。

【参考文献】 1. Gisela P Concepcion, et al. J Med Chem, 1995, 38: 4503

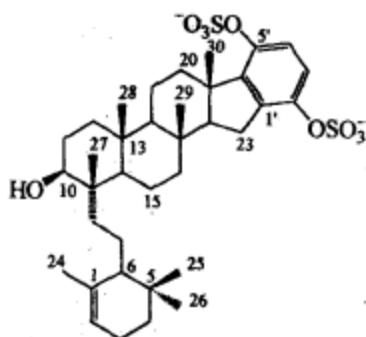
2. Schmitz F J, et al. J Org Chem, 1988, 53: 3922

3. Harada N, et al. Tetrahedron: Asymmetry, 1995, 6: 375

4. Shen Y. Chin Pharm J (Taipei), 2002, 54: 207

A0005 Adociasulfate 1

【结构式】



【分子式】 $C_{36}H_{52}O_9S_2^-$

【相对分子质量】 m/z 692

【理化常数及谱学数据】 白色粉末; $[\alpha]^{25} -34^\circ$ (c 0.10, MeOH); UV (OH) λ_{max} : 263.8 nm; IR (KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3470, 2933, 1475, 1239, 1047, 816; ^1H NMR (CDCl_3) δ : 5.22 (s, H-2), 1.88 (brs, H-3), 2.39 (dd, $J = 14.4, 14.4$ Hz, H-23), 2.59 (dd, $J = 6.6, 14.4$ Hz), 1.64 (brs, H-24), 0.90 (s, H-25), 0.81 (s, H-26), 0.68

(s, H-27), 0.84(s, H-28), 0.97(s, H-29), 1.01(s, H-30), 7.08(d, $J = 9.0\text{ Hz}$, H-3'), 6.87(d, $J = 9.0\text{ Hz}$, H-4'), 4.04(d, $J = 5.4\text{ Hz}$, —OH); ^{13}C NMR(CDCl_3) δ : 136.6(C-1), 118.9(C-2), 22.5(C-3), 31.0(C-4), 32.2(C-5), 49.4(C-6), 23.4(C-7), 37.5(C-8), 40.8(C-9), 70.8(C-10), 27.2(C-11), 37.8(C-12), 36.5(C-13), 49.4(C-14), 17.2(C-15), 41.2(C-16), 36.8(C-17), 61.2(C-18), 17.8(C-19), 37.2(C-20), 46.6(C-21), 63.7(C-22), 25.5(C-23), 23.0(C-24), 27.5(C-25), 27.4(C-26), 17.3(C-27), 16.4(C-28), 16.9(C-29), 20.5(C-30), 134.8(C-1'), 144.7(C-2'), 118.5(C-3'), 118.8(C-4'), 145.1(C-5'), 144.1(C-6'); ES-IMS m/z 346.4 $[\text{C}_{36}\text{H}_{54}\text{O}_9\text{S}_2 - 2\text{H}^+]^{2-}$ (100); HRESIMS m/z 693.3111 $[\text{C}_{36}\text{H}_{54}\text{O}_9\text{S}_2 - \text{H}^+]^-$ (calcd 693.3136)。

【来源】 海绵 *Adocia* sp.

【分析方法】 海绵的甲醇提取物经 Sephadex LH-20 柱, 纯甲醇洗脱, 得到的第一部分经 C18 MPLC 及半制备 HPLC, 甲醇/水 (含 0.2mol/L NaCl) 梯度洗脱得到化合物 Adociasulfate 1。

【生物活性与毒性】 采用来源于鸡骨的膜囊泡进行试验显示, 该化合物能降低质子泵活性, IC_{50} 值为 3.6 $\mu\text{mol/L}$ 。

【参考文献】 1. Kalaitzis J A, Leone P de A, Harris L, et al. *J Org Chem*, 1999, 64: 5571

2. Blackburn C L, et al. *J Org Chem*, 1999, 64: 5565

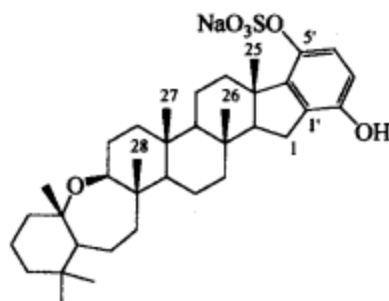
3. Kalaitzis J A. *J Nat Prod*, 1999, 62: 1682

4. Bogenstuter M. *J Am Chem Soc*, 1999, 121: 12206

5. Blackburn C L. *Tetrahedron*, 2000, 56: 8249

A0006 Adociasulfate 6

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{36}\text{H}_{53}\text{NaO}_6\text{S}$

【相对分子质量】 m/z 636

【理化常数及谱学数据】 无色不定形粉末; $[\alpha]_D^{25} - 12.3$ (c 0.76, MeOH); UV(OH) λ_{max} : 276nm; IR (KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3420, 2930, 1210, 1050; ^1H NMR(CD_3OD) δ : 7.13(d, 1 H, $J = 8.7\text{ Hz}$, H-4'), 6.45(d, 1 H, $J = 8.7\text{ Hz}$, H-3'), 3.55(dd, 1 H, $J = 10.7, 4.2\text{ Hz}$, H-14), 2.56(dd, 1 H, $J = 12.8, 7.8\text{ Hz}$, H-1), 2.44(t, 1 H, $J = 12.3\text{ Hz}$, H-1), 1.78(m, 1 H, H-16), 1.76(m, 2 H, H-4), 1.73(m, 1 H, H-12), 1.72(m, 1 H, H-16), 1.71(m, 1 H, H-8), 1.69(m, 1 H, H-9), 1.68(m, 1 H, H-2), 1.66(m, 1 H, H-12), 1.65(m, 1 H, H-8), 1.65(m, 1 H, H-13), 1.63(m, 1 H, H-9), 1.58(m, 2 H, H-5), 1.57(m, 2 H, H-21), 1.48(m, 1 H, H-17), 1.48(m, 1 H, H-18), 1.45(m, 2 H, H-20), 1.42(m, 1 H, H-17), 1.36(m, 1 H, H-22), 1.32(m, 1 H, H-13), 1.30(m, 1 H, H-22), 1.14(s, 3 H, H-29), 1.12(s, 3 H, H-25), 1.06(s, 3 H, H-26), 0.94(s, 3 H, H-30), 0.91(s, 3 H, H-27), 0.90(m, 1 H, H-6), 0.83(m, 1 H, H-10), 0.79(s, 3 H, H-24), 0.79(s, 3 H, H-28); ^{13}C NMR(CD_3OD) δ : 151.6(C-2'), 147.5(C-6'), 142.2(C-5'), 130.5(C-1'), 120.9(C-4'), 114.1(C-3'), 79.5(C-19), 75.3(C-14), 66.1(C-2), 63.2(C-6), 59.4(C-10), 55.1(C-18), 48.6(C-3), 46.7(C-16), 43.7(C-8), 42.9(C-15), 42.3(C-22), 40.3(C-12), 39.5(C-20), 38.9(C-4), 38.5(C-7), 38.4(C-11), 36.7(C-23), 33.7(C-30), 28.4(C-13), 26.6(C-1), 23.6(C-29), 22.4(C-21), 21.7(C-24), 21.5(C-25), 21.2(C-17), 19.7(C-9), 19.1(C-5), 18.1(C-26), 17.1(C-27), 15.2(C-28); HRFABMS m/z 613.3584($\text{M} - \text{Na})^-$ (calcd for $\text{C}_{36}\text{H}_{53}\text{O}_6\text{S}$ 613.3580)。

【来源】 海绵 *Haliclona* (aka *Adocia*) sp.

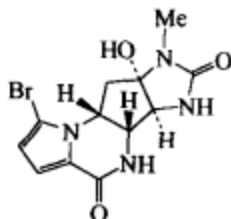
【分析方法】 海绵的甲醇提取物悬浮于水中，二氯甲烷萃取，有机层再分配于正己烷和甲醇之间。水溶性部分经 TSK HW40 胶柱层析，50% 含水 MeOH 洗脱，然后使用 C18 HPLC，H₂O/MeCN (55 : 45) 洗脱得到化合物 Adociasulfate 6。

【生物活性与毒性】 体外抑制 ATP 酶活性的 IC₅₀ 值为 6mmol/L。

【参考文献】 1. Blackburn C L, Hopmann C, Sakowicz R, et al. *J Org Chem*, 1999, 64: 5565

A0007 Agelastatin A

【结构式】



【分子式】 C₁₂H₁₃BrN₄O₃

【相对分子质量】 *m/z* 341

【理化常数及谱学数据】 无色固体; $[\alpha]_D^{25} - 59.3^\circ$ (c 0.13, MeOH); CD (MeOH) $\Delta\epsilon_{219} - 7.2$, $\Delta\epsilon_{246} + 6.6$; ¹H NMR (500MHz, CD₃OD) δ : 6.92 (1H, d, 4.2, H-15), 6.33 (1H, d, 4.2, H-14), 4.60 (1H, m, H-7), 4.09 (1H, d, 5.4, H-8), 3.89 (1H, brs, H-4), 2.81 (3H, s, N-Me), 2.65 (1H, dd, 12.9, 6.6, H-6), 2.10 (1H, dd, 12.9, 12.3, H-6); ¹³C NMR (100MHz, CD₃OD) δ : 160.6 (C-2), 157.1 (C-2), 144.6 (C-7), 132.0 (C-2), 138.7 (C-7a), 128.3 (C-7a), 126.3 (C-3a), 126.2 (C-3a), 126.1 (C-2), 125.3 (C-4), 124.7 (C-5), 123.9 (C-4), 123.0 (C-5), 116.8 (C-6), 115.2 (C-7), 113.8 (C-3), 108.2 (C-3), 108.2 (C-6), 72.1 (C-5), 56.3 (C-4), 51.1 (C-6), 19.7 (C-7); ESIMS *m/z* 532/530 (M⁺ + H, 60); (+)-FAB MS *m/z* 532/530 (M + H⁺, 4); HREIMS 529.0862 (C₂₅H₂₀BrN₇O₂ requires 529.0862)。

【来源】 海绵 *Cymbastela* sp.^[1], *Agelas dendromorpha*

【分析方法】 样品甲醇提取，hexane、CHCl₃、BuOH 萃取，CHCl₃ 部分硅胶柱层析 (CHCl₃-MeOH)，反相 C₁₈ 柱层析 (MeOH-H₂O 70 : 30)，HPLC (MeOH-H₂O 30 : 70) 得到化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 海水虾致死活性 LC₅₀ 1.7mg/kg，此外具有杀虫活性 beet army worm, *Spodoptera exigua*, and corn rootworm, *Diabrotica undecimpunctata*^[1]。

【参考文献】 1. Hong T W, et al. *J Nat Prod*, 1998, 61: 158

2. D'Ambrosio M, et al. *J Chem Soc Chem Commun*, 1993, 1305

3. Dambrosio M, et al. *Helv Chim Acta*, 1994, 77: 1895

4. Dambrosio M, et al. *Helv Chim Acta*, 1996, 79: 727

5. Hong T W. *J Nat Prod*, 1998, 61: 158

6. Anderson G T, et al. *J Org Chem*, 1998, 63: 7594

7. Stien D, et al. *J Am Chem Soc*, 1999, 121: 9574

8. Allenmark S G. *Nat Prod Rep*, 2000, 17: 145

9. Meijer L, et al. *Chem Biol*, 2000, 7: 51

10. Sosa A C B, et al. *Tetrahedron Lett*, 2000, 41: 4295

11. Feldman K S, et al. *J Am Chem Soc*, 2002, 124: 9060

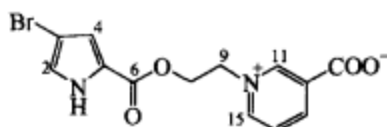
12. Feldman K S, et al. *J Org Chem*, 2002, 67: 7069

13. Hoffmann H, et al. *Synthesis*, 2003, 1753

14. Jacquot D E N, et al. *Chem Eur J*, 2004, 10: 1141

A0008 Agelongine

【结构式】



【分子式】 $C_{13}H_{11}N_2O_4Br$

【相对分子质量】 m/z 338/340

【理化常数及谱学数据】 Ionspray-MS m/z 338, 340 $[M]^+$; UV(CH₃OH) λ_{max} : 262nm; IR(KBr) ν_{max} (cm⁻¹): 1710, 1646; ¹H NMR(500MHz, CD₃OD) δ : 7.05(H, d, J = 1.5Hz, H-2), 6.89(H, d, J = 1.5Hz, H-4), 4.80(2H, t, J = 5.5Hz, H-8), 5.07(2H, t, J = 5.5Hz, H-9), 9.42(H, s, H-11), 8.99(H, dt, J = 7.5, 1.5Hz, H-13), 8.14(H, dd, J = 7.7, 6.2Hz, H-14), 9.05(H, dt, J = 6.2, 1.5Hz, H-15); ¹³C NMR(500MHz, CD₃OD) δ : 125.6(C-2), 98.2(C-3), 118.5(C-4), 123.0(C-5), 161.0(C-6), 63.6(C-8), 61.7(C-9), 147.4(C-11), 140.2(C-12), 147.0(C-13), 128.8(C-14), 146.6(C-15), 167.0(C-16).

【来源】 海绵 *Agelas longissima*

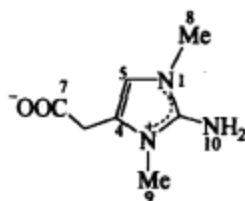
【分析方法】 海绵的甲醇提取物溶于水, 用正丁醇萃取, 正丁醇上硅胶 MPLC 层析 (甲醇-乙酸乙酯), 甲醇-乙酸乙酯 (9:1) 部分上反相 HPLC (甲醇-水 1:1) 分离得到纯品。结构通过 (HR) MS、IR、UV 和 NMR (¹H NMR、¹³C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 大鼠胃底部的抗血清素激活活性, IC_{50} = 80 μ mol/L。

【参考文献】 1. Francesco Cafieri, et al. Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters, 1995, 5 (8): 799

A0009 Aminozooanemonin

【结构式】



【分子式】 $C_7H_{12}N_3O_2$

【相对分子质量】 170

【理化常数及谱学数据】 无色无定形固体; UV(MeOH) λ_{max} (ϵ): 226(3500)nm, 262(1500); IR(KBr) ν_{max} (cm⁻¹): 3460~3000, 1780, 1640; ¹H NMR(500MHz, DMSO-d₆) δ : 8.30(2H, s, NH₂-10), 7.63(1H, s, H-5), 3.97(3H, s, H₃-9), 3.77(3H, s, H₃-8), 3.15(2H, s, H₂-6); ¹H NMR(CD₃OD) δ : 7.75(1H, s, H-5), 4.11(3H, s, H₃-9), 3.92(3H, s, H₃-8), 3.21(2H, s, H₂-6); ¹³C NMR(125MHz, CD₃OD) δ : 163.1(C-7), 154.2(C-2), 134.2(C-4), 127.0(C-5), 48.3(C-6), 33.8(C-8), 33.6(C-9); FABMS(positive ion, glycerol matrix) m/z 170 $[M+H]^+$; HRFABMS m/z 170.0886, calcd for $C_7H_{12}N_3O_2$, 170.0852^[1].

【来源】 海绵 *Agelas dispar*^[1]

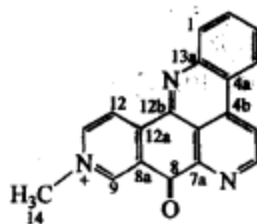
【分析方法】 样品甲醇提取, Et₂O、BuOH 萃取, BuOH 萃取部分 RP-18 柱层析 (MeOH-H₂O), HPLC (MeOH-H₂O 95:5+0.5%TFA) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 抗菌活性, 抗革兰阳性菌 MIC 2.5 μ g/mL^[1]。

【参考文献】 1. Cafieri F, et al. J Nat Prod, 1998, 61: 1171

A0010 Amphimedine

【结构式】



【分子式】 $C_{19}H_{12}N_3O^+$

【相对分子质量】 298

【理化常数及谱学数据】 黄褐色无定形粉末; UV (MeOH) λ_{max} (nm): 206 (3.92), 244 (3.93), 294 (sh, 3.52), 388 (3.51), 478 (2.59); IR (KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 2925, 1684, 1620, 1595, 1510, 1197, 1130; 1H NMR (CD_3OD) δ : 8.55 (d, 6.8, H-1), 8.13 (dt, 6.8, 7.7, H-2), 8.06 (t, 7.7, H-3), 8.97 (d, 7.7, H-4), 9.13 (d, 6.0, H-5), 9.32 (d, 6.0, H-6), 9.87 (brs, H-9), 9.28 (d, 6.0, H-11), 9.45 (d, 6.0, H-12), 4.64 (s, H-14); ^{13}C NMR (CD_3OD) δ : 136.4 (d, C-1), 139.6 (d, C-2), 136.8 (d, C-3), 127.2 (d, C-4), 122.7 (s, C-4a), 147.8 (s, C-4b), 127.6 (d, C-5), 142.8 (d, C-6), 139.7 (s, C-7a), 174.9 (s, C-8), 130.5 (s, C-8a), 148.8 (d, C-9), 151.3 (d, C-11), 128.2 (d, C-12), 150.5 (s, C-12a), 144.7 (s, C-12b), 120.9 (s, C-12c), 149.4 (s, C-13a), 51.8 (q, C-14); HREIMS m/z 298.0966 $[M]^+$ (calcd for $C_{19}H_{12}N_3O$ 298.0980)。

【来源】 海绵 *Xestospongia cf. carbonaria*

【分析方法】 海绵的甲醇提取物经硅胶柱快速柱层析分段, 氯仿/甲醇梯度洗脱, 活性部位经快速 C-18 柱层析, 以甲醇/水梯度洗脱得到化合物 Amphimedine。

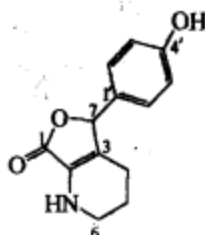
【生物活性与毒性】 抗人克隆肿瘤细胞 (HCT-116) 的 IC_{50} 值为 335 nmol/L, 能破坏中国仓鼠卵巢细胞 AA8 和 EM9 的 DNA 形成, 其 IC_{50} 值分别为 6 μ mol/L 和 25 μ mol/L。

【参考文献】 1. Deniz Tasdemir, Kathryn M Marshall, Gina C Mangalindan, et al. *J Org Chem*, 2001, 66: 3246~3248

2. Schmitz F, et al. *J Am Chem Soc*, 1983, 105: 4835
3. Echavarren A M, et al. *J Am Chem Soc*, 1988, 110: 4051
4. Kubo A, et al. *Heterocycles*, 1988, 27: 2095
5. Prager R H, et al. *Aust J Chem*, 1991, 44: 277
6. Prager R H, et al. *Heterocycles*, 1989, 29: 847
7. Bracher F, et al. *Liebigs Ann Chem*, 1996, 115
8. Nakahara S, et al. *Heterocycles*, 1996, 43: 2113
9. Guillier F, et al. *Tetrahedron Lett*, 1994, 35: 6489
10. Labarca C V, et al. *J Chem Soc. Perkin Trans 1*, 1987, 927
11. de Guzman F S, et al. *J Org Chem*, 1999, 64: 1400
12. Ozturk T. *Alkaloids* (Academic Press), 1997, 49: 79
13. Echavarren A M. *Adv Nitrogen Heterocycl*, 1996, 2: 211
14. Ding Q, et al. *J Org Chem*, 1999, 64: 7965
15. Bianco M D, et al. *Synlett*, 2000, 689
16. De la Fuente J A, et al. Synthesis and activity of a regioisomer of the marine natural product meridine. From: *Book of Abstracts, 2nd Euroconference on Marine Natural Products*, 1999. 173
17. Tasdemir D, et al. *J Org Chem*, 2001, 66: 3246
18. Thale Z, et al. *J Org Chem*, 2002, 67: 9384
19. Delfourne E, et al. *Med Res Rev*, 2003, 23: 234
20. Pascual-Alfonso E, et al. *Tetrahedron Lett*, 2003, 44: 6003

A0011 Anthosamide A

【结构式】



【分子式】 $C_{13}H_{13}NO_3$

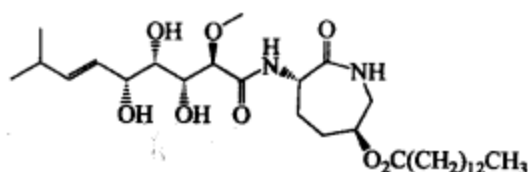
【生物活性与毒性】 1. 阻止 HIVgp-120 和 CD4 的结合 (IC_{50}): $72\mu\text{mol/L} \pm 2\mu\text{mol/L}$ 。2. 蛋白激酶 C 抑制剂 (IC_{50}): $11\mu\text{mol/L}$ 。3. 抑制白介素-8 和强制性受体以及非强制性受体的结合 (IC_{50}): $14\mu\text{mol/L}$ 和 $15\mu\text{mol/L}$ 。4. 对增生的 Vero 细胞的细胞毒 (IC_{50}): $0.7\mu\text{mol/L}$ 。

【参考文献】 1. Patil A D, et al. J Org Chem, 1995, 60 (5): 1182

2. Rao A V R, et al. J Chem Soc Chem Commun, 1995, 1369
3. Black G P, et al. Tetrahedron Lett, 1996, 33: 6943
4. Snider B B, et al. Tetrahedron Lett, 1996, 37: 6977
5. Patil A D, et al. J Org Chem, 1997, 62: 1814
6. van Soest R W M, et al. Biologie, 1996, 6: 1
7. Black G P, et al. Tetrahedron, 1998, 54: 9481
8. Snider B B, et al. Tetrahedron Lett, 1998, 39: 5697
9. Black G P, et al. Tetrahedron, 1999, 55: 6547
10. Franklin A S, et al. J Org Chem, 1999, 64: 1512
11. Snider B B, et al. J Nat Prod, 1999, 62: 1707
12. Braekman J C, et al. J Nat Prod, 2000, 63: 193
13. Heys L, et al. Chem Soc Rev, 2000, 29: 57
14. Duron S G, et al. Org Lett, 2001, 29: 57
15. Cohen F, et al. J Am Chem Soc, 2001, 123: 10782
16. Weinreb S M, et al. Acc Chem Res, 2003, 36: 59
17. Ishiwata T, et al. Org Lett, 2002, 4: 2913
18. Shimokawa J, et al. Angew Chem Int Ed Eng, 2004, 43: 1559

A0015 Bengamide A

【结构式】



【分子式】 $C_{31}H_{56}N_2O_8$

【相对分子质量】 584

【来源】 海绵 *Jaspis* sp.

【生物活性与毒性】 驱虫、抗菌及细胞毒作用^[1~4]。

【临床与实用价值】 2000 年作为蛋氨酸氨基肽酶抑制剂进入 I 期临床, 但是 2002 年中期暂时停止了实验。

【参考文献】 1. Quinoa E, et al. J Org Chem, 1986, 51: 4494

2. Adamczeski M, et al. J Org Chem, 1990, 55: 240
3. Adamczeski M, et al. J Am Chem Soc, 1989, 111: 647
4. Thale Z, et al. J Org Chem, 2001, 66: 1733
5. Kishimoto H, et al. J Org Chem, 1992, 57: 5042
6. Marshall J A, et al. Synlett, 1992, 1007
7. Marshall J A, et al. J Org Chem, 1993, 58: 6229
8. Broka C A, et al. Tetrahedron Lett, 1991, 32: 5907
9. Chida N, et al. Tetrahedron Lett, 1991, 32: 1062
10. Chida N, et al. J Chem Soc Chem Commun, 1992, 1064
11. Mukai C, et al. Tetrahedron Lett, 1994, 35: 6899
12. Chida N, et al. Heterocycles, 1994, 38: 2383
13. Mukai C, et al. J Org Chem, 1995, 60: 5910

【分子式】 $C_{26}H_{27}Br_4ClF_6N_{10}O_8$

【相对分子质量】 1076

【理化常数及谱学数据】 淡黄色油状物; $[\alpha]^{25}_D - 7^\circ$ (c 0.21, MeOH); UV(OH) λ_{max} : 277nm; IR(KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3432, 1641, 1206; 1H NMR($CDCl_3$) δ : 5.35(d, $J = 7.0$ Hz, H-1), 5.32(s, H-5), 3.05(d, $J = 3.6$ Hz, H-10), 3.97(d, $J = 12.0$ Hz, H-13), 6.93(s, H-8'), 6.91(s, H-8''), 7.37(d, $J = 7.0$ Hz, 1-OH), 7.44(s, 9-OH), 10.06(s, 2-NH), 9.10(bs, 3-NH₂), 9.85(bs, 3-NH₂), 8.77(s, 6-NH), 9.85(bs, 7-NH₂), 9.10(bs, 7-NH₂), 9.82(s, 8-NH), 8.22(t, $J = 5.4$ Hz, 2'-NH), 12.64(s, 5'-NH), 7.93(t, $J = 5.4$ Hz, 2''-NH), 12.61(s, 5''-NH); ^{13}C NMR($CDCl_3$) δ : 79.1(d, C-1), 158.9(s, C-3), 80.2(d, C-5), 157.3(s, C-7), 102.6(s, C-9), 51.7(d, C-10), 37.5(d, C-11), 48.3(d, C-12), 66.7(d, C-13), 83.3(s, C-14), 37.7(t, C-1'), 159.4(s, C-3'), 128.0(s, C-4'), 104.9(s, C-6'), 97.7(s, C-7'), 112.9(d, C-8'), 40.9(t, C-1''), 159.2(s, C-3''), 128.0(s, C-4''), 104.9(s, C-6''), 97.9(s, C-7''), 112.9(d, C-8''); negative ESIMS m/z 827 $[(M-H) - 2CF_3COOH - H_2O]^-$, 845 $[(M-H) - 2CF_3COOH]^-$, 959 $[(M-H) - CF_3COOH]^-$, 1073 $[M-H]^-$, 1187 $[M + CF_3COO]^-$; HRESIMS m/z 846.8360 ($C_{22}H_{24}^{79}Br_2^{81}Br_2ClN_{10}O_4$ requires 846.8364).

【来源】 海绵 *Axinella* sp.

【生物活性与毒性】 对细菌 *H. pylori* 的最小抑制浓度 (MIC) 为 1000 μ mol/L.

【参考文献】 1. Urban S, Leone P de A, Carroll A R, et al. J Org Chem, 1999, 64: 731

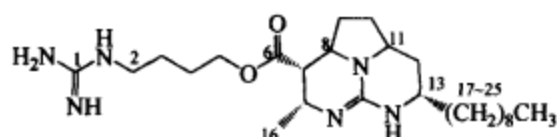
2. Bascombe K C, et al. Heterocycles, 1998, 48: 1461

3. Rou N, et al. Tetrahedron, 1999, 55: 14729

4. Seki M, et al. Eur J Org Chem, 2001, 503

A0014 Batzelladine D

【结构式】



【分子式】 $C_{25}H_{46}O_2N_6$

【相对分子质量】 462

【理化常数及谱学数据】 无色胶状物; $[\alpha] - 1.2^\circ$ (c 0.9); HRFABMS m/z 463.3740 $[M + H]^+$; IR(KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3600~3100, 3100~2800, 1698, 1683, 1649, 1632, 1344, 1218, 1199, 1088; UV(MeOH) λ_{max} : 205nm, 298nm; 1H NMR(400MHz, CD_3OD) δ : 3.21(2H, $J = 7.2$ Hz, H-2), 1.69(2H, m, H-3), 1.75(2H, m, H-4), 4.21(2H, t, $J = 6.5$ Hz, H-5), 3.12(H, dd, $J = 4$ Hz, 3.5Hz, H-7), 3.93(H, m, H-8), 1.60, 2.24(2H, m, H-9), 1.41, 2.35(2H, m, H-10), 3.55(H, m, H-11), 1.42, 2.35(2H, m, H-12), 3.54(H, m, H-13), 3.83(H, m, H-15), 1.28(3H, d, $J = 6.5$ Hz, H-16), 1.55, 1.64(2H, m, H-17), 1.29(brs, H-18~H-24), 0.89(3H, t, $J = 6.5$ Hz, H-25); ^{13}C NMR(100MHz, CD_3OD): 158.7(C-1), 42.0(C-2), 26.7(C-3), 27.1(C-4), 64.5(C-5), 167.1(C-6), 100.7(C-7), 58.3(C-8), 34.4(C-9), 27.7(C-10), 57.1(C-11), 34.4(C-12), 50.8(C-13), 147.8(C-14), 49.8(C-15), 18.4(C-16), 36.9(C-17), 26.2(C-18), 29.0(C-19~C-23), 23.7(C-24), 14.4(C-25).

【来源】 海绵 *Batzella* sp.

【分析方法】 海绵的甲醇-二氯甲烷 (1:1) 提取物分别用乙酸乙酯、二氯甲烷和甲醇溶解, 二氯甲烷部分上 Sephadex LH-20 (甲醇-二氯甲烷-正己烷 1:1:1), 各活性馏分合并后用硅胶柱分离 (甲醇-二氯甲烷-水-甲酸), 最后用 PTLC (甲醇-二氯甲烷-水-甲酸 12:88:1:1.5) 纯化得到。结构通过 (HR) MS、IR、UV 和 NMR (1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR), 化学降解等方法确定。

【相对分子质量】 231

【理化常数及谱学数据】 黄色固体; $[\alpha]_D^{20}$ (c 0.40, CH₃OH); HRFABMS m/z 232.0953[M + H]⁺; FABMS m/z 232[M + H]⁺, 214[M + H - H₂O]⁺; UV(CH₃OH) $\lambda_{\max}$ (nm): 229, 249, 283, 368; IR(KBr) $\nu_{\max}$ (cm⁻¹): 3300, 1680, 1640, 1570. ¹H NMR(DMSO-d₆) δ : 1.86, 2.16(2H, m, H-4), 1.71(2H, m, H-5), 3.06(2H, m, H-6), 5.76(H, s, H-7), 7.04(2H, d, J = 8.3 Hz, H-2', H-6'), 6.77(2H, d, J = 8.3 Hz, H-3', H-5'), 9.57(H, brs, -OH), 5.23(H, s, -NH); ¹³C NMR(DMSO-d₆) δ : 169.0(C-1), 131.1(C-2), 128.9(C-3), 20.4(C-4), 20.9(C-5), 40.7(C-6), 82.7(C-7), 126.3(C-1'), 128.6(C-2', C-4'), 115.5(C-3', C-5'), 158.0(C-4').

【来源】 海绵 *Anthosigmella aff. raromicroclera*

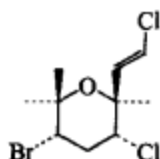
【分析方法】 海绵的甲醇提取物溶于水, 先用乙醚萃取, 再用正丁醇萃取, 正丁醇上 ODS 快速柱层析(甲醇-水), 30% 甲醇-水洗脱部分经过反复的反相 HPLC(甲醇-水-TFA; 乙腈-水-TFA) 分离得到纯品。结构通过 (HR) MS、IR、UV 和 NMR (¹H NMR、¹³C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 50 μ mol/L 剂量下能诱导海鞘 *Halocynthia roretzi* 幼虫的完全变态。

【参考文献】 1. Sachiko Tsukamoto, et al. Tetrahedron, 1995, 51 (24): 6687

A0012 Aplysiapyranoid D

【结构式】



【分子式】 C₁₀H₁₅OBrCl₂

【相对分子质量】 303

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{20}$ + 3.4° (c 1.1, CHCl₃); HRMS m/z : 288.9399 (M⁺ - Me; C₉H₁₂OBr⁺ Cl⁺ Cl/C₉H₁₂OBrCl₂⁺); ¹H NMR(500 MHz, C₆D₆, 28°C) δ : 6.20(d, J = 13.1 Hz), 3.19(dd, J = 12.7, 4.3 Hz), 3.08(dd, J = 12.7, 4.3 Hz), 2.08(ddd, J = 12.7, 12.7, 12.7 Hz), 1.99(ddd, J = 12.7, 4.3, 4.3 Hz), 1.09(s), 1.08(s), 1.03(s); ¹³C NMR(22.5 MHz, CDCl₃, 28°C) δ : 137.6(d), 119.7(d), 77.6(s), 76.6(s), 61.3(d), 53.5(d), 37.6(t), 30.4(q), 23.4(q), 21.1(q).

【来源】 海绵 *A. kurodai*

【生物活性与毒性】 抑制细胞 Vero、MDCK、B₁₆ 的生长。

【参考文献】 1. Kusumi T, et al. J Org Chem, 1987, 52: 4597

2. Jung M E, et al. J Org Chem, 1991, 56: 1347

3. Inouye Y, et al. J Chem Soc Chem Commun, 1987, 346

4. Jung M E, et al. Tetrahedron Lett, 1993, 34: 923

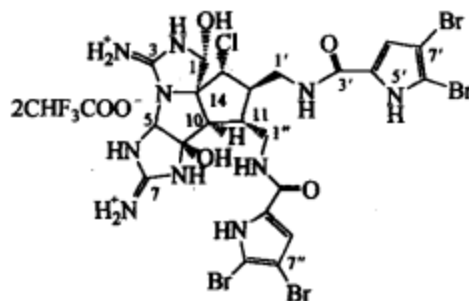
5. Jung M E, et al. J Org Chem, 1998, 63: 2982

6. Fahr B T, et al. CA131: 144441

7. Hartung J, et al. Tetrahedron Lett, 2003, 44: 6091

A0013 Axinellamine B

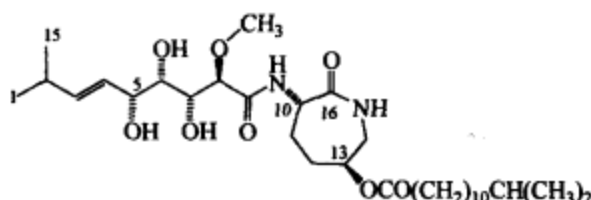
【结构式】



14. Mukai C, et al. J Chem Soc Perkin Trans 1, 1995, 2849
15. D'Auria M V, et al. J Nat Prod, 1997, 60: 814
16. Lewis J R. Nat Prod Rep, 1998, 15: 371
17. Fernandez R, et al. J Nat Prod, 1999, 62: 678
18. Groweiss A, et al. J Nat Prod, 1999, 62: 1691
19. Serra G, et al. Molecules, 2000, 5: 313
20. Kinder F R, et al. J Org Chem, 2001, 66: 2118
21. Thale Z, et al. J Org Chem, 2001, 66: 1733
22. Kinder F R, et al. Abstr Pap Am Chem Soc, 2000, 220: 263
23. Kinder F R J, et al. J Med Chem, 2001, 44: 3692
24. Banwell M G, et al. J Org Chem, 2001, 66: 6768
25. Boeckman R K, et al. Org Lett, 2002, 4: 2109
26. Boeckman R K, et al. Helv Chim Acta, 2002, 85: 4532
27. Liu W, et al. Tetrahedron Lett, 2002, 43: 1373
28. Kinder F R J, et al. Org Prep Proced Int, 2002, 34: 559

A0016 Bengamide N

【结构式】



【分子式】 $C_{31}H_{56}N_2O_8$

【相对分子质量】 584

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{20} + 20.7^\circ$ (c 38.0, MeOH); 1H NMR ($CDCl_3$) δ : 7.99 (1H, d, $J = 5.5$ Hz, N-Ha), 6.00 (1H, bs, N-Hb), 5.80 (1H, dd, $J = 6.5, 15.5$ Hz, H-3), 5.47 (1H, dd, $J = 6.5, 15.5$ Hz, H-4), 4.66 (1H, m, H-10), 4.60 (1H, m, H-13), 4.24 (1H, t, $J = 6.5$ Hz, H-5), 3.84 (1H, bd, $J = 6.5$, H-7*), 3.80 (1H, d, $J = 6.5$, H-8*), 3.61 (1H, bd, $J = 6.5$ Hz, H-6), 3.56 (3H, s, OMe), 3.38 (1H, m, H-14), 3.32 (1H, m, H-14'), 2.31 (2H, m, H-2, H-18), 2.19 (2H, m, H-12, H-11), 1.97 (1H, m, H-12'), 1.75 (1H, m, H-11'), 1.61 (2H, m, H-19), 1.52 (1H, m, H-28), 1.27 (14H, H-20~H-26), 1.15 (2H, m, H-27), 1.01 (6H, dd, $J = 2.5, 6.5$ Hz, H-1, H-15), 0.87 (6H, d, $J = 7.5$ Hz, H-29, H-30); ^{13}C NMR ($CDCl_3$) δ : 174.9 (s, C-17), 173.1 (s, C-16), 172.1 (s, C-9), 142.0 (d, C-3), 125.6 (d, C-4), 81.7 (d, C-8), 74.4 (d, C-5), 72.7 (d, C-6, C-7), 70.9 (d, C-13), 59.9 (q, OMe), 51.6 (d, C-10), 45.2 (t, C-14), 39.2 (t, C-27), 34.5 (t, C-18), 34.2 (t, C-12), 33.1 (d, C-28), 32.1 (d, C-2), 30.1 (t, C-11), 30.0~27.6 (t, C-20~C-26), 25.1 (t, C-19), 22.8 (q, C-29 and C-30), 22.4~22.3 (q, C-1, C-15); HRFABMS m/z 607.3901 $[M + Na]^+$ (100), (calcd for $C_{31}H_{56}O_8N_2Na$ 607.3934).

【来源】 海绵 *Jaspis* cf. *coriacea*

【分析方法】 海绵的 CH_3OH 提取物以 EtOAc 抽提, EtOAc 部分经硅胶柱层析, MeOH/ CH_2Cl_2 梯度洗脱, 活性部分经过 RP HPLC 纯化得到化合物 Bengamide N。

【生物活性与毒性】 体外抗 MDA-MB-435 人乳腺恶性肿瘤的 IC_{50} 值为 0.3 nmol/L。

【参考文献】 1. Zia Thale, et al. J Org Chem, 2001, 66: 1733

2. Quinoa E, et al. J Org Chem, 1986, 51: 4494

3. Adamczeski M, et al. J Org Chem, 1990, 55: 240

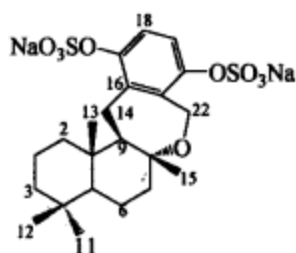
4. Adamczeski M, et al. J Am Chem Soc, 1989, 111: 647

5. Thale Z, et al. J Org Chem, 2001, 66: 1733

6. Kishimoto H, et al. *J Org Chem*, 1992, 57: 5042
7. Marshall J A, et al. *Synlett*, 1992, 1007
8. Marshall J A, et al. *J Org Chem*, 1993, 58: 6229
9. Broka C A, et al. *Tetrahedron Lett*, 1991, 32: 5907
10. Chida N, et al. *Tetrahedron Lett*, 1991, 32: 1062
11. Chida N, et al. *J Chem Soc Chem Commun*, 1992, 1064
12. Mukai C, et al. *Tetrahedron Lett*, 1994, 35: 6899
13. Chida N, et al. *Heterocycles*, 1994, 38: 2383
14. Mukai C, et al. *J Org Chem*, 1995, 60: 5910
15. Mukai C, et al. *J Chem Soc Perkin Trans 1*, 1995, 2849
16. D'Auria M V, et al. *J Nat Prod*, 1997, 60: 814
17. Lewis J R, *Nat Prod Rep*, 1998, 15: 371
18. Fernandez R, et al. *J Nat Prod*, 1999, 62: 678
19. Groweiss A, et al. *J Nat Prod*, 1999, 62: 1691
20. Serra G, et al. *Molecules*, 2000, 5: 313
21. Kinder F R, et al. *J Org Chem*, 2001, 66: 2118
22. Thale Z, et al. *J Org Chem*, 2001, 66: 1733
23. Kinder F R, et al. *Abstr Pap Am Chem Soc*, 2000, 220: 263
24. Kinder F R J, et al. *J Med Chem*, 2001, 44: 3692
25. Banwell M G, et al. *J Org Chem*, 2001, 66: 6768

A0017 Bis(sulfato)-cyclosiphonodictyol A

【结构式】



【分子式】 $C_{22}H_{30}O_9Na_2S_2$

【相对分子质量】 548

【理化常数及谱学数据】 无色无定形固体; $[\alpha] + 12.0^\circ (c 0.20, \text{MeOH})$; HRFABMS m/z 571.1116 $[M + Na]^+$; IR (KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3500 (br), 2930, 1463, 1381, 1260, 1230, 1055, 1030, 995, 928, 830; UV (MeOH) λ_{max} (nm): 266, 262, 217, 203; $^1\text{H NMR}$ (CD_3OD) δ : 0.90, 2.13 (2H, m, H-1), 1.50, 1.67 (2H, m, H-2), 1.15, 1.36 (2H, m, H-3), 0.94 (H, dd, $J = 2.1, 12.0\text{Hz}$, H-5), 1.39, 1.75 (2H, m, H-6), 1.52, 1.68 (2H, m, H-7), 1.53 (H, d, $J = 9.5\text{Hz}$, H-9), 0.86 (3H, s, H-11), 0.83 (3H, s, H-12), 0.89 (3H, s, H-13), 2.65 (H, dd, $J = 16.0, 9.5\text{Hz}$, H-14a), 3.44 (H, d, $J = 16.0\text{Hz}$, H-14b), 1.42 (3H, s, H-15), 7.31 (H, d, $J = 9.0\text{Hz}$, H-18), 7.16 (H, d, $J = 9.0\text{Hz}$, H-19), 4.84, 4.98 (2H, d, $J = 15.5\text{Hz}$, H-22); $^{13}\text{C NMR}$ (CD_3OD): 40.7 (C-1), 19.7 (C-2), 43.3 (C-3), 34.4 (C-4), 57.4 (C-5), 21.4 (C-6), 41.2 (C-7), 81.2 (C-8), 59.2 (C-9), 40.1 (C-10), 33.8 (C-11), 21.8 (C-12), 16.2 (C-13), 23.7 (C-14), 22.1 (C-15), 138.2 (C-16), 148.3 (C-17), 122.0 (C-18), 121.1 (C-19), 147.6 (C-20), 136.0 (C-21), 59.3 (C-22).

【来源】 海绵 *Siphonodictyon coralliphagum*

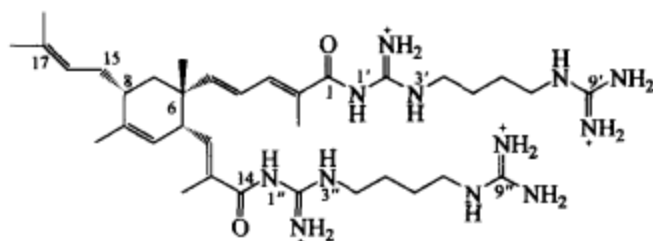
【分析方法】 海绵的乙醇提取物在正丁醇和水间分配, 正丁醇层再在水和乙酸乙酯间分配, 水层用反相 HPLC (水-甲醇 70 : 30) 处理而得到纯品。结构通过 (HR) MS、UV、IR 和 NMR ($^1\text{H NMR}$ 、 $^{13}\text{C NMR}$ 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 抑制 LTB_4 和嗜中性粒细胞的结合, IC_{50} 为 $44.5\mu\text{mol/L}$ 。

【参考文献】 1. Brian Killday K, et al. J Nat Prod, 1995, 58 (6): 958

A0018 Bistelletadine B

【结构式】



【分子式】 $C_{35}H_{64}N_{12}O_2^{4+}$

【相对分子质量】 680

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D^{21} + 3.9^\circ (c 0.10, \text{MeOH})$; UV(OH) $\lambda_{\max}$: 255nm; $^1\text{H NMR}(\text{DMSO}-d_6) \delta$: 1.10(3H, s, 6-Me), 1.47(1H, m, H-7), 1.49(4H, m, H-5' and H-5''), 1.51(4H, m, H-6' and H-6''), 1.58(3H, s, H-19), 1.65(1H, m, H-7a'), 1.66(3H, s, H-18), 1.67(3H, s, 9-Me), 1.84(3H, s, 13-Me), 1.90(3H, s, 2-Me), 2.04(1H, m, H-15), 2.14(1H, m, H-8), 2.27(1H, m, H-15), 2.94(1H, m, H-11), 3.10(4H, m, H-4' and H-4''), 3.28(4H, m, H-7' and H-7''), 5.07(1H, t, $J = 6.0\text{Hz}$, H-16), 5.22(1H, d, $J = 4.2\text{Hz}$, H-10), 6.22(1H, d, $J = 15.0\text{Hz}$, H-5), 6.33(1H, d, $J = 10.8\text{Hz}$, H-12), 6.37(1H, dd, $J = 15.0\text{Hz}, 10.8\text{Hz}$, H-4), 7.01(1H, d, $J = 10.8\text{Hz}$, H-3), 7.20(8H, brs, $2 \times 9'\text{-NH}$ and $2 \times 9''\text{-NH}$), 7.76(2H, brs, H-3' and H-3''), [8.80(3H, brs) and 9.01(1H, brs), $2'\text{-NH}$ and $2''\text{-NH}$], 9.25(1H, brs, H-8'), 9.41(1H, brs, H-8''), 10.95(1H, brs, H-1') and 11.06(1H, brs, H-1''); $^{13}\text{C NMR}(\text{DMSO}-d_6) \delta$: 12.2(q, 2-Me), 12.3(q, 13-Me), 17.8(q, C-19), 21.0(q, 9-Me), 23.8(q, 6-Me), 24.9(2C, t, C-6 and C-6''), 25.6(q, C-18), 25.6(2C, t, C-5' and C-5''), 30.1(t, C-15), 34.2(t, C-2), 36.1(d, C-8), 38.7(s, C-6), 40.2(2C, t, C-4' and C-4''), 40.5(2C, t, C-7' and C-7''), 44.6(d, C-11), 121.4(d, C-10), 121.7(d, C-16), 122.3(d, C-4), 126.8(s, C-2), 128.1(s, C-13), 132.3(s, C-17), 136.8(s, C-9), 138.7(d, C-3), 142.0(d, C-12), 153.5(d, C-5), 153.5(2C, s, C-9' and C-9''), 156.8(2C, s, C-2' and C-2''), and 169.4(2C, s, C-1 and C-14); FABMS m/z 681 ($M + H$) $^+$; HRFABMS m/z 681.5076(calcd for $C_{35}H_{61}N_{12}O_2$).

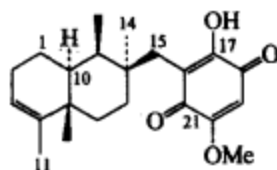
【来源】 海绵 *Stelletta* sp.

【生物活性与毒性】 中等抑制钙离子依赖型磷酸二酯酶, 100 $\mu\text{mol/L}$ 时抑制率为 40%。浓度为 10 $\mu\text{g/disk}$ 时能抑制酵母和细菌 *Escherichia coli* 生长。

【参考文献】 1. Tsukamoto S, Yamashita T, Matsunaga S, et al. J Org Chem, 1999, 64: 3794

A0019 Bolinaquinone

【结构式】



【分子式】 $C_{22}H_{30}O_4$

【相对分子质量】 358

【理化常数及谱学数据】 黄色玻璃状物; $[\alpha]_D^{25} - 106^\circ (c 0.4, \text{CHCl}_3)$; UV(MeOH) $\lambda_{\max}(\lg \epsilon)$: 288nm (3.70), 424nm (2.16); UV(MeOH) upon addition of base $\lambda_{\max}(\lg \epsilon)$: 290nm (3.67), 518nm (2.70); IR (neat) $\nu_{\max}(\text{cm}^{-1})$: 3343, 2964, 2934, 2858, 1645, 1608, 1380, 1351, 1241, 1225, 1208, 1039, 840, 799; $^1\text{H NMR}(500\text{MHz}, \text{C}_6\text{D}_6) \delta$: 7.46(1H, s, OH-17), 5.29(1H, s, H-19), 5.18(3H, s, H-3), 2.85(3H, s, H-22),

2.68(1H, d, 12.5, H-15), 2.44(1H, d, 12.5, H-15), 2.01(1H, m, H-2), 1.94(1H, dd, 12, 2.5, H-10), 1.87(1H, td, 14.5, 3.5, H-7), 1.72(1H, qd, 12.5, 7, H-1), 1.55(3H, s, H-11), 1.43(1H, m, H-9), 1.39(1H, dt, 13.5, 2, H-6), 1.26(1H, td, 13.5, 3, H-6), 1.12(1H, dd, 12.5, 6, H-1), 1.04(1H, m, H-7), 1.02(3H, s, H-13), 0.98(3H, d, 10.5, H-14), 0.97(3H, s, H-12); ^{13}C NMR (125MHz, C_6D_6) δ : 24.9(C-1), 27.1(C-2), 121.0(C-3), 143.5(C-4), 38.1(C-5), 32.4(C-6), 29.2(C-7), 39.7(C-8), 45.3(C-9), 41.1(C-10), 17.9(C-11), 19.9(C-12), 24.1(C-13), 12.5(C-14), 34.2(C-15), 117.7(C-16), 152.9(C-17), 182.7(C-18), 102.1(C-19), 161.5(C-20), 181.7(C-21), 53.6(C-22); HREIMS m/z 358.2138, $\text{C}_{22}\text{H}_{30}\text{O}_4$ requires 358.2144^[1].

【来源】 海绵 *Dysidea*^[1]

【分析方法】 样品甲醇-氯仿提取; Sephadex LH-20 柱层析 (MeOH- CHCl_3 -TFA 1:1:0.1) 得到纯化化合物^[1]。

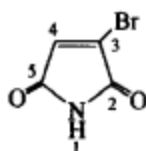
【生物活性与毒性】 细胞毒活性, 抗人结肠癌细胞 HCT116, IC_{50} 值 1.9 $\mu\text{g}/\text{mL}$, 在 80 $\mu\text{g}/\text{disk}$ 剂量下对 *Bacillus subtilis* 有中等强度的抗菌活性^[1]。

【参考文献】 1. De Guzman F S, et al. J Org Chem, 1998, 63: 8042

2. Fraga B M, et al. Nat Prod Rep, 1999, 16: 711

A0020 3-Bromomaleimide

【结构式】



【化学名】 3-bromo-4-methylenecyclopentanone

【分子式】 $\text{C}_4\text{H}_4\text{BrNO}_2$

【相对分子质量】 177

【理化常数及谱学数据】 UV(MeOH) λ_{max} (nm): 201.5(3.8), 229.5(3.7), 245.5(3.5, sh); IR(KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 1780, 1760, 1720; ^1H NMR ($\text{DMSO}-d_6$) δ : 7.29(1H, s, H-4), 11.27(1H, brs, NH); ^{13}C NMR ($\text{DMSO}-d_6$) δ : 131.1(C-3), 133.5(C-4), 167.0(C-5 or C-2), 170.4(C-2 or C-5); EIMS m/z 175 $[\text{M}]^+$, 177 $[\text{M}+2]^+$ (1:1); HREIMS m/z 174.9280($\text{C}_4\text{H}_2^{79}\text{BrNO}_2$).

【来源】 海绵 *Axinella brevistyla*

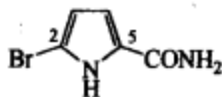
【分析方法】 海绵的甲醇提取物分别用石油醚和正丁醇抽提, 正丁醇部分经过 ODS 柱层析 MeOH/ H_2O 梯度洗脱, 其中 60% MeOH/ H_2O 洗脱部分经 Sephadex LH-20 (MeOH 洗脱) 后依次上硅胶柱和 RPHPLC 分离纯化, 得到化合物 3-Bromomaleimide。

【生物活性与毒性】 浓度小于 1.0 $\mu\text{g}/\text{disk}$ 即能抑制酵母菌 *S. cerevisiae* 的 *erg6* 突变异种生长。

【参考文献】 1. Tsukamoto S, et al. J Nat Prod, 2001, 64: 1576

A0021 5-Bromo-1H-pyrrole-2-carboxylic acid amide

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_5\text{H}_5\text{BrN}_2\text{O}$

【相对分子质量】 189

【理化常数及谱学数据】 针状晶体; mp 137~139 $^{\circ}\text{C}$; UV(MeOH) λ_{max} (nm) ($\lg \epsilon$): 213(3.47), 268(3.93); IR(KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3241, 3177, 1662, 1632, 1589, 1440; ^1H NMR (400MHz, CDCl_3) δ : 5.63(2H, brs, CONH_2), 6.20(1H, d, 3.8, H-4), 6.53(1H, 3.8, H-3), 9.76(1H, brs, NH); ^{13}C NMR (100MHz,

CDCl_3 δ : 104.4 (C-5), 111.9 (C-3), 112.2 (C-4), 126.2 (C-2), 161.6 (CONH₂); LREIMS m/z 190, 188, 173, 171, 146, 144; HREIMS m/z 187.9577 (M^+ , calcd for $C_5H_5N_2O^{79}\text{Br}$, 187.9584)^[1]。

【来源】 海绵 *Agelas nakamurai*^[1]

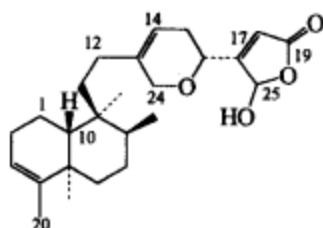
【分析方法】 样品甲醇提取, CH_2Cl_2 、BuOH 萃取, BuOH 部分反复硅胶柱层析 ($\text{MeOH}-\text{CH}_2\text{Cl}_2$), HPLC ($\text{MeOH}-\text{H}_2\text{O}$ 2:3) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 抗革兰阳性菌和真菌活性 IC_{50} ($\mu\text{g/mL}$): *S. epidermidis* 13889 3.13; *E. faecalis* 12964 6.25; *E. faecium* 12367 3.13; *S. aureus* 12732 0.78; MRSAa. 3.13; *C. albicans* IFO-1269 6.25; *C. neoformans* TIMM-0354 3.13^[1]。

【参考文献】 1. Lwagawa T, et al. J Nat Prod, 1998, 61: 1310

A0022 Cacospongionolide E

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{25}\text{H}_{36}\text{O}_4$

【相对分子质量】 400

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D^{25} - 85.4^\circ$ (c 0.2, CHCl_3); UV (MeOH) λ_{max} ($\lg \epsilon$): 223 (3.64) nm; IR (CHCl_3) ν_{max} (cm^{-1}): 3380 (br), 1785, 1760; ^1H NMR (500MHz, CDCl_3) δ : 6.16 (1H, brs, H-25), 6.06 (1H, brs, H-18), 5.56 (1H, brs, H-14), 5.33 (1H, m, H-3), 4.40 (1H, brs, H-16), 4.20 (1H, d, 15.5, H-24), 2.26 (2H, m, H-15), 1.98 (2H, m, H-2), 1.95 (1H, m, H-12), 1.85 (1H, m, H-11), 1.84 (1H, m, H-12), 1.63 (3H, s, H-20), 1.58 (1H, m, H-6), 1.55 (1H, m, H-8), 1.48 (1H, m, H-7), 1.40 (1H, m, H-6), 1.40 (1H, m, H-10), 1.32 (1H, m, H-7), 1.20 (1H, m, H-11), 1.13 (3H, s, H-21), 1.05 (1H, m, H-1), 1.00 (3H, s, H-23), 0.90 (1H, m, H-1), 0.80 (3H, d, 7.0, H-22); ^{13}C NMR (125MHz, CDCl_3) δ : 20.0 (C-1), 25.8 (C-2), 122.4 (C-3), 142.0 (C-4), 38.6 (C-5), 32.2 (C-6), 27.2 (C-7), 37.4 (C-8), 38.7 (C-9), 44.6 (C-10), 35.8 (C-11), 26.7 (C-12), 138.4 (C-13), 116.5 (C-14), 29.4 (C-15), 69.5 (C-16), 167.3 (C-17), 117.8 (C-18), 170.9 (C-19), 19.3 (C-20), 27.7 (C-21), 15.4 (C-22), 26.2 (C-23), 68.5 (C-24), 97.3 (C-25); EIMS (70eV) m/z 400 [M]⁺ (8), 382 [$M - \text{H}_2\text{O}$]⁺ (12), 367 (4), 208 (22), 205 (12), 195 (25), 192 (70), 191 (90), 190 (20), 189 (100), 177 (15); HREIMS m/z 400.2638 (calcd for $\text{C}_{25}\text{H}_{36}\text{O}_4$, 400.2635)^[1]。

【来源】 海绵 *Fasciospongia cavernosa*^[1]

【分析方法】 样品丙酮提取, Et_2O 、BuOH 萃取, Et_2O 萃取部分硅胶柱层析 ($\text{P. ether}-\text{Et}_2\text{O}$), HPLC (MeCN) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 细胞毒活性, LC_{50} 1.29 $\mu\text{g/mL}$ *Artemia salina*, 中等强度鱼致死性 LC_{50} 1.01 $\mu\text{g/mL}$ ^[1]。

【参考文献】 1. de Rosa S, et al. J Nat Prod, 1998, 61: 931

2. de Rosa S, et al. J Org Chem, 1988, 53: 5020

3. Puliti R, et al. Acta Crystallogr Sect C, 1990, 46: 1533

4. de Rosa S, et al. Tetrahedron, 1995, 51: 10731

5. de Rosa S, et al. J Nat Prod, 1995, 58: 1776

6. Hanson J R. Nat Prod Rep, 1996, 13: 529

7. Soriente A, et al. Tetrahedron Lett, 1996, 37: 8007

8. de Rosa S, et al. Nat Prod Lett, 1997, 10: 267

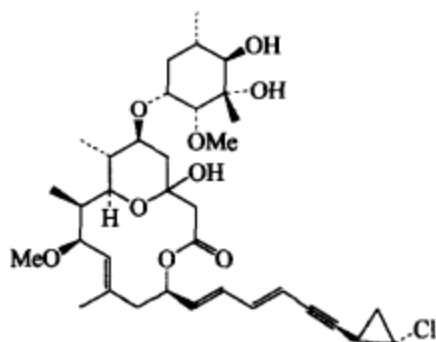
9. Pastor P G, et al. Br J Pharmacol, 1999, 126: 301

10. Soriente A, et al. Curr Med Chem, 1999, 6: 415

11. de Rosa S, et al. *J Nat Prod*, 1999, 62: 1316
12. de Rosa S, et al. *Tetrahedron*, 1999, 55: 13805
13. Soriente A, et al. *Eur J Org Chem*, 2000, 947
14. de Rosa M, et al. *Tetrahedron*, 2000, 56: 2095
15. Cheung A K, et al. *J Am Chem Soc*, 2002, 124: 11584
16. Demeke D, et al. *Org Lett*, 2003, 5: 991
17. Posadas I, et al. *Br J Pharmacol*, 2003, 138: 1571

A0023 Callipeltoside C

【结构式】



【分子式】 $C_{35}H_{51}ClO_9$

【相对分子质量】 650

【理化常数及谱学数据】 1H NMR (500MHz, $CDCl_3$) δ : 6.48 (1H, dd, 15.0, 10.6, H-16), 6.27 (1H, dd, 14.8, 10.6, H-15), 5.82 (1H, m, H-13), 5.77 (1H, dd, 14.8, 6.6, H-14), 5.58 (1H, dd, 15.0, 1.7, H-17), 5.30 (1H, dd, 9.4, H-10), 4.99 (1H, d, 1.3, OH-3), 4.94 (1H, brs, H-1'), 3.81 (1H, dd, 9.4, 2.0, H-9), 3.70 (1H, dt, 10.2, 4.4, H-5), 3.65 (1H, dd, 10.5, 2.0, H-7), 3.65 (1H, dq, H-5'), 3.52 (1H, d, 1.2, OH-3'), 3.47 (3H, s, CH_3O), 3.36 (1H, dd, 10.3, 1.2, H-4'), 3.23 (3H, s, CH_3O), 3.18 (1H, m, H-22), 3.12 (1H, brs, H-2'), 2.88 (1H, s, OH-4'), 2.53 (1H, d, 12.8, H-2a), 2.43 (1H, d, 12.8, H-2b), 2.30 (1H, dd, H-12a), 2.29 (1H, m, H-8), 2.25 (1H, dd, 11.2, 4.4, H-4a), 2.09 (1H, dd, H-12b), 1.80 (1H, m, H-20), 1.74 (3H, s, H-23), 1.50 (1H, m, H-6), 1.35 (1H, dt, 11.2, 1.3, H-4b), 1.31 (3H, s, H-7'), 1.29 (2H, m, H-21), 1.25 (3H, d, 6.5, H-6'), 0.98 (3H, d, 6.9, H-24), 0.93 (3H, d, 6.4, H-25); ^{13}C NMR (125MHz, $CDCl_3$) δ : 46.0 (C-2), 43.8 (C-4), 79.0 (C-5), 39.8 (C-6), 74.8 (C-7), 38.1 (C-8), 79.5 (C-9), 128.0 (C-10), 46.7 (C-12), 71.4 (C-13), 132.5 (C-14), 130.6 (C-15), 140.0 (C-16), 112.1 (C-17), 34.0 (C-20), 19.0 (C-21), 55.4 (C-22), 15.7 (C-23), 6.1 (C-24), 12.0 (C-25), 55.2 (CH_3O), 98.9 (C-1'), 84.7 (C-2'), 76.7 (C-4'), 66.7 (C-5'), 17.5 (C-6'), 17.4 (C-7'), 62.0 (CH_3OH); EIMS m/z 675.30~677.30 [$M+Na$] $^{+1}$.

【来源】 海绵 *Callipelta* sp.^[1]

【分析方法】 样品 hexane、 CH_2Cl_2 、 CH_2Cl_2 -MeOH 提取, CH_2Cl_2 部分硅胶柱层析 ($CHCl_3$ -MeOH 99:1), HPLC (MeOH- H_2O 8:2) 得纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 具有中等强度细胞毒样活性, 抗人 NSCLC-N6 (人类支气管肺的非小细胞肺癌) 细胞的 IC_{50} 值为 $30.0\mu g/mL$ ^[1]。

【参考文献】 1. Zampella A, et al. *Tetrahedron*, 1997, 53: 3243

2. Zampella A, et al. *J Am Chem Soc*, 1996, 118: 11085

3. Minale L, et al. *Gazz Chim Ital*, 1997, 127: 771

4. Bewley C A, et al. *Angew Chem Int Ed Eng*, 1998, 37: 2162

5. Smith G R, et al. *Carbohydr Res*, 1998, 308: 223

6. Velazquez F, et al. *Org Lett*, 2000, 2: 1931

7. Paterson I, et al. *Angew Chem Int Ed Eng*, 2001, 40: 603

8. Olivo H F, et al. Org Lett, 2000, 2: 4055
9. Pihko A J, et al. Tetrahedron: Asymmetry, 2001, 12: 937
10. Evans D A, et al. Org Lett, 2001, 3: 503
11. Trost B M, et al. J Am Chem Soc, 2001, 123: 9449

A0024 Callyspongin A

【结构式】



【分子式】 C₂₃H₂₂Na₂O₈S₂

【相对分子质量】 536

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D^{25} - 40.3^\circ$ (c 1.08, H₂O); UV(H₂O) $\lambda_{\max}(\epsilon)$ (nm): 207(25 100), 214(26 800), 253(7400), 267(8900), 287(7100); IR(film) $\nu_{\max}(\text{cm}^{-1})$: 2260, 1640, 1220; ¹H NMR(500MHz, CD₃OD-D₂O/1:1) δ : 6.14(1H, dt, 11.0, 7.3, H-15), 6.04(1H, dt, 11.0, 7.8, H-20), 5.48(1H, brd, 11.0, H-21), 5.20(1H, t, 5.5, H-20), 5.20(1H, d, 11.0, H-14), 4.14(2H, d, 5.5, H-1), 3.46(1H, brs, H-23), 2.45(2H, t, 6.9, H-9), 2.44(2H, t, 6.9, H-7), 2.32(2H, m, H-19), 2.31(2H, m, H-16), 1.75(2H, q, 6.9, H-8), 1.44(2H, m, H-17), 1.44(2H, m, H-18); ¹³C NMR(125MHz, CD₃OD-D₂O/1:1) δ : 70.2(C-1), 68.6(C-2), 72.0(C-3), 73.3(C-4), 66.3(C-5), 83.2(C-6), 19.5(C-7), 28.3(C-8), 19.8(C-9), 85.3(C-10), 67.3(C-11), 79.4(C-12), 74.2(C-13), 109.6(C-14), 150.0(C-15), 31.7(C-16), 29.5(C-17), 29.4(C-18), 31.3(C-19), 147.6(C-20), 109.8(C-21), 82.3(C-22), 83.8(C-23), (-)-FABMS m/z 513[M-Na]⁻, 97[HSO₄]⁻; (-)-HRFABMS m/z 513.0659[M-Na]⁻, calcd for C₂₃H₂₂O₈S₂Na, $\Delta + 0.5\text{mmu}^{[1]}$.

【来源】 海绵 *Callyspongia truncata*^[1]

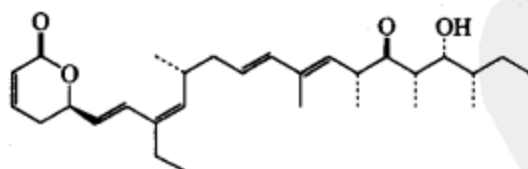
【分析方法】 样品 MeOH 提取, EtOAc、BuOH 萃取, BuOH 萃取部分 Toyopearl HW40 凝胶过滤柱层析 (H₂O) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 抑制海星卵的发育活性, MIC 6.3 $\mu\text{mol/L}^{[1]}$ 。

【参考文献】 1. Uno M, et al. J Nat Prod, 1996, 59: 1146

A0025 Callystatin A

【结构式】



【分子式】 C₂₉H₄₄O₄

【相对分子质量】 456

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} - 107^\circ$ (c 0.1, MeOH); UV(MeOH) $\lambda_{\max}$: 243nm(ϵ 30900), 300nm(ϵ 1300); IR(KBr) $\nu_{\max}$: 1730 cm^{-1} , 1709 cm^{-1} ; ¹H NMR(500MHz, CDCl₃) δ : 6.90(1H, dt, 9.6, 4.2, H-3), 6.63(1H, d, 16.0, H-7), 6.06(1H, dd, 9.6, 1.7, H-2), 6.01(1H, d, 15.4, H-13), 5.76(1H, dd, 16.0, 6.8, H-6), 5.57(1H, dt, 15.4, 7.4, H-12), 5.24(1H, d, 9.6, H-9), 5.13(1H, dq, 9.8, 1.2, H-15), 4.98(1H, dt, 14.2, 6.8, H-5), 3.66(1H, dq, 9.8, 6.6, H-16), 3.57(1H, dd, 6.6, 4.3, H-19), 2.85(1H, qd, 7.1, 4.3, H-18), 2.67(1H, m, H-10), 2.47(2H, m, H-4), 2.18(2H, q, 6.9, H-23), 2.08(2H, t, 7.4, H-11), 1.82(3H, d, 1.2, H-26), 1.32(1H, m, H-20), 1.13(3H, d, 6.6, H-27), 1.11(3H, d, 7.1, H-28), 1.05(2H, m, H-21), 1.04(3H, t, 6.9, H-24), 0.96(3H, d, 7.6, H-25), 0.88(3H, d, 6.4, H-29), 0.84(3H, t, 7.3, H-22); ¹³C

NMR(125MHz, CDCl₃) δ : 164.1 (C-1), 121.7 (C-2), 144.7 (C-3), 30.1 (C-4), 78.9 (C-5), 124.7 (C-6), 129.9 (C-7), 135.3 (C-8), 137.1 (C-9), 32.1 (C-10), 40.8 (C-11), 127.7 (C-12), 135.4 (C-13), 136.2 (C-14), 128.3 (C-15); 45.6 (C-16), 216.4 (C-17), 45.7 (C-18), 74.4 (C-19), 36.7 (C-20), 25.8 (C-21), 10.9 (C-22), 26.4 (C-23), 13.4 (C-24), 20.7 (C-25), 13.0 (C-26), 16.1 (C-27), 11.2 (C-28), 14.2 (C-29); FABMS m/z : 457 [M+H]⁺ [1]。

【来源】 海绵 *Callispongia truncata* [1]

【分析方法】 样品 acetone 提取, H₂O-EtOAc 萃取, EtOAc 部分反复硅胶柱层析 (己烷-EtOAc, 己烷-Et₂O), 正相 HPLC (己烷-Et₂O-CH₂Cl₂), 反相 HPLC (MeOH-H₂O) 得纯化合物 [1]。

【生物活性与毒性】 具有细胞毒样活性, 抗 KB 细胞的 IC₅₀ 值为 0.01ng/mL [1]。

【参考文献】 1. Kobayashi M, et al. Tetrahedron Lett, 1997, 38: 2859

2. Murakami N, et al. Tetrahedron Lett, 1997, 38: 5533

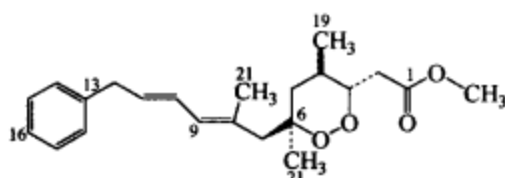
3. Kobayashi M. J Nat Toxins, 1999, 8: 249

4. Murakami N, et al. Tennen Yuki Kagobutsu Toronkai Koen Yosh, 1999, 31: 229

5. Marshall J A, et al. Org Lett, 2002, 4: 3931

A0026 Capucinoate A

【结构式】



【分子式】 C₂₂H₃₀O₄

【相对分子质量】 358

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D - 44.8^\circ$ (c 0.67, CH₂Cl₂); IR $\nu_{\max}$ (film): 3500cm⁻¹, 2155cm⁻¹; UV(CH₂Cl₂) $\lambda_{\max}$: 227nm; ¹H NMR(CDCl₃) δ : 2.62(dd, J = 15, 7, 3.5, H-2), 2.35(dd, J = 15.7, 8.8, H-2), 4.07(ddd, J = 9.5, 8.8, 3.5, H-3), 1.55(dd, J = 13.3, 4.5, H-5), 2.19(bd, J = 13.8, H-7), 2.11(d, J = 13.8, H-7), 5.79(bd, J = 10.8, H-9), 6.30(ddd, J = 15.0, 10.8, 1.4, H-10), 5.73(dt, J = 15.0, 7.1, H-11), 3.42(d, J = 7.1, H-12), 0.88(d, J = 6.6, H-19), 1.30(s, H-20), 1.77(s, H-21), 3.68(s, —OCH₃); ¹³C NMR(CDCl₃) δ : 171.0 (C-1), 36.1 (C-2), 83.4 (C-3), 30.6 (C-4), 41.9 (C-5), 82.2 (C-6), 50.9 (C-7), 132.6 (C-8), 129.2 (C-9), 127.6 (C-10), 131.5 (C-11), 39.3 (C-12), 140.5 (C-13), 128.5 (C-14, 18), 128.4 (C-15, 17), 126.0 (C-16), 17.1 (C-19), 21.1 (C-20), 18.6 (C-21), 51.9 (—OCH₃); HRFABMS [M-2H+H]⁺ m/z 357.20652(calcd for C₂₂H₂₉O₄, 357.20667)。

【来源】 海绵 *Plakinastrella onkodes*

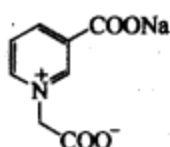
【分析方法】 海绵的 MeOH 提取物由 EtOAc/H₂O 分配, 取 EtOAc 层经 Sephadex LH-20 处理, MeOH 洗脱得到活性部位, 最后经过 C18-HPLC (Whatman Magnum-9 Partisil 10 ODS-3 column) 分离纯化得到化合物 Capucinoate A。

【生物活性与毒性】 对 B16F1 显示体外细胞毒活性, 其 IC₅₀ 值为 12 μ g/mL。

【参考文献】 1. David E, et al. J Nat Prod, 2001, 64: 281

A0027 1-Carboxymethylnicotinic acid

【结构式】



【分子式】 $C_8H_6NNaO_4$

【相对分子质量】 203

【理化常数及谱学数据】 无色固体; UV(H_2O) $\lambda_{max}(\epsilon)$: 267(5000) nm; 1H NMR(500MHz, D_2O) δ : 9.00(1H, brs, H-6), 8.80(1H, d, 8.1, H-4), 8.72(1H, d, 5.8, H-2), 8.02(1H, dd, 5.8, 8.1, H-5), 5.18(2H, s, H-7); ^{13}C NMR(125MHz, D_2O) δ : 146.8(C-2), 137.6(C-3), 147.0(C-4), 128.3(C-5), 146.0(C-6), 64.2(C-7), 171.5(C-8), 168.5(C-9); FABMS(positive, magic bullet matrix) m/z 204($M+H$)⁺ and 182($M-Na+H$)⁺[1]。

【来源】 海绵 *Anthosigmella* cf. *raromicrosciera*[1]

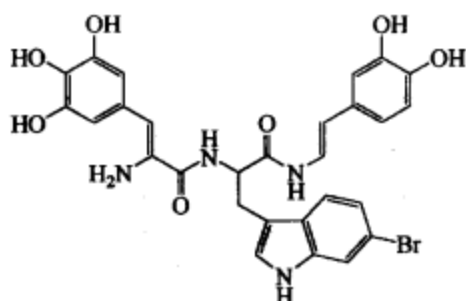
【分析方法】 样品乙醇提取, Et_2O 、BuOH 萃取, 水层萃取部分 Sephadex G-10 (H_2O), ODS 柱层析(H_2O), HPLC (MeCN-MeOH-100mmol/L NH_4OH 70:5:25) 得到纯化合物[1]。

【生物活性与毒性】 半光氨酸蛋白酶抑制剂, 抑制木瓜蛋白酶 IC_{50} 值 80mg/mL[1]。

【参考文献】 1. Matsunaga S, et al. J Nat Prod, 1998, 61: 671

A0028 Celenamide E

【结构式】



【分子式】 $C_{28}H_{25}BrN_4O_7$

【相对分子质量】 609

【理化常数及谱学数据】 黄色无定形固体; mp 212~218°C; $[\alpha]_D^{25} - 25.2^\circ$ (c 0.25, MeOH); UV(MeOH) $\lambda_{max}(\lg \epsilon)$ (nm): 226(4.50), 296(4.17), 340(4.30); IR(KBr) $\nu_{max}(cm^{-1})$: 3256, 2911, 2861, 2479, 1697, 1640, 1624, 1519, 1446, 1045, 953, 824; 1H NMR(500MHz, $Me_2CO-d_6/CD_3OD = 9:1$) δ : 7.75(1H, d, 8.0, H-4), 7.50(1H, d, 2.0, H-7), 7.35(1H, s, H-2), 7.25(1H, d, 14.0, H- α'), 7.08(1H, s, H- β'), 7.04(1H, dd, 8.0, 2.0, H-5), 6.85(1H, d, 2.0, H-2'), 6.70(1H, d, 8.0, H-5'), 6.67(2H, s, H-2'', 6''), 6.65(1H, dd, 8.0, 2.0, H-6'), 6.25(1H, d, 14.0, H- β'), 4.47(1H, dd, 10.1, 4.2, H- α), 3.68(1H, dd, 15.1, 4.2, H- β), 3.22(1H, dd, 15.1, 10.1, H- β); ^{13}C NMR(125MHz, $Me_2CO-d_6/CD_3OD = 9:1$) δ : 54.0(C- α), 27.1(C- β), 126.7(C-2), 107.1(C-3), 137.7(C-4a), 120.5(C-4), 122.5(C-5), 126.4(C-6), 114.7(C-7), 115.1(C-7a), 121.2(C- α'), 115.3(C- β'), 129.0(C-1'), 112.7(C-2'), 145.2(C-3'), 144.4(C-4'), 116.2(C-5'), 118.6(C-6'), 124.7(C- α''), 132.7(C- β''), 125.1(C-1''), 110.1(C-2''), 145.6(C-3''), 135.2(C-4''), 145.6(C-5''), 110.1(C-6''), 168.9(CO), 163.9(CO); HRFABMS($M+H$)⁺ 609.1001 (calcd for $C_{28}H_{26}N_4O_7Br$ 609.0985; $\Delta - 1.6mDa$)[1]。

【来源】 海绵 *Cliona chilensis*[1]

【分析方法】 样品乙醇提取, 己烷-含 10% 水的甲醇萃取, 含水甲醇部分 RP-18 柱层析 (MeOH- H_2O), Sephadex LH-20 柱层析 (MeOH) 得到纯化合物[1]。

【生物活性与毒性】 抗菌活性, 在 50 μ g/disk, 抗革兰阳性菌 *Staphylococcus aureus*, *Micrococcus luteus*, *Bacillus subtilis*, *Enterococcus faecalis*[1]。

【参考文献】 1. Palermo J A, et al. J Nat Prod, 1998, 61: 488

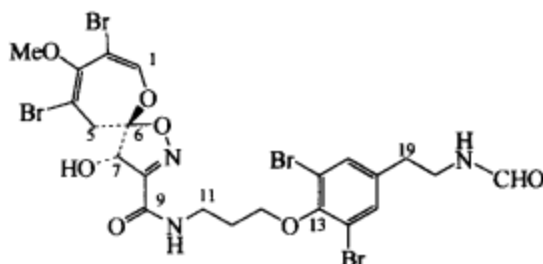
2. Stonard R J. Diss Abstr Int B, 1982, 42: 4800

3. Stonard R J, et al. Can J Chem, 1980, 58: 2121

4. Stonard R J, et al. J Org Chem, 1980, 45: 3687

A0029 Ceratinamide A

【结构式】

【分子式】 $C_{22}H_{23}Br_4N_3O_7$

【相对分子质量】 761

【理化常数及谱学数据】 无色固体; $[\alpha]_D^{24} - 89.7^\circ$ (c 0.146, MeOH); UV(EtOH) λ_{max} (nm) (ϵ): 207 (642000), 218(sh 28900), 255(sh 11000); IR(neat) ν_{max} (cm^{-1}): 3300, 2930, 1660, 1530, 1450, 1380, 1260, 1110, 760; 1H NMR(500MHz, MeOH- d_4) δ : 7.80(1H, s, H-21), 7.48(2H, s, H-15, 17), 7.14(1H, s, H-1), 4.99(1H, s, H-7), 4.07(2H, t, 6.0, H-12), 3.65(3H, s, MeO), 3.62(2H, t, 6.8, H-10), 3.44(2H, t, 7.1, H-20), 3.39(1H, d, 16.1, H-5), 3.07(1H, d, 16.1, H-5), 2.77(2H, t, 7.1, H-19), 2.13(2H, tt, 6.0; 6.8, H-11); ^{13}C NMR(125MHz, MeOH- d_4) δ : 146.8(C-1), 104.4(C-2), 149.9(C-3), 104.6(C-4), 38.3(C-5), 120.9(C-6), 80.4(C-7), 158.8(C-8), 160.7(C-9), 38.0(C-10), 30.6(C-11), 72.1(C-12), 152.9(C-13), 119.0(C-14), 134.3(C-15), 139.7(C-16), 134.3(C-17), 119.0(C-18), 35.0(C-19), 40.0(C-20), 163.8(C-21), 119.0(MeO); FABMS(positive, glycerol matrix) m/z 758/760/762/764/766($M+H$) $^+$ and 780/782/784/786/788($M+Na$) $^+$; HRFABMS(positive, glycerol matrix) m/z 783.8152(calcd for $C_{22}H_{23}^{79}Br_2^{81}Br_2N_3O_7Na$, $\Delta + 2.6$ mmu) $^{[1]}$.

【来源】 海绵 *Pseudoceratina purpurea* $^{[1]}$

【分析方法】 样品用 MeOH 提取, 硅胶柱层析 ($CHCl_3$ -MeOH), Toyopearl HW-40 凝胶过滤柱层析 (MeOH- CH_2Cl_2), 反相 HPLC (CH_3CN - H_2O -TFA) 得到纯化合物 $^{[1]}$.

【生物活性与毒性】 抗污浊, barnacle *Balanus amphitrite* ED_{50} 0.10 $\mu g/mL$ $^{[1]}$.

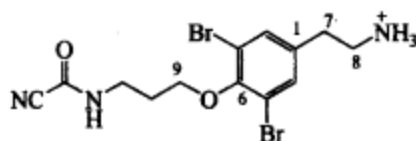
【参考文献】 1. Tsukamoto S, et al. Tetrahedron, 1996, 52: 8181

2. Schoenfeld R C, et al. Bioorg Med Chem Lett, 2002, 12: 823

3. Christophersen C, et al. Alkaloids (Academic Press), 2001, 57: 185

A0030 Ceratinamine

【结构式】

【分子式】 $C_{13}H_{16}Br_2N_3O_2$

【相对分子质量】 406

【理化常数及谱学数据】 无色固体; UV(EtOH) λ_{max} (nm) (ϵ): 207(37800), 220(sh, 12600), 276(850); IR(film) ν_{max} (cm^{-1}): 3200, 3040, 2950, 1680, 1450, 1200, 1130; 1H NMR(500MHz, DMSO- d_6) δ : 9.92(1H, brs, NH), 7.79(3H, brs, NH_3), 7.59(2H, s, H-2, 6), 3.95(2H, t, 5.7, H-9), 3.43(2H, t, 6.1, H-11), 3.07(2H, t, 7.2, H-8), 2.82(1H, t, 7.2, H-7), 1.99(2H, tt, 6.1, 5.7, H-10); ^{13}C NMR(125MHz, DMSO- d_6) δ : 136.8(C-1), 133.2(C-2, 6), 117.5(C-3, 5), 151.1(C-4), 31.4(C-7), 39.3(C-8), 70.6(C-9), 28.6(C-10), 36.8(C-11), 143.0(CO), 112.4(CN); FABMS(positive, glycerol matrix) m/z 326/328($M+2H-Br$) $^+$, 404/406/408($M+H$) $^+$ and 496/498/500($M+H$ + glycerol) $^+$; HRFABMS(positive, glycerol matrix) m/z

405.9572(calcd for $C_{13}H_{16}^{79}Br^{81}BrN_3O_2$, $\Delta - 1.6$ mmu)^[1]。

【来源】 海绵 *Pseudoceratina purpurea*^[1]

【分析方法】 样品 MeOH 提取, 乙醚萃取部分硅胶柱层析 (MeOH-CHCl₃), Toyopearl HW40 凝胶过滤柱层析 (MeOH), HPLC (CH₃CN-H₂O 1:1+0.01%TFA) 得到纯化合物^[1]。

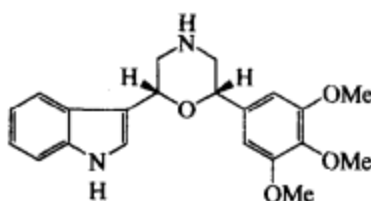
【生物活性与毒性】 细胞毒活性, 抗老鼠白血病细胞 P388 IC₅₀ 3.4 μ g/mL^[1]。

【参考文献】 1. Tsukamoto S, et al. J Org Chem, 1996, 61: 2936

2. Manzo E, et al. Org Lett, 2003, 5: 4591

A0031 Chelonin A

【结构式】



【分子式】 $C_{21}H_{24}N_2O_4$

【相对分子质量】 368

【理化常数及谱学数据】 白色结晶; mp 182°C; $[\alpha]_D - 11.7^\circ$ (c 0.32, CHCl₃); UV (MeOH) λ_{max} (nm): 288 (5100), 278 (6400), 272 (6300), 213 (37100); IR (CHCl₃) ν_{max} (cm⁻¹): 3480, 1595, 1510, 1505, 1465, 1455, 1420, 1335, 1130, 1095; HREIMS m/z : 368.1713 (M^+), $C_{21}H_{24}N_2O_4$ requires 368.1736; ¹H NMR (200MHz, CD₃OD) δ : 7.25 (s, H-2'), 7.77 (dd, $J = 6.9, 1.0$ Hz, H-4'), 7.01 (ddd, $J = 6.9, 6.9, 1.2$ Hz, H-5'), 7.10 (ddd, $J = 7.0, 6.9, 1.0$ Hz, H-6'), 7.35 (dd, $J = 7.0, 1.2$ Hz, H-7'), 5.00 (brt, $J = 6.8$ Hz, H-2), 3.11 (brd, $J = 6.8$ Hz, H-3), 2.74 (dd, $J = 12.8, 10.6$ Hz, H-5), 3.08 (dd, $J = 12.8, 2.4$ Hz, H-5), 4.70 (dd, $J = 10.6, 2.4$ Hz, H-6), 6.74 (s, H-8), 6.74 (s, H-12), 3.82 (s, 9-OMe), 3.73 (s, 10-OMe), 3.82 (s, 11-OMe); ¹³C NMR (50MHz, CD₃OD) δ : 123.3 (d, C-2'), 115.3 (s, C-3'), 127.3 (s, C-3'a), 120.5 (d, C-4'), 120.1 (d, C-5'), 122.7 (d, C-6'), 112.6 (d, C-7'), 138.4 (s, C-7'a), 75.1 (d, C-2), 51.1 (d, C-3), 52.8 (t, C-5), 80.0 (d, C-6), 137.8 (s, C-7), 104.4 (d, C-8), 154.4 (s, C-9), 138.1 (s, C-10), 154.4 (s, C-11), 104.4 (d, C-12), 56.5 (q, 9-OMe), 61.1 (q, 10-OMe), 56.5 (q, 11-OMe)。

【来源】 海绵 *Chelonaplysilla*

【分析方法】 甲醇粗提物用二氯甲烷萃取得到具有抗微生物的棕色固体, 经 Sephadex LH-20 (CH₂Cl₂-MeOH 1:1) 分段, 其中一个部分通过硅胶柱层析 (ethyl acetate/methanol 9:1) 及逆流柱层析 (hexane/ethyl acetate/methanol/water 3:7:5:5) 分离获得活性成分 chelonin A。

【生物活性与毒性】 抗炎。

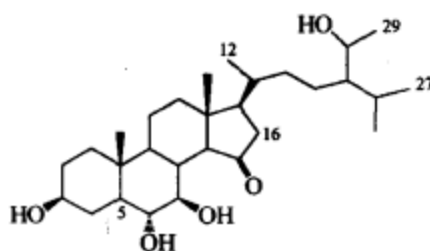
【参考文献】 1. Bobzin S C, et al. J Org Chem, 1991, 56: 4403

2. Somei M, et al. Heterocycles, 1995, 41: 5

3. Lawrence N J, et al. Tetrahedron Lett, 2001, 42: 7671

A0032 Clathriol

【结构式】



【分子式】 $C_{29}H_{50}O_5$

【相对分子质量】 478

【理化常数及谱学数据】 橘红色固体; $[\alpha]_D^{20} + 22.6^\circ$ (c 1.4, MeOH); IR (KBr) $\nu_{\max}$ (cm^{-1}): 3410, 2958, 2872, 1734, 1584, 1055; 1H NMR (CD_3OD): 0.93 (dd, $J = 13.5, 10$, H-1), 1.71 (d, $J = 11$, H-2), 3.47 (dddd, $J = 13.5, 10, 4.5, 3$, H-3), 2.15 (brd, $J = 11.5$, H-4), 3.06 (dd, $J = 10.5, 9$, H-6), 4.30 (dd, $J = 10.5, 9$, H-7), 1.62 (ddd, $J = 12, 10.5, 3$, H-8), 2.84 (dd, $J = 3, 2$, H-14), 2.36 (dd, $J = 20, 10$, H-16), 0.94 (d, $J = 6.5$, H-21), 0.88 (d, $J = 6.5$, H-26), 0.91 (d, $J = 6.5$, H-27), 3.77 (q, $J = 6$, H-28), 1.14 (d, $J = 6.5$, H-29); ^{13}C NMR (CD_3OD): 38.2 (C-1), 71.8 (C-3), 31.5 (C-2), 33.0 (C-4), 48.5 (C-5), 75.1 (C-6), 75.6 (C-7), 40.4 (C-8), 47.2 (C-9), 36.9 (C-10), 22.8 (C-11), 39.0 (C-12), 42.6 (C-13), 53.4 (C-14), 221.9 (C-15), 38.1 (C-16), 49.8 (C-17), 19.4 (C-18), 13.7 (C-19), 35.4 (C-20), 19.8 (C-21), 33.5 (C-22), 25.8 (C-23), 52.6 (C-24), 29.4 (C-25), 19.4 (C-26), 21.5 (C-27), 69.6 (C-28), 20.7 (C-29); ESHRMS pos. m/z 479.37542 (calcd for $C_{29}H_{51}O_5$, 479.37365), neg. m/z 477.35816 (calcd for $C_{29}H_{49}O_5$, 477.35745).

【来源】 海绵 *Clathria lissosclera*

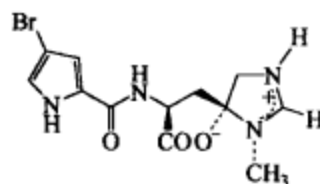
【分析方法】 海绵的甲醇提取物经 HP20 柱过滤两遍, 用水、40% 丙酮/水、80% 丙酮/水和 100% 丙酮洗脱, 40% 丙酮/水洗脱部分经填料为 TosoHaas Amberchrom 的柱, 收集 49%~61% 丙酮洗脱部分重新上柱, 填料同前所示, 反复多次得到化合物 Clathriol。

【生物活性与毒性】 浓度为 $30\mu mol/L$ 时可以抑制 72% 的腹腔柱状细胞的组胺释放。

【参考文献】 1. Keyzers R A, et al. J Nat Prod, 2002, 65: 598

A0033 Clathramide A

【结构式】



【分子式】 $C_{13}H_{18}BrN_4O_3$

【相对分子质量】 358

【理化常数及谱学数据】 无色无定形粉末固体; $[\alpha]_D^{25} - 5^\circ$ (c 0.001, MeOH); UV (CH_3CN) $\lambda_{\max}$ (nm) (ϵ): 208 (14900), 230 (13000), 265 (10900); IR (KBr) $\nu_{\max}$: $2450cm^{-1}$, $1680cm^{-1}$, $1640cm^{-1}$; 1H NMR (500MHz, MeOH- d_4) δ : 11.83 (1H, brs, NH-12), 9.55 (1H, brs, NH-1), 8.00 (1H, brs, H-13), 7.85 (1H, brs, H-7), 7.06 (1H, d, 1.7, H-2), 6.94 (1H, d, 1.7, H-4), 4.59 (1H, d, 12.1, H-11), 4.40 (1H, d, 12.1, H-11), 4.09 (1H, m, H-8), 3.25 (3H, s, H-15), 2.33 (2H, m, H-9), 1.47 (3H, s, H-16); ^{13}C NMR (125MHz, MeOH- d_4) δ : 125.4 (C-2), 97.2 (C-3), 118.6 (C-4), 124.0 (C-5), 160.3 (C-6), 51.4 (C-8), 33.4 (C-9), 58.6 (C-10), 66.2 (C-11), 154.0 (C-13), 36.4 (C-15), 20.7 (C-16), 174.3 (C-17); FABMS (positive, glycerol matrix) m/z 357, 359 (1:1) $[M+H]^+$; HRFABMS m/z 357.0495 $[M+H]^+$, calcd for $C_{13}H_{17}^{79}BrN_4O_3$, 357.0484^[1].

【来源】 海绵 *Agelas clathrodes*^[1]

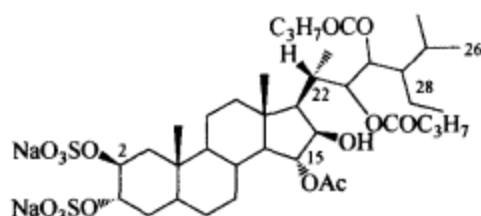
【分析方法】 样品用 MeOH、 $CHCl_3$ 提取, BuOH 萃取部分 RP-18 硅胶柱层析 (MeOH- H_2O), 反相 HPLC (CH_3CN-H_2O 1:1) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 抗真菌活性, $100\mu g$ 样品对 *Aspergillus niger*. 抑制区域为 8mm^[1]。

【参考文献】 1. Cafieri F, et al. Tetrahedron, 1996, 52: 13713

A0034 Clathsterol

【结构式】



【分子式】 $C_{39}H_{64}Na_2O_{15}S_2$

【相对分子质量】 882

【理化常数及谱学数据】 胶状物; $[\alpha]_D^{25} + 28^\circ$ (c 0.15, CH_3OH); IR (KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3300, 2900, 1730, 1247; 1H NMR ($CDCl_3$) δ : 4.25 (brs, H-2), 4.28 (brs, H-3), 4.80 (dd, $J = 10.6, 2.3$, H-15), 3.94 (ddd, $J = 10.6, 4.8, 2.3$, H-16), 1.21 (dd, $J = 10.6, 6.5$, H-17), 0.85 (s, H-18), 0.88 (s, H-19), 0.92 (d, $J = 6.5$, H-21), 5.38 (d, $J = 9.1$, H-22), 5.25 (dd, $J = 9.1, 1.4$, H-23), 0.86 (d, $J = 6.5$, H-26), 0.79 (d, $J = 6.5$, H-27), 0.88 (t, $J = 6.5$, H-29), 0.86 (t, $J = 6.5$, H-4'), 0.88 (t, $J = 6.5$, H-4''), 1.92 (s, H-15 Ac); ^{13}C NMR ($CDCl_3$) δ : 37.2 (t, C-1), 73.0 (d, C-2), 73.1 (d, C-3), 28.8 (t, C-4), 38.2 (d, C-5), 30.4 (t, C-6), 27.5 (t, C-7), 33.7 (d, C-8), 54.5 (d, C-9), 34.9 (s, C-10), 20.2 (t, C-11), 40.1 (t, C-12), 42.7 (s, C-13), 56.8 (d, C-14), 84.9 (d, C-15), 77.3 (d, C-16), 53.9 (d, C-17), 13.8 (q, C-18), 14.0 (q, C-19), 30.4 (d, C-20), 11.9 (q, C-21), 74.5 (d, C-22), 73.8 (d, C-23), 44.9 (d, C-24), 25.4 (d, C-25), 23.4 (q, C-26), 18.1 (q, C-27), 17.8 (t, C-28), 12.4 (q, C-29), 172.4 (s, C-1'), 35.6 (t, C-2'), 17.2 (t, C-3'), 13.5 (q, C-4'), 172.3 (s, C-1''), 35.7 (t, C-2''), 18.1 (t, C-3''), 13.5 (q, C-4''), 170.4 (s, C-15 Ac), 21.3 (q, C-15 Ac); FABMS m/z (%) 905 $[M + Na]^+$ (20), 819 (18), 803 (75), 781 (48), 699 (25), 683 (100), 665 (48); HRFABMS (m/z) 905.3373 $[(M + Na)^+]$, calcd for $C_{39}H_{64}O_{15}S_2Na_3$ 905.3380].

【来源】 海绵 *Clathria* sp.

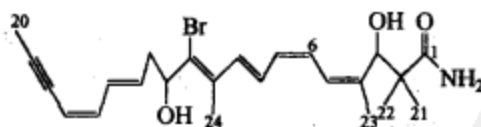
【分析方法】 以 $MeOH-EtOAc$ (1:1) 提取海绵三次, 合并提取物, 悬浮于水中, 氯仿萃取。氯仿层经过硅胶柱层析后, 上 Sephadex LH-20, $MeOH$ 洗脱, 最后用 RP-18 柱纯化, 得到化合物 Clathsterol。

【生物活性与毒性】 浓度为 $10\mu mol/L$ 时即对 HIV-1 型反转录酶有作用。

【参考文献】 1. Rudi A, et al. *J Nat Prod*, 2001, 64: 1451

A0035 Clathrynamides A

【结构式】



【分子式】 $C_{24}H_{32}NBrO_3$

【相对分子质量】 463/461

【理化常数及谱学数据】 无色黏状物; $[\alpha] + 146^\circ$ (c 0.0164, $MeOH$); CIMS m/z 486, 484 $[M + Na]^+$, 464, 462 $[M + H]^+$, 446, 444 $[M - H_2O + H]^+$; HRFABMS m/z 486.1448, 484.1474 $[M + Na]^+$; IR (film) ν_{max} (cm^{-1}): 3350, 2200, 1660, 1590; UV ($MeOH$) λ_{max} (nm): 267, 308, 321, 336; CD ($MeOH$): $\Delta\epsilon_{335} + 10$, $\Delta\epsilon_{319} + 16$, $\Delta\epsilon_{306} + 15$ 和 $\Delta\epsilon_{264} - 21$; 1H NMR (500MHz, CD_3OD) δ : 4.72 (H, s, H-3), 6.56 (H, d, $J = 12.8$ Hz, H-5), 6.44 (H, t, $J = 11.5$ Hz, H-6), 6.10 (H, t, $J = 11.0$ Hz, H-7), 6.97 (H, dd, $J = 15.1, 11.5$ Hz, H-8), 6.90 (H, d, $J = 15.1$ Hz, H-9), 4.77 (H, t, $J = 7.3$ Hz, H-12), 2.51 (2H, t, $J = 7.3$ Hz, H-13), 5.73 (H, dt, $J = 14.9, 7.3$ Hz, H-14), 6.61 (H, dd, $J = 10.5, 2.5$ Hz, H-17), 1.98 (3H, d, $J = 2.3$ Hz, H-20), 1.05 (3H, s, H-21), 1.27 (3H, s, H-22), 1.87 (3H, s, H-23), 2.01 (3H, s, H-24); ^{13}C NMR (125MHz, CD_3OD): 183.3 (C-1), 46.7 (C-2), 75.5 (C-3), 141.1 (C-4), 125.8 (C-5), 127.0 (C-6), 129.9 (C-7), 128.8 (C-8), 136.0 (C-9), 133.7 (C-10), 132.7 (C-11), 71.4 (C-12), 40.4 (C-13), 132.5 (C-14), 131.6 (C-15), 139.5 (C-16), 109.7 (C-17), 77.6 (C-18), 92.5 (C-19), 4.0 (C-20), 22.0 (C-21), 26.3 (C-22), 20.0 (C-23),

16. 1(C-24)。

【来源】 海绵 *Clathria* sp.

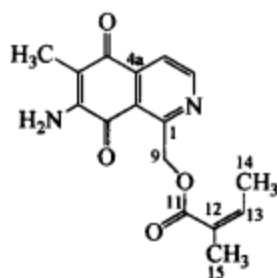
【分析方法】 海绵的甲醇提取物的苯萃取层经过硅胶柱(乙酸乙酯-苯)分段后,过正相 HPLC (5% 乙醇-正己烷)纯化得到。结构通过 (HR) MS、IR、UV 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 1. 抑制海星蛋细胞有丝分裂, $\text{IC}_{50} = 6\text{ng/mL}$ 。2. 抑制人骨髓 K-562 细胞生长, $\text{IC}_{50} = 0.2\mu\text{g/mL}$ 。

【参考文献】 1. Ohta S, et al. Tetrahedron Lett, 1993, 34 (37)

A0036 Cribrostatin 3

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{16}\text{H}_{16}\text{N}_2\text{O}_4$

【相对分子质量】 300

【理化常数及谱学数据】 红色固体; mp $190\sim 192^\circ\text{C}$; IR (KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3400, 1706, 1673, 1606, 1563, 1410, 1397, 1236; ^1H NMR (CCl_3) δ : 8.91 (d, $J = 5\text{Hz}$, H-3), 7.93 (d, $J = 5\text{Hz}$, H-4), 5.74 (s, H-9), 6.11 (qu, $J = 5\text{Hz}$, H-13), 1.98 (d, H-14), 2.02 (m, H-15), 2.01 (s, 6-Me); ^{13}C NMR (CCl_3) δ : 156.42 (C-1), 154.63 (C-3), 118.88 (C-4), 140.50 (C-4a), 181.29 (C-5), 112.81 (C-6), 145.94 (C-7), 180.85 (C-8), 121.80 (C-8a), 65.34 (C-9), 167.96 (C-11), 127.88 (C-12), 137.91 (C-13), 15.73 (C-14), 20.60 (C-15), 9.08 (6-Me); EIMS m/z 300, 272, 243, 217, 201, 173, 145, 117, 83, 82; HREIMS m/z 300.1102 (M^+ calcd for $\text{C}_{16}\text{H}_{16}\text{N}_2\text{O}_4$ 300.1110)。

【来源】 海绵 *Cribrorchalina* sp.

【分析方法】 海绵的氯仿粗提物经 Sephadex LH-20 依次由甲醇、二氯甲烷: 甲醇 (3: 2)、正己烷: 甲苯: 甲醇 (3: 3: 1) 和正己烷: 异丙醇: 甲醇 (3: 1: 1) 洗脱, 得到化合物 Cribrostatins 3。

【生物活性与毒性】 体外抗 P-388 的 ED_{50} 值为 $2.5\mu\text{g/mL}$ 。

【参考文献】 1. Pettit G R, et al. J Nat Prod, 2000, 63: 793

2. Pettit G R, et al. Can J Chem, 1992, 70: 1170

3. Pettit G R, et al. Eur Pat Appl, 1993, CA118 (17): 165634c

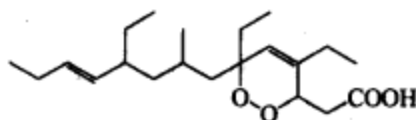
4. Nakahara S, et al. Heterocycles, 1995, 41: 651

5. Pettit G R, et al. US Pat Appl. US6437128, 2002

6. Pettit G R, et al. J Nat Prod, 2003, 66: 544

A0037 Cyclic-peoxide-containing acid 1

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{21}\text{H}_{36}\text{O}_4$

【相对分子质量】 352

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D - 34.6^\circ$ (c 0.2, CHCl_3); IR(CHCl_3) $\nu_{\max}$ (cm^{-1}): 3650, 3510, 2980, 2920, 1710, 1450, 1380, 1290, 972; LIEIMS m/z : $[\text{M} - \text{CH}_2\text{COOH}]^+$ 293(0.4%), 277(0.5), 263(0.7), 249(2), 233(3), 221(1), 207(2), 199(5), 195(10), 193(2), 167(12), 151(12); ^1H NMR(360MHz, CDCl_3) δ : 2.68(dd, $J = 16.0, 9.5\text{Hz}$, H-2), 2.53(dd, $J = 16.0, 2.8\text{Hz}$, H-2), 4.55(ddd, $J = 9.5, 2.8, 1.6\text{Hz}$, H-3), 5.46(dt, $J = 1.6, 1.4\text{Hz}$, H-5), 1.38(d, $J = 5.4\text{Hz}$, H-7), 1.50(m, H-8), 1.39(m, H-9), 1.15(m, H-9), 1.80(m, H-10), 4.95(ddt, $J = 15.4, 9.2, 1.2\text{Hz}$, H-11), 5.35(dt, $J = 15.4, 6.4\text{Hz}$, H-12), 1.98(m, H-13), 0.94(t, $J = 7.5\text{Hz}$, H-14), 1.98(m, H-15), 1.06(t, $J = 7.4\text{Hz}$, H-16), 1.69(dq, $J = 15.0, 7.5\text{Hz}$, H-17), 1.58(dq, $J = 15.0, 7.5\text{Hz}$, H-17), 0.86(t, $J = 7.5\text{Hz}$, H-18), 0.83(d, $J = 6.7\text{Hz}$, H-19), 1.28(m, H-20), 1.13(m, H-20), 0.79(t, $J = 7.4\text{Hz}$, H-21); ^{13}C NMR(90.5MHz, CDCl_3) δ : 176.6(s, C-1), 35.3(t, C-2), 76.5(s, C-3), 137.5(s, C-4), 124.9(d, C-5), 83.6(s, C-6), 43.3(t, C-7), 25.9(d, C-8), 28.9(t, C-9), 42.3(d, C-10), 133.2(d, C-11), 132.1(d, C-12), 25.7(t, C-13), 14.2(q, C-14), 24.8(t, C-15), 11.7(q, C-16), 30.9(t, C-17), 8.1(q, C-18), 21.3(q, C-19), 44.5(t, C-20), 11.6(q, C-21).

【来源】 海绵 *plakortis angulospiculata*

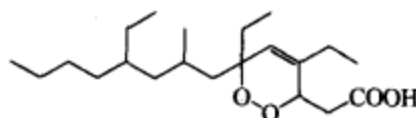
【分析方法】 甲醇粗提物分配于乙酸乙酯-水, 乙酸乙酯可溶部分经硅胶柱色谱 (CH_2Cl_2 -MeOH 梯度洗脱) 分离, 高效液相色谱 (10% $\text{H}_2\text{O}/\text{CH}_3\text{CN}$) 纯化, 获得活性成分 Cyclic-peoxide-containing acid 1.

【生物活性与毒性】 细胞毒性, 抗菌。

【参考文献】 1. Cozzolino R, et al. J Nat prod, 1990, 53: 669

A0038 Cyclic-peoxide-containing acid 3

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{21}\text{H}_{38}\text{O}_4$

【相对分子质量】 354

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D - 36.0^\circ$ (c 0.16, CHCl_3); IR(CHCl_3) $\nu_{\max}$ (cm^{-1}): 3500, 2978, 2960, 1705, 1580, 1432, 1378, 1285; LIEIMS m/z : $[\text{M} - \text{C}_2\text{H}_5]^+$ 325(10), 292(3), 263(12), 247(10), 199(8), 195(6), 151(11), 139(48), 137(62), 125(26), 109(22), 83(35), 71(35), 56(100); ^1H NMR(360MHz, $\text{CDCl}_3 + 1$ drop CD_3OD) δ : 0.78(t, $J = 7.1\text{Hz}$), 0.89(m), 1.03(t, $J = 7.3\text{Hz}$, H-3), 1.97(m), 2.65(m), 2.79(m), 4.56(m), 5.47(s); ^{13}C NMR(90.5MHz, CDCl_3) δ : 176.6(s, C-1), 138.5(s), 124.1(d), 83.7(s), 77.3(d), 43.4(t), 42.9(t), 36.2(d), 32.6(t), 31.1(t), 28.6(t), 26.3(t), 25.9(d), 24.8(t), 23.2(t), 22.4(q), 14.1(q), 11.6(2q), 10.8(q).

【来源】 海绵 *plakortis angulospiculata*

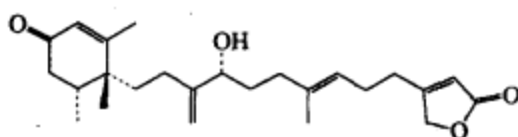
【分析方法】 甲醇粗提物分配于乙酸乙酯-水, 乙酸乙酯可溶部分经硅胶柱色谱 (CH_2Cl_2 -MeOH 梯度洗脱) 分离, 高效液相色谱 (10% $\text{H}_2\text{O}/\text{CH}_3\text{CN}$) 纯化, 获得活性成分 Cyclic-peoxide-containing acid 3.

【生物活性与毒性】 细胞毒性, 抗菌。

【参考文献】 1. Cozzolino R, et al. J Nat prod, 1990, 53: 669

A0039 Cyclolinteinol

【结构式】



【分子式】 $C_{25}H_{36}O_4$

【相对分子质量】 400

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D^{25} + 63.0^\circ (c\ 0.03, CHCl_3)$; $^1H\ NMR(500MHz, CDCl_3) \delta$: 5.88(1H, d, 1.0, H-2), 5.85(1H, s, H-18), 5.13(1H, dt, 1.0, 7.0, 7.0, H-14), 5.03(1H, brs, H-23), 4.87(1H, brs, H-23), 4.73(2H, d, 1.7, H-25), 4.04(1H, m, H-10), 2.49(1H, dd, 5.1, 17.7, H-14), 2.46(2H, m, H-16), 2.31(2H, m, H-15), 2.30(1H, dd, 9.6, 17.7, H-4), 2.14(1H, m, H-5), 2.08(2H, m, H-8), 1.96(3H, d, 1.0, H-20), 1.73(1H, m, H-7), 1.64(1H, m, H-7), 1.63(3H, s, H-24), 1.60(2H, m, H-11), 1.23(3H, s, H-22), 1.03(3H, d, 6.7, H-21); $^{13}C\ NMR(125MHz, CDCl_3) \delta$: 167.9(C-1), 127.3(C-2), 198.7(C-3), 42.6(C-4), 38.0(C-5), 41.4(C-6), 34.3(C-7), 25.8(C-8), 151.7(C-9), 75.2(C-10), 33.6(C-11), 35.7(C-12), 137.1(C-13), 122.3(C-14), 25.6(C-15), 28.6(C-16), 170.1(C-17), 115.6(C-18), 173.6(C-19), 21.3(C-20), 16.2(C-21), 24.2(C-22), 110.2(C-23), 15.9(C-24), 73.1(C-25); HREIMS $m/z\ M^+$ Obsd 400.2609, $C_{25}H_{36}O_4$, requires 400.2604^[1].

【来源】 海绵 *Cacospongia cf. linteiformis*^[1]

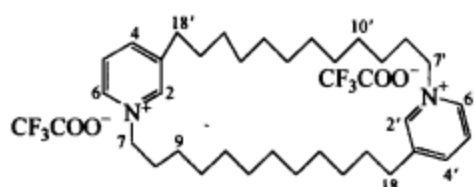
【分析方法】 样品甲醇-二甲苯 3:1 提取, 乙酸乙酯萃得部分硅胶柱层析 (梯度 P. ether-EtOAc), 正相 HPLC (hexane-EtOAc 6:4) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 抑制脂多糖诱导的鼠类巨噬细胞 J774NO 的产生^[1]。

【参考文献】 1. Carotenuto A, et al. Tetrahedron, 1997, 53: 7305

A0040 Cyclostelletamine A

【结构式】



【分子式】 $C_{38}H_{56}F_6N_2O_4$

【相对分子质量】 718

【理化常数及谱学数据】 $^1H\ NMR(CD_3OD) \delta$: 8.87(H, brs, H-2, H-2'), 8.45(H, d, $J = 7.9Hz$, H-4, H-4'), 8.02(H, dd, $J = 7.9, 6.1Hz$, H-5, H-5'), 8.81(H, d, $J = 6.1Hz$, H-6, H-6'), 4.61(2H, t, $J = 6.7Hz$, H-7, H-7'), 2.00(2H, q, $J = 7.0Hz$, H-8, H-8'), 1.23(2H, m, H-9, H-9'), 1.20-1.40(H-10~H-15, H-10'~H-15'), 1.26(2H, m, H-16, H-16'), 1.73(2H, q, $J = 7.2Hz$, H-17, H-17'), 2.89(2H, t, $J = 7.1Hz$, H-18, H-18'); $^{13}C\ NMR(CD_3OD) \delta$: 144.5(C-2, C-2'), 146.2(C-3, C-3'), 146.2(C-4, C-4'), 128.3(C-5, C-5'), 142.5(C-6, C-6'), 62.7(C-7, C-7'), 31.9(C-8, C-8'), 26.4(C-9, C-9'), 29-31(C-10~C-17, C-10'~C-17'), 33.0(C-18, C-18').

【来源】 海绵 *Stelletta maxima*

【分析方法】 海绵的乙醇提取物在水和乙醚间分配, 水层继续用正丁醇萃取, 乙醚层在甲醇-水和正己烷、四氯化碳以及二氯甲烷间分配, 剩下的甲醇-水层和正丁醇层混合经过 Sephadex LH-20 (甲醇)、氧化铝柱 (二氯甲烷-甲醇-水 7:3:0.5) 和反相 HPLC (40% 乙腈-水, 0.1% TFA) 分离得到。结构通过 (HR) MS 和 NMR ($^1H\ NMR$, $^{13}C\ NMR$ 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 对草毒碱受体类型 M1 (大鼠脑部)、M2 (大鼠心脏) 和 M3 (大鼠唾液腺) 的抑制, IC_{50} 分别为 0.068mg/mL、0.026mg/mL、0.071mg/mL。

【参考文献】 1. Nobuhiro Fusetani, et al. Tetrahedron Lett, 1994, 35 (35): 3967

2. Anan H, et al. Tetrahedron, 1996, 52: 10849

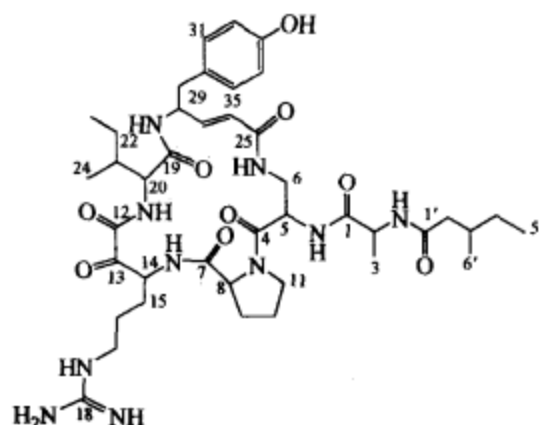
3. Matzanke N, et al. Org Prep Proced Int, 1998, 30: 1

4. Kaiser A, et al. J Am Chem Soc, 1998, 120: 8026

5. Morimoto Y, et al. Tetrahedron, 1998, 54: 12197
6. Baldwin J E, et al. Tetrahedron, 1998, 54: 13655
7. Jakubowicz K, et al. J Org Chem, 1999, 64: 7381
8. Anderson R J, et al. Alkaloids: Chem Biol Perspect, 1996, 10: 301
9. Sepeic K, J Toxicol Toxin Rev, 2000, 19: 139

A0041 Cyclotheonamide E4

【结构式】



【分子式】 $C_{41}H_{62}N_{10}O_9$

【相对分子质量】 839

【理化常数及谱学数据】 淡黄色无定形固体; $[\alpha]_D^{25} - 101^\circ$ (c 0.04, MeOH); UV (MeOH) λ_{max} : 287nm; 1H NMR: 0.91 (H-5'), 0.90 (H-6'), 4.62 (d, $J = 11.0$, H-5), 4.08 (dd, $J = 11.2$, H-14), 0.55 (d, $J = 6.9$, H-24), 6.15 (d, $J = 15.8$, H-26), 6.78 (brd, $J = 15.8$, H-27), 3.08 (dd, $J = 14.1$, 5.0, H-29a), 2.58 (dd, $J = 14.1$, 11.5, H-29b), 7.06 (d, $J = 8.5$, H-31), 6.69 (d, $J = 8.5$, H-32), 6.69 (d, $J = 8.5$, H-34), 7.06 (d, $J = 8.5$, H-35); ^{13}C NMR: 175.7 (C-1'), 43.9 (C-2'), 33.6 (C-3'), 30.5 (C-4'), 11.6 (C-5'), 19.4 (C-6'), 174.9 (C-1), 49.8 (C-2), 17.6 (C-3), 171.6 (C-4), 51.4 (C-5), 40.9 (C-6), 174.1 (C-7), 61.7 (C-8), 31.4 (C-9), 26.1 (C-10), 49.6 (C-11), 171.5 (C-12), 99.5 (C-13), 55.6 (C-14), 25.0 (C-15), 26.1 (C-16), 42.1 (C-17), 158.6 (C-18), 172.1 (C-19), 58.3 (C-20), 14.6 (C-24), 12.3 (C-23), 27.2 (C-22), 41.3 (C-21), 167.9 (C-25), 125.0 (C-26), 143.8 (C-27), 53.4 (C-28), 39.4 (C-29), 129.8 (C-30), 131.0 (C-31), 116.2 (C-32), 157.3 (C-33), 116.2 (C-34), 131.0 (C-35); HRFABMAS (glycerol matrix) m/z 871.5012 ($M + MeOH + H$)⁺ (calcd for $C_{41}H_{62}N_{10}O_9$, 871.5046).

【来源】 海绵 *Ircinia* sp., *Theonella* sp.

【分析方法】 海绵的二氯甲烷和甲醇提取物以 EtOAc 和 H_2O 进行分配, 含水层浓缩后经 Diaion HP-20 柱层析, 首先用 20% 的丙酮洗脱, 活性部位为 70% 丙酮洗脱部分, 然后依次经 RP-HPLC (Asahipak GS320 柱, 15% 含水乙腈, 100mmol/L 磷酸缓冲液, pH 4.0) 和 RP-HPLC (CAPCELL PAK SCX 柱, 20% 含水乙腈, 100mmol/L NaCl, 10mmol/L 磷酸缓冲液) 分离制备而得。

【生物活性与毒性】 体外抑制人类胰蛋白酶、大鼠胰蛋白酶、人凝血酶和牛胰岛素的 IC_{50} 值 (nmol/L) 分别为 5.1 ± 0.5 、 6.5 ± 1.0 、 7.4 ± 0.9 和 5.9 ± 0.3 。

【参考文献】 1. Murakami Y, et al. J Nat Prod, 2002, 65: 259

2. Fusetani N, et al. J Am Chem Soc, 1990, 112: 7053

3. Fusetani N, et al. Tennen Yuki Kagobutsu Toronkai Koen Yosh, 1990, 32: 65

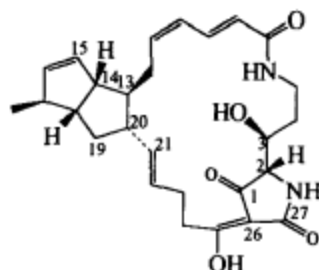
4. Hagihara M, et al. J Am Chem Soc, 1992, 114: 6570

5. Nakao Y, et al. Bioorg Med Chem, 1995, 3: 1115

6. Nakao Y, et al. J Nat Prod, 1998, 61: 667

A0042 Cylindramide

【结构式】

【分子式】 $C_{27}H_{34}N_2O_5$

【相对分子质量】 466

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha] + 166.8^\circ (c\ 0.45, \text{MeOH})$; HRFABMS $m/z\ 467.2539 [M+H]^+$; IR (KBr) $\nu_{\max} (\text{cm}^{-1})$: 3300, 2940, 1660, 1610, 1520, 1440, 1330, 1280, 1210, 1010, 960, 860; UV (MeOH) $\lambda_{\max}$: 265nm; $^1\text{H NMR} (\text{CDCl}_3\text{-MeOD } 1:1) \delta$: 3.97 (H, s, H-2), 3.96 (H, d, $J = 7.7\text{Hz}$, H-3), 1.55, 1.43 (2H, m, H-4), 2.51, 1.94 (2H, m, H-5), 5.87 (H, d, $J = 15.0\text{Hz}$, H-8), 7.78 (H, dd, $J = 11.0, 15.0\text{Hz}$, H-9), 6.19 (H, t, $J = 11.0\text{Hz}$, H-10), 5.91 (H, dt, $J = 11.0, 5.4\text{Hz}$, H-11), 2.59, 2.29 (2H, m, H-12), 1.33 (H, m, H-13), 3.01 (H, tq, $J = 9.5, 2.2\text{Hz}$, H-14), 5.62 (H, dt, $J = 5.6, 2.1\text{Hz}$, H-15), 5.47 (H, dt, $J = 5.6, 2.8\text{Hz}$, H-16), 2.39 (H, qq, $J = 7.0, 2.3\text{Hz}$, H-17), 0.98 (3H, d, $J = 7.0\text{Hz}$, 17-CH₃), 2.11 (H, m, H-18), 1.99, 1.06 (2H, m, H-19), 2.06 (H, q, $J = 8.5\text{Hz}$, H-20), 5.21 (H, d, $J = 15.1, 8.5\text{Hz}$, H-21), 5.29 (H, ddd, $J = 15.1, 8.4, 5.7\text{Hz}$, H-22), 2.25, 2.07 (2H, m, H-23), 3.08, 2.25 (2H, m, H-24); $^{13}\text{C NMR} (\text{CD}_3\text{OD})$: 194.3 (C-1), 68.8 (C-2), 70.0 (C-3), 31.3 (C-4), 36.7 (C-5), 168.4 (C-7), 123.9 (C-8), 136.6 (C-9), 128.7 (C-10), 136.6 (C-11), 28.6 (C-12), 52.4 (C-13), 54.4 (C-14), 132.8 (C-15), 135.4 (C-16), 47.9 (C-17), 22.2 (17-CH₃), 50.0 (C-18), 40.9 (C-19), 49.5 (C-20), 133.8 (C-21), 131.3 (C-22), 30.9 (C-23), 35.4 (C-24), 190.5 (C-25), 101.2 (C-26), 176.7 (C-27).

【来源】 海绵 *Halichondria cylindrata* (日本)

【分析方法】 海绵甲醇提取物在水和乙醚间分配, 乙醚层用 DMSO 溶解上 ODS open 柱, $n\text{-PrOH}$ 水溶液洗脱, 再使用反相 HPLC (80% 甲醇-水, 0.05% TFA) 纯化得到。结构通过 (HR) MS、IR 和 NMR ($^1\text{H NMR}$ 、 $^{13}\text{C NMR}$ 和 2D-NMR)、CD 和化学衍生化等方法确定。

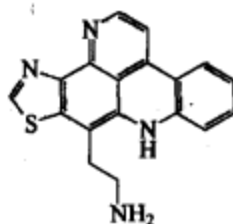
【生物活性与毒性】 对 B16 黑瘤细胞毒性, $\text{IC}_{50} = 0.8\mu\text{g/mL}$ 。

【参考文献】 1. Kanazawa S, et al. Tetrahedron Lett, 1993, 34 (6): 1065

2. Shigemori H, et al. J Org Chem, 1992, 57 (15): 4317

A0043 N-Deacetylkuanoniamine C

【结构式】

【分子式】 $C_{18}H_{14}N_4S$

【相对分子质量】 318

【理化常数及谱学数据】 橘色无定形粉末; UV (MeOH) $\lambda_{\max} (\text{nm}) (\lg \epsilon)$: 201 (4.14), 239 (4.33), 264 (4.11), 295 (4.08), 304 (4.05), 342 (3.82), 355 (3.85); $^1\text{H NMR} (300\text{MHz}, \text{DMSO-}d_6) \delta$: 9.08 (1H, s, H-11), 8.67 (1H, d, 5.1, H-2), 8.06 (1H, d, 7.9, H-4), 7.68 (1H, d, 5.1, H-3), 7.40 (2H, m, H-6, H-7), 7.02

(1H, m, H-5), 3.08(2H, br, H-13), 2.95(2H, br, H-14); ^{13}C NMR (75MHz, DMSO- d_6) δ : 150.9(C-2), 148.9(C-11), 143.5(C-12b), 140.7(C-12a), 140.0(C-9a), 139.6(C-7a), 139.4(C-3a), 133.8(C-8a), 131.8(C-6), 123.9(C-4), 120.8(C-5), 117.9(C-12c), 116.3(C-7), 115.8(C-3b), 108.4(C-3), 106.0(C-9), 39.6(C-14), 34.6(C-13), ESIMS m/z 319[$\text{M} + \text{H}$] $^+$; ESIMS/MS(precursor ion m/z 319; collision energy 29eV; 830.5 mTorr Argon) m/z 302(319-NH $_3$); HREIMS m/z 318.0930(calcd for C $_{18}$ H $_{14}$ N $_4$ S 318.0939) $^{[1]}$ 。

【来源】 海绵 *Oceanapia* sp. $^{[1]}$

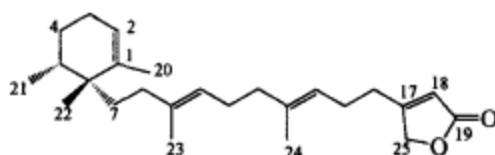
【分析方法】 样品甲醇提取, 硅胶柱层析 (CH $_2$ Cl $_2$ -MeOH-NH $_4$ OH 70:30:3), RP-18 柱层析 (MeOH-H $_2$ O-TFA 70:30:0.5) 得到纯化合物 $^{[1]}$ 。

【生物活性与毒性】 细胞毒性, IC $_{50}$: HeLa 1.2 $\mu\text{g/mL}$, MONOMAC6 2.0 $\mu\text{g/mL}$ $^{[1]}$ 。

【参考文献】 1. Eder C, et al. J Nat Prod, 1998, 61: 301

A0044 3-Deoxo-cyclolinteine

【结构式】



【分子式】 C $_{25}$ H $_{38}$ O $_2$

【相对分子质量】 370

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha] + 89^\circ$ (c 0.03, CHCl $_3$); HREIMS m/z 370.2878[M] $^+$; IR ν_{max} (cm $^{-1}$): 1782, 1749; ^1H NMR (500MHz, CDCl $_3$) δ : 5.39(H, m, H-2), 1.95(2H, m, H-3), 1.60(2H, m, H-4), 1.55(H, m, H-5), 1.35, 1.48(2H, m, H-7), 1.85, 1.95(2H, m, H-8), 5.07(H, brt, $J = 7.5\text{Hz}$, H-10), 2.08(2H, m, H-11), 2.00(2H, m, H-12), 5.08(H, brt, $J = 7.5\text{Hz}$, H-14), 2.30(2H, brq, $J = 7.5\text{Hz}$, H-15), 2.45(2H, brt, $J = 7.5\text{Hz}$, H-16), 5.84(H, brs, H-18), 1.62(3H, s, H-20), 0.94(3H, s, H-21), 1.02(3H, s, H-22), 1.59(3H, s, H-23), 1.62(3H, s, H-24), 4.73(2H, brs, H-25); ^{13}C NMR (125MHz, CDCl $_3$): 139.43(C-1), 122.66(C-2), 23.98(C-3), 27.44(C-4), 37.59(C-5), 39.50(C-6), 34.71(C-7), 35.66(C-8), 136.66(C-9), 123.23(C-10), 26.50(C-11), 39.62(C-12), 137.60(C-13), 121.89(C-14), 25.74(C-15), 28.78(C-16), 174.13(C-17), 115.62(C-18), 170.21(C-19), 19.62(C-20), 15.92(C-21), 26.43(C-22), 16.14(C-23), 16.19(C-24), 73.14(C-25)。

【来源】 加勒比海绵 *Cacospongia* cf. *linteriformis*

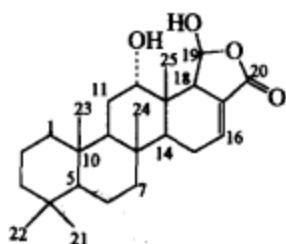
【分析方法】 海绵的甲醇-甲苯 (3:1) 提取物用乙酸乙酯固相萃取, 乙酸乙酯层在 SiO $_2$ 柱上 MPLC 层析, 石油醚-乙酸乙酯梯度洗脱, 馏分用正相 HPLC (正己烷-乙酸乙酯) 分离得到纯品。结构通过 (HR) MS、IR 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 1. 10mg/kg 浓度下对 *Gambusia affinis* 鱼有毒作用。2. 在 30 $\mu\text{g/cm}^2$ 下对 *Carassius auratus* 有很强的进食阻断作用。

【参考文献】 1. Alfonso Carotenuto, et al. Tetrahedron, 1995, 51 (39): 10751

A0045 Desacetylscalarin

【结构式】



【分子式】 $C_{25}H_{38}O_4$

【相对分子质量】 402

【理化常数及谱学数据】 无色固体; mp 194°C; $[\alpha] + 15.4^\circ$ (c 0.35, $CHCl_3$) HREIMS m/z 402.2812 $[M]^+$; LREIMS m/z (rel. int.) 402 $[M]^+$ (2), 384 $[M - H_2O]^+$ (13), 368 (27), 256 (17), 236 (23), 205 (13), 191 (21); IR (KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3400, 1760, 1740, 1220, 1200; UV ($CHCl_3$) λ_{max} : 221 nm; 1H NMR ($CHCl_3$) δ : 6.83 (H, m, H-16), 5.67 (H, brd, $J = 5.0$ Hz, H-19), 3.86 (H, m, H-12), 3.20 (H, m, H-18), 2.31 (H, m, H-15), 0.93 (3H, s), 0.85 (6H, s), 0.81 (6H, s); ^{13}C NMR ($CHCl_3$): 77.2 (C-12), 56.3 (C-15), 51.2 (C-9, C-18), 49.1 (C-14), 42.0 (C-7), 41.6 (C-3), 39.6 (C-1), 37.7 (C-8), 36.9 (C-10, C-13), 33.3 (C-4), 33.3 (C-21), 24.5 (C-15), 24.5 (C-15), 24.3 (C-11), 21.4 (C-22), 18.5 (C-6), 18.1 (C-2), 16.3 (C-24), 16.0 (C-23), 15.2 (C-25)。

【来源】 冲绳海绵 *Hyrtilos* sp.

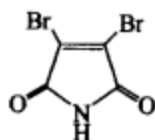
【分析方法】 海绵的甲醇提取物用乙酸乙酯萃取层, 乙酸乙酯层经过反复的硅胶柱 (氯仿、甲醇、正己烷-乙酸乙酯等系统洗脱) 再上反相 HPLC (乙腈-水-TFA 80:20:0.1) 得到纯品。结构通过 (HR) MS、UV、IR 和 NMR (1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 在 30~100 $\mu g/mL$ 下能使培养的神经胶质细胞的神经生长因子 (NGF) 的合成增长 5~6 倍。

【参考文献】 1. Doi Y, et al. Chem Pharm Bull, 1993, 41: 2190

A0046 3,4-Dibromomaleimide

【结构式】



【化学名】 3,4-Dibromopyrrolidine-2,5-dione

【分子式】 $C_4H_3Br_2NO_2$

【相对分子质量】 257

【理化常数及谱学数据】 UV (MeOH) λ_{max} (nm): 236.0 (4.1), 243.0 (4.1), 251.5 (3.9, sh), 303.5 (3.1); IR (KBr) ν_{max} : 1760 cm^{-1} , 1720 cm^{-1} ; 1H NMR (DMSO- d_6) δ : 11.66 (1H, brs, NH); ^{13}C NMR (DMSO- d_6) δ : 130.0 (C-3, C-4), 165.4 (C-2, C-5); EIMS m/z 253 $[M]^+$, 255 $[M + 2]^+$, 257 $[M + 4]^+$ (1:2:1); HREIMS m/z 252.8385 ($C_4H^{79}Br_2NO_2$)。

【来源】 海绵 *Axinella brevistyla*

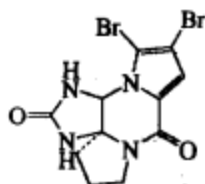
【分析方法】 海绵的甲醇提取物分别用石油醚和正丁醇抽提, 正丁醇部分经过 ODS 柱层析 MeOH/ H_2O 梯度洗脱, 其中 60% MeOH/ H_2O 洗脱部分经 Sephadex LH-20 (MeOH 洗脱) 后依次上硅胶柱和 RPHPLC 分离纯化, 得到化合物 3-Bromomaleimide。

【生物活性与毒性】 浓度小于 1.0 $\mu g/disk$ 即能抑制酵母菌 *S. cerevisiae* 的 erg 6 突变种生长。

【参考文献】 1. Tsukamoto S, et al. J Nat Prod, 2001, 64: 1576~1578

A0047 Dibromophakellstatin

【结构式】



【分子式】 $C_{11}H_{10}Br_2N_4O_2$

【相对分子质量】 390

【理化常数及谱学数据】 无色晶体; mp 245°C; 1H NMR (500MHz, DMSO- d_6) δ : 8.25 (1H, brs), 7.97 (1H, brs), 6.92 (1H, s), 5.98 (1H, d, 2.4), 3.56 (1H, m), 3.44 (1H, m), 2.29 (1H, m), 2.09 (2H, m), 1.98 (1H, m); ^{13}C NMR (125MHz, DMSO- d_6) δ : 157.8, 154.0, 125.3, 113.7, 105.5, 101.0, 78.9, 68.6, 44.0, 18.8, C-11 was hidden by the DMSO signal; MS (m/z rel) 392(11), 390(23), 388(12), 318(5), 311(4), 309(4), 252(9), 187(5), 139(100), 111(43), 82(62), 80(64); HRFAB-MS calcd for $C_{11}H_{11}N_4^{79}Br_2O_2 [M+H]^+$ 388.9248, found 388.9239^[1]。

【来源】 海绵 *Phakellia mauritiana*^[1]

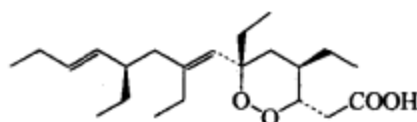
【分析方法】 样品分别用 MeOH-CH₂Cl₂ 1:1 提取, Sephadex LH-20 柱层析 (MeOH), 硅胶柱层析 (CH₂Cl₂-MeOH 93:7), 硅胶柱层析 (EtOAc-hexane 9:1), Sephadex LH-20 柱层析 (hexane-toluene-methanol 3:1:1) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 具有细胞毒样活性, 抗人类癌细胞 ED₅₀ (μ g/mL): 卵巢癌 OVCAR-3 0.46; 脑癌 SF-295 1.5; 肾癌 A498 0.21; 肺癌 H460 0.62; 结肠癌 KM20L 0.11; 黑肿瘤 SK-MEL-5 0.11^[1]。

【参考文献】 1. Pettit G R, et al. J Nat Prod, 1997, 60: 180

A0048 [6-(2,4-Diethyl-octa-1,5-dienyl)-4,6-diethyl-1,2-dioxan-3-yl]acetic acid

【结构式】



【分子式】 $C_{22}H_{38}O_4$

【相对分子质量】 366

【理化常数及谱学数据】 灰黄色油状物; $[\alpha]_D^{25} + 76.2^\circ$ (c 1.6, CHCl₃); IR (film) ν_{max} (cm⁻¹): 3480~2550, 2936, 2929, 2875, 1717, 1192; 1H NMR (600MHz, CDCl₃) δ : 5.37 (1H, m, H-12), 5.17 (1H, s, H-7), 5.12 (1H, m, H-11), 4.18 (1H, ddd, 9.6, 9.6, 3.0, H-3), 2.66 (1H, dd, 15.8, 3.0, H-5), 2.29 (1H, bdd, 15.8, 9.6, H-2), 2.12 (2H, m, H-19), 2.10 (1H, m, H-9), 1.98 (1H, m, H-5), 1.98 (1H, m, H-10), 1.96 (1H, m, H-13), 1.94 (1H, m, H-9), 1.59 (2H, q, 7.5, H-17), 1.57 (1H, m, H-4), 1.42 (1H, m, H-15), 1.40 (1H, m, H-21), 1.28 (1H, dd, 12.8, 12.8, H-5), 1.16 (1H, m, H-21), 1.09 (1H, m, H-15), 0.97 (3H, t, 7.5, H-20), 0.95 (3H, t, 7.5, H-14), 0.89 (3H, dd, 7.5, 7.5, H-16), 0.86 (3H, t, 7.5, H-18), 0.84 (3H, t, 6.4, H-22); ^{13}C NMR (600MHz, CDCl₃) δ : 176.1 (C-1), 36.1 (C-2), 81.7 (C-3), 37.2 (C-4), 39.3 (C-5), 85.1 (C-6), 127.2 (C-7), 141.6 (C-8), 42.4 (C-9), 42.7 (C-10), 133.3 (C-11), 131.7 (C-12), 25.6 (C-13), 14.0 (C-14), 23.9 (C-15), 10.5 (C-16), 32.8 (C-17), 7.8 (C-18), 23.1 (C-19), 11.6 (C-20), 27.8 (C-21), 12.2 (C-22); EIMS m/z 337(5), 321(10), 279(5), 223(5), 185(25), 97(40), 55(100); HREIMS m/z 337.2366 [(M-29)⁺, $C_{20}H_{33}O_4 \Delta - 3.7$ mmu]^[1]。

【来源】 海绵 *Plakortis* sp.^[1]

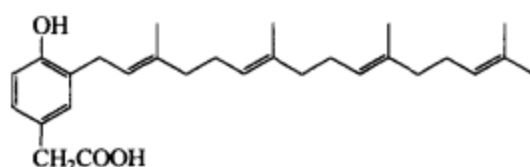
【分析方法】 样品甲醇提取, EtOAc、BuOH 萃取, EtOAc 部分硅胶柱层析 (hexane-EtOAc 9:1), Sephadex LH-20 柱层析 (MeOH-CHCl₃), HPLC (MeOH-H₂O-TFA 85:15:0.125) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 细胞毒活性, 抗人类的表皮癌细胞 KB IC₅₀ 0.4 μ g/mL, 老鼠的淋巴瘤细胞 L1210 IC₅₀ 1.1 μ g/mL^[1]。

【参考文献】 1. Fontana A, et al. Tetrahedron, 1998, 54: 2041

A0049 1,4-Dihydroxy-2-tetraprenylbenzene derivative

【结构式】



【分子式】 $C_{28}H_{40}O_3$

【相对分子质量】 424

【理化常数及谱学数据】 UV(MeOH) $\lambda_{\max}(\epsilon)$: 279(1064)nm; IR(KBr) $\nu_{\max}(\text{cm}^{-1})$: 3600~2500br, 3420, 1690, 1610, 1500, 1440, 1265; ^1H NMR(300MHz, CDCl_3) δ : 7.02(1H, dd, 7.5, 2.1, H-5), 7.01(1H, dd, 2.1, 0.9, H-3), 6.76(1H, dd, 7.5, 0.9, H-6), 5.32(1H, t, 7.2, H-2), 5.09(3H, m, H-6, H-10, H-14), 3.55(2H, s, H-7), 3.35(2H, d, 7.2, H-1), 2.16-1.94(12H, m, H-4, 5, 8, 9, 12, 13), 1.77(3H, s, Me-20), 1.68(3H, s, Me-17), 1.60(9H, s, Me-16, 18, 19); ^{13}C NMR(75MHz, CDCl_3) δ : 177.94(C-8), 153.78(C-1), 138.79(C-3), 135.57a(C-7), 134.90a(C-11), 131.26(C-2), 130.92(C-5), 128.38(C-3), 126.98(C-15), 125.27(C-4), 124.36b(C-14), 124.19b(C-10), 123.60b(C-6), 121.35(C-2), 116.02(C-6), 40.17(C-7), 39.68c(C-12), 39.65c(C-4, 8), 29.85(C-1), 26.72d(C-13), 26.56d(C-9), 26.38d(C-5), 25.68(C-17), 17.67(C-16), 16.24(C-20), 16.03e(C-18), 15.99e(C-19) (values with the same superscript may be interchanged); HRFABMS m/z 425.3055(calcd for $C_{28}H_{40}O_3$ m/z 425.3039)^[1].

【来源】 海绵 *Ircinia muscarum*^[1]

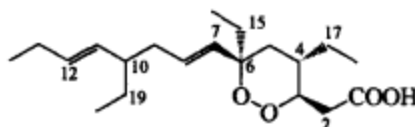
【分析方法】 样品 Me_2CO 提取, 硅胶柱层析 (CH_2Cl_2 , EtOAc, MeOH), CH_2Cl_2 部分硅胶柱层析 (CHCl_3 -MeOH), 反相硅胶柱层析 (MeOH- H_2O 9:1) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 酶抑制活性, 抑制酶 TOPO II 15 IC_{50} 5 $\mu\text{g}/\text{mL}$ ^[1]。

【参考文献】 1. Baz J P, et al. J Nat Prod, 1996, 59: 960

A0050 1,2-Dioxane peroxide acid

【结构式】



【分子式】 $C_{20}H_{34}O_4$

【相对分子质量】 338

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{24} - 78.5^\circ$ (c 0.0017, CHCl_3); IR(CHCl_3) $\nu_{\max}(\text{cm}^{-1})$: 2962, 2911, 2866, 1713, 1456, 968, 670; ^1H NMR(CDCl_3): 2.64(dd, $J = 3, 16$, H-2), 2.29(dd, $J = 9, 16$, H-2), 4.16(ddd, $J = 3, 9, 9$, H-3), 5.42(d, $J = 15$, H-7), 5.44(dt, $J = 6.5, 15$, H-8), 5.14(dd, $J = 8.5, 15$, H-11), 5.38(dt, $J = 6.5, 15$, H-12), 1.97(2H, q, $J = 7$, H-13), 0.95(3H, t, $J = 7.5$, H-14), 0.83(3H, t, $J = 7.5$, H-16), 0.89(3H, t, $J = 7.5$, H-18), 0.81(3H, t, $J = 7.5$, H-20); ^{13}C NMR(CDCl_3): 175.9(s, C-1), 36.1(t, C-2), 81.9(d, C-3), 36.8(d, C-4), 36.2(t, C-5), 84.3(s, C-6), 130.0(d, C-7), 132.7(d, C-8), 38.2(t, C-9), 44.5(d, C-10), 132.9(d, C-11), 132.1(d, C-12), 25.7(t, C-13), 14.1(q, C-14), 27.5(t, C-15), 7.3(q, C-16), 24.0(t, C-17), 10.5(q, C-18), 33.0(t, C-19), 11.6(q, C-20); HRFABMS m/z 361.2377 $[\text{M} + \text{Na}]^+$ (calcd for $C_{20}H_{34}O_4\text{Na}$ 361.2346)。

【来源】 海绵 *Plakinastrella onkodes*

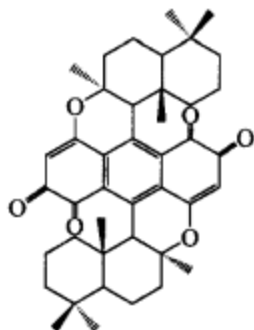
【分析方法】 海绵提取物以 1:1 EtOAc/ H_2O 分配, 含水层继续用正丁醇和水进行分配, 正丁醇层上硅胶柱层析, 正己烷/乙酸乙酯梯度洗脱。正己烷/乙酸乙酯 (6:4, 体积比) 洗脱部分以 RPHPLC (Vydac Protein and Peptide C-18 column, 30nm pore size, 10mm $\times$ 250mm) 进行纯化, 乙腈洗脱部分经 HPLC 继续纯化得到 1,2-Dioxane peroxide acid。

【生物活性与毒性】 抗真菌 *C. albicans* 的 MIC 值为 5 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 。

【参考文献】 1. Chen Y, et al. J Nat Prod, 2002, 65: 1509

A0051 Dipuuphedione

【结构式】



【分子式】 $C_{42}H_{52}O_6$

【相对分子质量】 652

【理化常数及谱学数据】 红色粉末, IR(KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 1690, 1658, 1630; 1H NMR(300MHz, $CDCl_3$) δ : 6.03(1H, s, H-16), 4.32(1H, s, H-9), 2.22(1H, dd, 14, 2.8, H-7), 1.72(1H, m, H-7), 1.64(2H, m, H-6), 1.45(1H, m, H-1), 1.34(3H, s, H-20), 1.29(2H, m, H-2), 1.10(1H, m, H-1), 1.09(1H, m, H-5), 1.04(1H, m, H-3), 0.90(3H, s, H-19), 0.79(3H, s, H-18), 0.76(1H, m, H-3), 0.56(3H, s, H-21); ^{13}C NMR(75MHz, $CDCl_3$) δ : 41.1(C-1), 18.0(C-2), 38.4(C-3), 33.4(C-4), 53.7(C-5), 18.1(C-6), 38.9(C-7), 81.0(C-8), 49.1(C-9), 41.0(C-10), 136.4(C-11), 130.8(C-12), 133.5(C-13), 186.3(C-14), 180.1(C-15), 108.8(C-16), 166.9(C-17), 21.8(C-18), 33.6(C-19), 28.8(C-20), 14.6(C-21); HRFABMS m/z , 653.3482, MH^+ , $\Delta + 3.7mmu^{[1]}$.

【来源】 海绵 *Hyrtios* sp. ^[1]

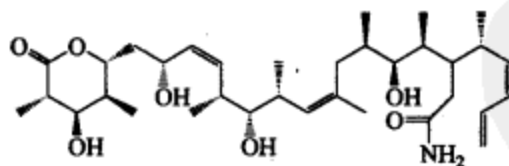
【分析方法】 样品用 CH_2Cl_2 提取, 硅胶柱层析(hexane-EtOAc), Sephadex LH-20(MeOH- $CHCl_3$ 8:2) 得到纯化合物^[1].

【生物活性与毒性】 细胞毒活性, KB cell, IC_{50} 3 $\mu g/mL$.

【参考文献】 1. Bourguet M L, et al. Tetrahedron Lett, 1996, 37: 3861

A0052 Discodermolide

【结构式】



【分子式】 $C_{34}H_{57}NO_7$

【相对分子质量】 591

【来源】 海绵 *Discodermia dissoluta*

【分析方法】 参见文献 [1, 2].

【生物活性与毒性】 初步实验显示, 该化合物具有免疫抑制作用和一般细胞毒活性^[3~5], 1996 年有报道称其与微管的结合能力强于紫杉醇^[6]。体内外进行小鼠卵巢癌和非小细胞肺癌实验显示, Discodermolide 和 Paclitaxel 具有协同作用^[7]。

【临床与实用价值】 进入 I 期临床治疗实体瘤。临床观察该化合物无剂量依赖型的毒副作用^[7]。

【参考文献】 1. Gunasekera S P, et al. J Org Chem, 1990, 55: 4912

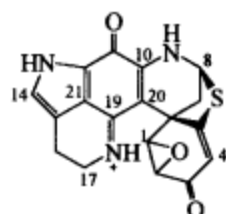
2. Gunasekera S P, et al. J Org Chem, 1991, 56: 1346

3. Longley R E, et al. Ann N Y Acad Sci, 1993, 696: 94

4. Longley R E, et al. Transplantation, 1991, 52: 650
5. Longley R E, et al. Transplantation, 1991, 52: 656
6. Ter Haar E, et al. Biochemistry, 1996, 35: 243
7. McDaid H M, et al. Clin Canc Res, 2003, 9 (Suppl): A249

A0053 Discorhabdin R

【结构式】



【分子式】 $C_{18}H_{14}N_3O_3S^+$

【相对分子质量】 352

【理化常数及谱学数据】 绿色固体; $[\alpha]^{25} + 161^\circ (c\ 0.105, \text{MeOH})$; UV(OH) λ_{max} (nm): 202(7600), 255(9000), 262(9200), 287(5400), 326(3500), 368(3800), 567(600); IR(KBr) ν_{max} : 3420(br) cm^{-1} , 1684(br) cm^{-1} ; $^1\text{H NMR}(\text{CCl}_3) \delta$: 4.08(d, $J = 3.6$, H-1), 4.51(d, $J = 3.6$, H-2), 6.06(s, H-4), 2.69(dd, $J = 2.5$, 12.2, H-7a), 2.35(d, $J = 12.2$, H-7b), 5.49(d, $J = 2.5$, H-8), 6.91(s, H-14), 2.93(ddd, $J = 17.1$, 13.2, 7.7, H-16a), 2.81(ddd, $J = 16.9$, 7.1, 2.8, H-16b), 3.78(ddd, $J = 14.2$, 7.7, 2.8, H-17a), 3.68(ddd, $J = 13.6$, 7.0, H-17b); $^{13}\text{C NMR}(\text{CCl}_3) \delta$: 65.2(C-1), 66.5(C-2), 184.9(C-3), 111.9(C-4), 172.2(C-5), 46.7(C-6), 35.3(C-7), 62.2(C-8), 146.9(C-10), 166.3(C-11), 123.2(C-12), 126.8(C-14), 118.1(C-15), 18.9(C-16), 51.2(C-17), 148.5(C-19), 98.9(C-20), 121.8(C-21); EIMS m/z 352(salt M^+); HREIMS m/z 352.0745(calcd for $C_{18}H_{14}N_3O_3S$, 352.0756)。

【来源】 海绵 *Negombata* sp.

【分析方法】 海绵的乙醇提取物经 C18 固相萃取 (10% 逐步稀释的甲醇/水洗脱), 接下来经 C18 HPLC (Phenomenex C18 Ultracarb 150mm $\times$ 10mm column), 30% $\text{H}_2\text{O}/\text{MeOH}/0.1\%$ TFA 洗脱得到化合物 Discorhabdin R。

【生物活性与毒性】 体外试验显示抗菌活性。

【参考文献】 1. Ford J R J, et al. J Nat Prod, 2000, 63: 1527

2. Kita Y, et al. Jpn Kokai Tokkyo Koho, 1992, JP04145066 A2 19920519 CA117: 191684

3. Munro M H G, et al. PCT Int Appl, 1988, 8800946 A1 19880211 CA110: 54771

4. Peng G, Diss Abstr Int B, 1992, 57: 3209

5. Hibino S, et al. Nat Prod Rep, 2001, 18: 66

6. Miller K, et al. Mar Biol (Berlin), 2001, 139: 235

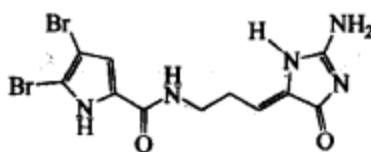
7. Tohma H, et al. Angew Chem Int Ed Eng, 2002, 41: 348

8. Tohma H, et al. J Am Chem Soc, 2003, 125: 11235

9. Gunasekera S P, et al. J Nat Prod, 2003, 66: 1615

A0054 Dispacamide A

【结构式】



【分子式】 $C_{11}H_{11}Br_2N_5O_2$

【相对分子质量】 405

【理化常数及谱学数据】 无色无定形粉末固体; UV (MeOH) $\lambda_{\max}$: 233nm, 274nm; IR (KBr) $\nu_{\max}$: 1730 cm^{-1} , 1675 cm^{-1} ; ^1H NMR (500MHz, MeOH- d_4) δ : 10.43 (1H, brs, NH-1), 7.75 (1H, brs, NH-7), 7.41 (1H, brs, NH-15), 6.82 (1H, brs, H-4), 5.75 (1H, t, 8.1, H-10), 5.45 (2H, s, NH-16), 3.47 (2H, t, 6.8, H-8), 2.53 (2H, q, 7.5, H-9); ^{13}C NMR (125MHz, MeOH- d_4) δ : 106.6 (C-2), 99.7 (C-3), 114.4 (C-4), 129.0 (C-5), 162.1 (C-6), 39.5 (C-8), 28.6 (C-9), 111.4 (C-10), 136.9 (C-11), 179.1 (C-12), 168.3 (C-14); FABMS m/z 404/406/408 (1 : 2 : 1) $[\text{M} + \text{H}]^+$; HRFABMS m/z 405.9202 $[\text{M} + \text{H}]^+$, (calcd for $\text{C}_{11}\text{H}_{11}^{79}\text{Br}^{81}\text{BrN}_5\text{O}_2$, 405.9259^[1]).

【来源】 海绵 *Agelas*^[1]

【分析方法】 样品用 MeOH 提取, BuOH 萃取部分中压硅胶柱层析 (MeOH-EtOAc), HPLC (MeOH- H_2O 1 : 1) 得到纯化合物^[1]。

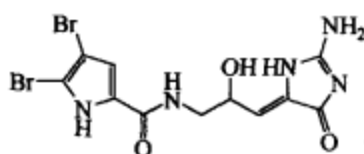
【生物活性与毒性】 抗血清素和抗组胺活性。

【参考文献】 1. Cafieri F, et al. Tetrahedron Lett, 1996, 37: 3587

2. Lindel T, et al. Tetrahedron Lett, 1997, 38: 8935
3. Olofson A, et al. J Org Chem, 1998, 63: 1248
4. Meijer L, et al. Chem Biol, 2000, 7: 51
5. Uemoto H, et al. J Nat Prod, 2000, 63: 1045
6. Lindel T, et al. J Chem Ecol, 2000, 26: 1477
7. Fresneda P M, et al. Tetrahedron Lett, 2001, 42: 851
8. Hoffmann H, et al. Synthesis, 2003, 1753

A0055 Dispacamide C

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{11}\text{H}_{11}\text{Br}_2\text{N}_5\text{O}_3$

【相对分子质量】 421

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D^{25} 0^\circ$ (c 0.01, MeOH); UV (MeOH) $\lambda_{\max}$ (nm) (ϵ): 227 (11200), 272 (12500); IR (KBr) $\nu_{\max}$ (cm^{-1}): 3580, 1728, 1672; ^1H NMR (500MHz, CD_3OD) δ : 10.35 (1H, brs, H-1), 8.25 (1H, s, OH), 7.82 (1H, brs, H-7), 7.49 (1H, s, H-15), 6.85 (1H, s, H-4), 6.42 (2H, s, H-16), 5.72 (1H, d, 5.6, H-10), 4.67 (1H, dt, 6.9, 5.5, H-9), 3.50 (1H, dd, 13.3, 6.9, H-8a), 3.45 (1H, dd, 13.3, 5.4, H-8b); ^{13}C NMR (125 MHz, CD_3OD) δ : 106.2 (C-2), 97.2 (C-3), 114.6 (C-4), 128.5 (C-5), 162.5 (C-6), 46.2 (C-8), 69.5 (C-9), 113.0 (C-10), 135.7 (C-11), 179.5 (C-12), 168.5 (C-15); FABMS m/z $[\text{M} + \text{H}]^+$ 420, 422, 424 (intensity 1 : 2 : 1); HRFABMS meas 419.9338, calc. 419.9307 for $\text{C}_{11}\text{H}_{11}^{79}\text{Br}_2\text{N}_5\text{O}_4$ ^[1]。

【来源】 海绵 *Agelas*^[1]

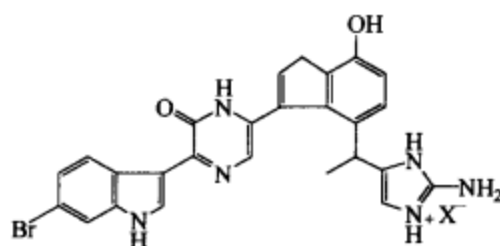
【分析方法】 样品分别 MeOH 提取, BuOH 萃取部分 RP-18 硅胶柱层析 (H_2O -MeOH/ H_2O 1 : 1-MeOH/ CHCl_3 1 : 1- CHCl_3), MPLC 硅胶柱层析 (MeOH-EtOAc), HPLC (MeOH- H_2O 1 : 1) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 对于离体豚鼠回肠组胺诱导收缩实验呈现抗组胺活性, 对组胺受体表现出可逆的非竞争性拮抗, 活性适中。

【参考文献】 1. Cafieri F, et al. Bioorg Med Chem Lett, 1997, 7: 2283

A0056 Dragmacidin D

【结构式】



【分子式】 $C_{26}H_{22}BrN_6O_2^+X^-$

【相对分子质量】 529

【理化常数及谱学数据】 UV λ_{max} (nm): 213(43000), 270(14400), 278sh, 383(20700); 1H NMR (DMSO- d_6) δ : 7.50(s, H-5), 11.75(d, $J = 2.7$ Hz, H-1'), 8.80(d, $J = 2.7$ Hz, H-2'), 8.58(d, $J = 8.6$ Hz, H-4'), 7.27(dd, $J = 8.6, 1.7$ Hz, H-5'), 7.69(d, $J = 1.7$ Hz, H-7') 11.62(d, $J = 2.6$ Hz, H-1''), 7.52(d, $J = 2.6$ Hz, H-2''), 6.61(s, H-5''), 6.61(s, H-6''), 11.85(bs, H-1'''), 11.88(bris, H-3'''), 6.37(s, H-4'''), 4.33(q, $J = 6.8$ Hz, H-6'''), 1.33(d, $J = 6.8$ Hz, H-7'''), 7.34(bris, 2''-NH $_2$); ^{13}C NMR (DMSO- d_6) δ : 155.10(s, C-2), 148.46(s, C-3), 123.87(d, C-5), 131.16(s, C-6), 131.51(s, C-2'), 112.17(s, C-3'), 125.25(s, C-3a'), 124.60(d, C-4'), 123.32(d, C-5'), 115.11(s, C-6'), 114.55(d, C-7'), 137.44(s, C-7a'), 127.35(d, C-2''), 107.52(s, C-3''), 126.94(s, C-3a''), 125.89(s, C-4''), 118.56(d, C-5''), 106.54(d, C-6''), 143.10(s, C-7''), 125.59(s, C-7a''), 147.48(s, C-2'''), 108.98(d, C-4'''), 131.43(s, C-5'''), 31.22(d, C-6'''), 20.48(q, C-7''').

【来源】 海绵 *Spongosorites*

【分析方法】 样品乙醇粗提物经反相柱层析色谱 (Water-CAN-TFA 系统 160 : 40 : 0.1, 120 : 80 : 0.1, 80 : 120 : 0.1, 40 : 160 : 0.1) 分离, 纯化获得活性成分 Dragmacidin D.

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 P388 和 A549 的生长。

【参考文献】 1. Wright A E, et al. J Org Chem, 1992, 57: 4772

2. Kohmoto S, et al. J Org Chem, 1988, 53: 3116

3. McConnell O J, et al. US Pat Appl, 1994

4. Capon R J, et al. J Nat Prod, 1998, 61: 660

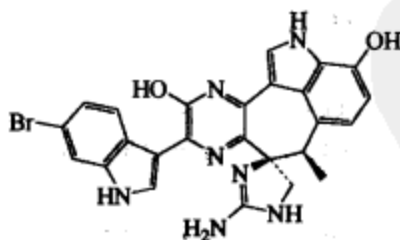
5. Wright A E, et al. Methods Biotechnol, 1998, 4: 365

6. Gu X, et al. Youji Huaxue, 2000, 20: 168

7. Yang C G, et al. Tetrahedron Lett, 2002, 43: 1063

A0057 Dragmacidin E

【结构式】



【分子式】 $C_{25}H_{30}BrN_7O_2$

【相对分子质量】 530

【理化常数及谱学数据】 黄色荧光固体; $[\alpha]_D^{25} - 34^\circ$ (c 0.9, EtOH); UV (EtOH) λ_{max} (nm) (ϵ): 211 (46200), 281(7530), 427 (27700); UV (EtOH + HCl) λ_{max} : 427nm (26400); UV (EtOH + NaOH) λ_{max} : 410nm (26100); IR (film) ν_{max} (cm^{-1}): 3350, 1685, 1640; 1H NMR (500MHz, DMSO- d_6) δ : 12.07(1H, brs, NH-1''), 11.78(1H, brs, NH-1'), 9.95(1H, brs, OH-7'), 9.31(1H, brs, NH-1), 8.74(1H, d, 2.4, H-2'), 8.65(1H, d, 2.4, H-4'), 8.26(1H, d, 2.4, H-2''), 7.91(1H, s, NH-2''), 7.64(1H, d, 1.8, H-7'), 7.45(1H, dd, 8.4, 1.8, H-5'), 6.85(1H, d, 7.8, H-5''), 6.62(1H, d, 7.8, H-6''), 3.46(1H, q, 7.2, H-6''), 3.17(1H, d,

10.2, H-4^W), 3.02(1H, d, 10.2, H-4^W), 1.06(3H, d, 7.2, H-7^W); ¹³C NMR(125MHz, DMSO-d₆) δ: 154.9(C-2), 138.4(C-3), 129.1(C-5), 131.0(C-6), 131.1(C-2), 112.1(C-3), 124.9(C-3a), 125.5(C-4), 123.5(C-5), 114.8(C-6), 114.0(C-7), 137.2(C-7a), 126.0(C-2), 106.6(C-3), 122.4(C-3a), 124.5(C-4), 121.4(C-5), 106.6(C-6), 143.2(C-7), 126.4(C-7a), 158.7(C-2), 55.2(C-4), 70.7(C-5), 48.8(C-6), 19.7(C-7); ¹³C NMR(100MHz, CD₃OD) δ: 160.6(C-2), 157.1(C-2), 144.6(C-7), 132.0(C-2), 138.7(C-7a), 128.3(C-7a), 126.3(C-3a), 126.2(C-3a), 126.1(C-2), 125.3(C-4), 124.7(C-5), 123.9(C-4), 123.0(C-5), 116.8(C-6), 115.2(C-7), 113.8(C-3), 108.2(C-3), 108.2(C-6), 72.1(C-5), 56.3(C-4), 51.1(C-6), 19.7(C-7); ¹³C NMR(100MHz, CD₃OD + DCI) δ: 160.5(C-2), 157.0(C-2), 144.4(C-7), 138.8(C-7a), 138.37(C-3), 132.2(C-2), 131.0(C-6), 129.4(C-5), 28.3(C-7a), 126.5(C-3a), 126.2(C-3a), 125.5(C-2), 125.5(C-4), 124.8(C-5), 124.0(C-4), 122.9(C-5), 116.8(C-6), 115.4(C-7), 113.8(C-3), 108.3(C-3), 108.3(C-6), 72.1(C-5), 56.4(C-4), 51.4(C-6), 19.9(C-7); ESIMS *m/z* 532/530(M⁺ + H, 60); (+)-FABMS *m/z* 532/530(M⁺ + H; 4); HREIMS 529.0862(C₂₅H₂₀BrN₇O₂ requires 529.0862)^[1].

【来源】 海绵 *Spongosorites* sp.^[1]

【分析方法】 样品乙醇提取, BuOH 萃取部分 Sephadex LH-20 (MeOH) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 丝氨酸-苏氨酸蛋白磷酸化酶抑制活性, 对 PP1 和 PP2A 均有抑制活性^[1]。

【参考文献】 1. Capon R J, et al. J Nat Prod, 1998, 61: 660

2. Kohmoto S, et al. J Org Chem, 1988, 53: 3116

3. McConnell O J, et al. US Pat Appl, 1994

4. Capon R J, et al. J Nat Prod, 1998, 61: 660

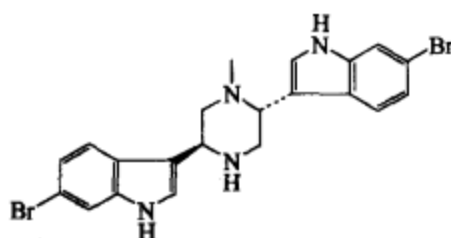
5. Wright A E, et al. Methods Biotechnol, 1998, 4: 365

6. Gu X, et al. Youji Huaxue, 2000, 20: 168

7. Yang C G, et al. Tetrahedron Lett, 2002, 43: 1063

A0058 Dragmacidon A

【结构式】



【分子式】 C₂₁H₂₀N₄Br₂

【相对分子质量】 486/488/490

【理化常数及谱学数据】 IR(film) $\nu_{\max}$ (cm⁻¹): 3413, 3284, 2947, 2837, 2790, 1615, 1546; HREIMS *m/z*: [M⁺] 486.0042/488.0027/490.0027 (C₂₁H₂₀N₄Br₂); ¹H NMR(400MHz, acetone-d₆) δ: 4.43(dd, *J* = 10.3, 2.3Hz, H-2), 2.39(dd, *J* = 10.3, 11.9Hz, H-3ax), 3.05(brm, H-3eq), 3.46(dd, *J* = 3.9, 11.3Hz, H-5), 3.33(dd, *J* = 11.3, 11.9Hz, H-6ax), 3.13(dd, *J* = 3.9, 11.9Hz, H-6eq), 10.5(bs, 1'NH), 7.27(s, H-2'), 6.70(s, H-5'), 10.8(bs, 1''NH), 7.36(d, *J* = 1.8Hz, H-2''), 7.48(d, *J* = 8.6Hz, H-4''), 7.13(dd, *J* = 1.8, 8.6Hz, H-5''), 7.59(d, *J* = 1.8Hz, H-7''), 2.04(s, N4Me); ¹³C NMR(75MHz, acetone-d₆) δ: 44.2(q), 54.1(d), 54.3(t), 63.3(d), 64.2(t), 115.0(d), 115.0(d), 115.1(s), 115.2(s), 117.5(s), 118.8(s), 122.1(d), 122.4(d), 122.4(d), 122.6(d), 123.9(d), 124.9(s), 125.0(d), 126.6(s), 138.7(s), 138.8(s).

【来源】 海绵 *Hexadella* sp.

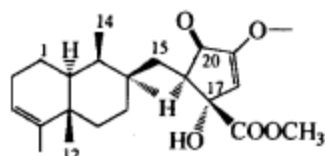
【分析方法】 甲醇粗提物的乙酸乙酯可溶部分经 Sephadex LH-20 (MeOH/CH₂Cl₂ 7:3), 硅胶柱层析色谱 (EtOAc/hexane 7:3, EtOAc/MeOH 4:1), 反相柱层析色谱 (MeOH/H₂O-MeOH) 分离, 纯化, 获得活性成分 Dragmacidon A.

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 L1210 的生长。

【参考文献】 1. Morris S A, et al. Tetrahedron, 1990, 46: 715

A0059 Dysidenone A

【结构式】



【分子式】 C₂₃H₃₄O₅

【相对分子质量】 390

【理化常数及谱学数据】 无色粉末; UV(MeOH) $\lambda_{\max}$: 250(3.6) nm; ¹H NMR(CD₃OD) δ : 5.14(brs, H-3), 0.92(s, H-11), 1.56(s, H-12), 1.01(s, H-13), 0.82(d, H-14), 2.65(t, H-16), 6.01(s, H-18), 3.75(s, H-22), 3.75(s, -OCH₃); ¹³C NMR(CD₃OD) δ : 24.5(C-1), 26.7(C-2), 120.5(C-3), 143.7(C-4), 36.8(C-5), 31.9(C-6), 29.5(C-7), 35.3(C-8), 42.8(C-9), 40.5(C-10), 17.7(C-11), 19.8(C-12), 23.8(C-13), 11.6(C-14), 37.6(C-15), 54.9(C-16), 80.5(C-17), 122.3(C-18), 158.9(C-19), 199.8(C-20), 174.6(C-21), 53.5(C-22), 57.3(-OCH₃); HRFABMS m/z , 391.2462(calcd for C₂₃H₃₅O₅, 391.2484)。

【来源】 海绵 *Dysidea* sp.

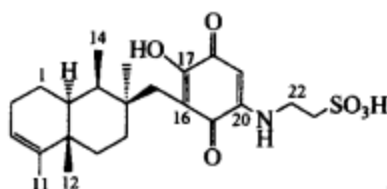
【分析方法】 海绵的甲醇提取物用 CHCl₃ 萃取, CHCl₃ 层经中压硅胶柱层析 (Merck Kiesegel 60, 230~400 mesh, 0.2% MeOH/CH₂Cl₂) 分离后继续用 RPHPLC 纯化, 溶剂为 0.1% TFA 75% 含水 MeOH, 得到化合物 Dysidenone A。

【生物活性与毒性】 选择性抑制人滑液磷酸酶 A2 (PLA₂) 的 IC₅₀ 值为 4.5 μ mol/L。此外还能抑制某些人白细胞功能, 如胰肽酶 A 释放导致的脱粒过程和 TPA 刺激嗜中性粒细胞产生的化学发光作用。

【参考文献】 1. Giannini C, et al. J Nat Prod, 2001, 64: 612

A0060 Dysidine

【结构式】



【分子式】 C₂₃H₃₃NO₆S

【相对分子质量】 451

【理化常数及谱学数据】 粉红色针晶; $[\alpha]_D^{25} + 19$ (c 1, MeOH); UV(MeOH) $\lambda_{\max}$: 282(4.43) nm, 334(4.15) nm; ¹H NMR(CD₃OD) δ : 5.35(1H, s, H-19), 5.16(1H, bs, H-3), 3.62(2H, t, $J = 7.0$ Hz, H-22), 3.13(2H, t, $J = 7.0$ Hz, H-23), 2.50(1H, d, $J = 12.5$ Hz, H-15a), 2.26(1H, d, $J = 12.5$ Hz, H-15b), 2.07(2H, m, H-2), 1.97(1H, m, H-10), 1.84(1H, m, H-1a), 1.82(1H, m, H-7a), 1.56(3H, s, H-11), 1.48(1H, m, H-9), 1.46(1H, m, H-6a), 1.31(1H, m, H-6b), 1.11(1H, m, H-7b), 1.04(3H, d, $J = 7$ Hz, H-14), 1.00(3H, s, H-12), 0.93(3H, d, $J = 7.0$ Hz, H-13); ¹³C NMR(CD₃OD) δ : 182.4(s, C-21), 181.0(s, C-18), 170.3(s, C-17), 153.4(s, C-20), 145.0(s, C-4), 121.5(d, C-3), 114.5(s, C-16), 92.6(d, C-19), 49.8(t, C-23), 46.6(d, C-9), 42.3(d, C-10), 40.4(s, C-8), 39.7(t, C-22), 39.1(s, C-5), 34.8(t, C-15), 33.4(t, C-6), 29.8(t, C-7), 27.8(t, C-2), 25.9(t, C-1), 24.3(q, C-13), 20.3(q, C-12), 18.0(q, C-11), 12.8(q, C-14); HRFABMS m/z , 452.2122(calcd for C₂₃H₃₄NO₆S, 452.2107)。

【来源】 海绵 *Dysidea* sp.

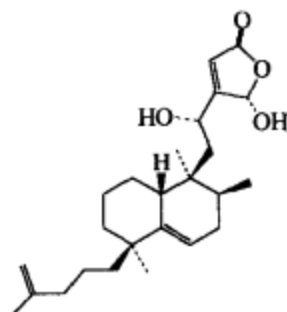
【分析方法】 海绵的甲醇提取物用 CHCl_3 萃取, CHCl_3 层经中压硅胶柱层析 (Merck Kiesegel 60, 230~400 mesh, 0.2% $\text{MeOH}/\text{CH}_2\text{Cl}_2$) 分离后继续用 RPHPLC 纯化, 溶剂为 0.1% TFA 75% 含水 MeOH , 得到化合物 Dysidine。

【生物活性与毒性】 选择性抑制人滑液磷酸酶 A2 (PLA2) 的 IC_{50} 值为 $2.0\mu\text{mol/L}$, 抑制磷酸酯酶 A2 和白血病细胞生长。

【参考文献】 1. Giannini C, et al. J Nat Prod, 2001, 64: 612

A0061 Dysidiolide

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{25}\text{H}_{38}\text{O}_4$

【相对分子质量】 402

【理化常数及谱学数据】 无色晶体; mp $186\sim 187^\circ\text{C}$; $[\alpha]_{\text{D}}^{25} - 11.1^\circ$ (c 0.6, $\text{MeOH}/\text{CH}_2\text{Cl}_2$, 1:1); UV (MeOH) λ_{max} : 203nm (ϵ 19000); IR (KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3335, 2916, 1741, 1649, 1447, 1275, 1247, 1131, 1076, 947; ^1H NMR (500MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ : 7.80 (1H, d, 6.0, 25-OH), 6.08 (1H, d, 6.0, H-25), 5.91 (1H, s, H-2), 5.12 (1H, d, 5.7, OH-4), 4.63 (1H, s, H-21a), 4.60 (1H, s, H-21b), 4.38 (1H, dt, 5.7, 8.6, H-4), 1.62 (3H, s, H-20), 1.51 (3H, s, H-24), 0.93 (3H, s, H-22), 0.81 (3H, d, 6.7, H-23); ^{13}C NMR (125.7MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ : 170.4 (C-1), 115.9 (C-2), 175.3 (C-3), 63.0 (C-4), 33.0 (C-7), 115.5 (C-9), 142.3 (C-10), 145.3 (C-19), 22.0 (C-20), 110.0 (C-21), 25.9 (C-22), 14.9 (C-23), 22.0 (C-24), 97.6 (C-25), 21.5, 21.6, 21.7, 23.5, 27.0, 29.8, 31.0, 36.6, 37.9, 39.0, 41.0 (C-5~6, 8, 11~18); HRFABMS, m/z $\text{C}_{25}\text{H}_{38}\text{O}_4$ ($\text{M}+\text{H}$) $^+$ m/z 403.2531, $\Delta + 0.4\text{ mmu}^{[1]}$ 。

【来源】 海绵 *Dysidea etheria*^[1]

【分析方法】 样品 EtOH 提取, H_2O -BuOH 萃取, BuOH 部分硅胶柱层析 (CH_2Cl_2 - MeOH), 反相 HPLC (MeOH - H_2O 77.5:22.5) 得纯化合物^[1]。

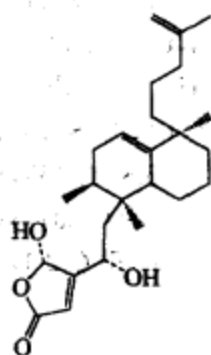
【生物活性与毒性】 具有细胞毒样活性, 抗人类肺癌细胞 A-549 和鼠类白血病细胞 P388 IC_{50} 值分别为 $4.7\mu\text{mol/L}$ 和 $1.5\mu\text{mol/L}^{[1]}$ 。

【参考文献】 1. Gunasekera S P, et al. J Am Chem Soc, 1996, 118: 8759

2. Miyaoka H, et al. J Org Chem, 2003, 68: 3476

A0062 Dysidiolide B

【结构式】



【分子式】 $C_{25}H_{38}O_4$

【相对分子质量】 402

【理化常数及谱学数据】 无色晶体; mp 186~187°C; $[\alpha]_D^{24} - 11.1^\circ$ (c 0.6, CH_2Cl_2/CH_3OH , 1:1); UV (MeOH) $\lambda_{max}(\epsilon)$: 203(19000) nm; IR (KBr) $\nu_{max}(cm^{-1})$: 3335, 2916, 1741, 1649, 1447, 1275, 1247, 1131, 1076, 947; 1H NMR(500MHz, $DMSO-d_6$) δ : 0.81(3H, d, 6.7, H-23), 0.93(3H, s, H-22), 1.51(3H, brs, H-24), 1.62(3H, s, H-20), 4.38, (4.51)(1H, dt, 5.7, 8.6, H-4), 4.60, 4.63(2H, 2s, H-21), 5.12, (5.23)(1H, d, 5.7, 4-OH), 5.91(1H, s, H-2), 6.08(1H, d, 6.0, H-25), 7.80(1H, d, 6.0, 25-OH); ^{13}C NMR(125MHz, $DMSO-d_6$) δ : 14.9(q, C-23), 21.5(br), 21.6(t), 21.7(t), 22.0(q, C-20), 22.0(q, C-24), 23.5(br), 25.9(q, C-22), 27.0(br), 29.8(br), 31.0(br), 33.0(d, C-7), 36.6(br), 37.9(t), 39.0(br), 41.0(br), 63.0, (64.4)(d, C-4), 97.6, (98.1)(d, C-25), 110.0(t, C-21), 115.5(d, C-9), 115.9, (116.2)(d, C-2), 142.3(s, C-10), 145.3(s, C-19), 170.4, (170.5)(s, C-1), 173.5, (175.5)(s, C-3); HRFABMS: m/z confirmed the formula $C_{25}H_{38}O_4$ [(M+H) $^+$ m/z 403.2531, $\Delta = 0.4$ mmu]^[1]。

【来源】 海绵 *Dysidea etheria*^[1]

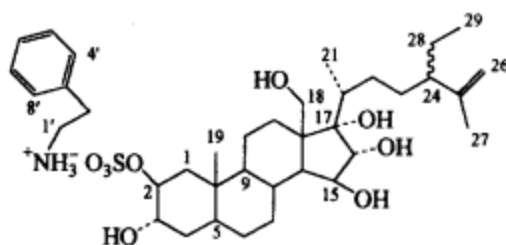
【分析方法】 样品用 EtOH 提取, BuOH 萃取部分硅胶柱层析 (CH_2Cl_2 -MeOH), HPLC (MeOH- H_2O) 67.5:22.5) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 抗菌活性, 抗人类的肺癌细胞 A-549 和老鼠的白血病细胞 P388 IC_{50} 分别为 4.7 $\mu mol/L$ 和 1.5 $\mu mol/L$ ^[1]。

【参考文献】 1. Gunasekera S P, et al. J Am Chem Soc, 1996, 118: 8759

A0063 Echinoclasterol sulfate

【结构式】

【分子式】 $C_{37}H_{61}NSO_9$

【相对分子质量】 699

【理化常数及谱学数据】 1H NMR(600MHz, C_5D_5N) δ : 1.87(H, dd, $J = 14.3, 4.1$ Hz, H-1a), 2.50(H, brd, $J = 12.7$ Hz, H-1b), 5.46(H, brs, H-2), 4.85(H, brs, H-3), 1.56, 2.10(2H, m, H-4), 2.13(H, m, H-5), 1.24, 1.36(2H, m, H-6), 1.12(H, dq, $J = 4.1, 11.8$ Hz, H-7a), 2.38(H, dq, $J = 2.9, 12.4$ Hz, H-7b), 2.15(H, dt, $J = 3.5, 11.2$ Hz, H-8), 1.01(H, m, H-9), 1.61, 1.31(2H, m, H-11), 2.24, 1.96(2H, m, H-12), 2.28(H, dd, $J = 12.0$ Hz, H-18), 4.44(H, d, $J = 6.0$ Hz, H-15), 4.65(H, s, H-16), 4.32, 3.96(2H, d, $J = 12.0$ Hz, H-18), 1.28(3H, s, H-19), 2.64(H, ddq, $J = 2.3, 10.4, 6.6$ Hz, H-20), 1.35(3H, d, $J = 6.6$ Hz, H-21), 1.45, 2.10(2H, m, H-22), 1.35, 1.55(2H, m, H-23), 1.92(H, m, H-24), 4.77(H, d, $J = 2.7$ Hz, H-26a), 4.74(H, dd, $J = 1.4, 2.7$ Hz, H-26b), 1.54(3H, s, H-27), 1.29(H, m, H-28), 0.75(3H, t, $J = 7.3$ Hz, H-29), 3.61(2H, t, $J = 8.0$ Hz, H-1'), 3.32(2H, t, $J = 8.0$ Hz, H-2'), 7.35(H, d, $J = 7.0$ Hz, H-4', 8'), 7.25(H, t, $J = 7.0$ Hz, H-5', 7'), 7.19(H, t, $J = 7.0$ Hz, H-6'), ^{13}C NMR(75MHz, C_5D_5N): 38.6(C-1), 78.2(C-2), 68.4(C-3), 34.6(C-4), 38.1(C-5), 28.9(C-6), 31.8(C-7), 31.3(C-8), 56.6(C-9), 36.7(C-10), 21.8(C-11), 31.8(C-12), 53.3(C-13), 52.5(C-14), 76.9(C-15), 86.7(C-16), 83.9(C-17), 62.0(C-18), 14.2(C-19), 39.3(C-20), 15.1(C-21), 29.4(C-22), 31.8(C-23), 49.6(C-24), 147.8(C-25), 113.2(C-26), 18.0(C-27), 27.0(C-28), 12.3(C-29), 41.6(C-1'), 34.6(C-2'), 138.0(C-3'), 129.5(C-4', 8'), 129.2(C-5', 7'), 127.4(C-6')。

【来源】 南澳大利亚海绵 *Echinocalthria subhispidia*

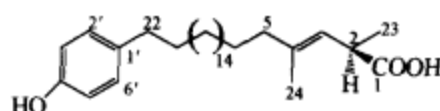
【分析方法】 海绵的甲醇提取物在水和氯仿间分配，水层用正丁醇萃取，正丁醇层上 ODS flash 柱 (75% 甲醇-水)，再使用反相 HPLC (50% 甲醇-水) 纯化得到。结构通过 (HR) MS、IR 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 对 PC-9 人肺癌细胞的抑制作用， $\text{IC}_{50} = 600 \mu\text{mol/L}$ 。

【参考文献】 1. Li H, et al. Tetrahedron Lett, 1993, 34 (36): 5733

A0064 Elenic acid A

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{30}\text{H}_{50}\text{O}_3$

【相对分子质量】 458

【理化常数及谱学数据】 白色无定形粉末; $[\alpha] - 27.2^\circ$ (c 2.2, CHCl_3); HREIMS m/z 458.3759 $[\text{M}]^+$; EIMS m/z (rel. int.) 458 ($[\text{M}]^+$, 4.3), 440 (5.7), 412 (14), 107 (100); IR (MeOH) ν_{max} (cm^{-1}): 3684, 3619, 3016, 1709, 1602, 1518, 1045; UV (MeOH) λ_{max} : 250 nm; ^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) δ : 3.35 (H, dq, $J = 9.7$ Hz, H-2), 5.16 (H, dq, $J = 9.3, 0.9$ Hz, H-3), 1.98 (2H, t, $J = 7.5$ Hz, H-5), 1.36 (2H, q, $J = 7.1$ Hz, H-6), 1.25 (28H, brs, H-7 ~ H-20), 1.56 (2H, q, $J = 7.2$ Hz, H-21), 2.52 (2H, t, $J = 7.5$ Hz, H-22), 1.22 (3H, d, $J = 7$ Hz, H-23), 1.66 (3H, d, $J = 1.2$ Hz, H-24), 7.01 (2H, d, $J = 7$ Hz, H-2', H-6'), 6.76 (2H, d, $J = 6.7$ Hz, H-3', H-5'); ^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3): 180.5 (C-1), 38.6 (C-2), 122.8 (C-3), 138.7 (C-4), 39.5 (C-5), 27.7 (C-6), 29.2 ~ 29.7 (C-7 ~ C-20), 31.7 (C-21), 35.0 (C-22), 17.9 (C-23), 16.3 (C-24), 135.1 (C-1'), 129.4 (C-2', C-6'), 115.0 (C-3', C-5'), 153.5 (C-4').

【来源】 印度尼西亚海绵 *Plakinastrella* sp.

【分析方法】 海绵的提取物在正己烷和甲醇间分配，甲醇层经高速逆流层析 (HSCCC) (乙酸乙酯-庚烷-甲醇-水 7:4:4:3) 分成 4 段，第一段 (活性段) 经 flash 硅胶柱 (正己烷-乙酸乙酯 9:1 到乙酸乙酯-乙酸乙酯 1:1) 梯度洗脱，最后经反复反相 HPLC (甲醇) 得到纯品。平面结构通过 (HR) MS、IR、UV 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。立体结构采用化学衍生法和 NMR 相结合的方法确定。

【生物活性与毒性】 1. 对肿瘤细胞的抑制 (IC_{50} , $\mu\text{g/mL}$): P-388(5), A-549(5), MEL-28(5)。2. 拓扑异构酶-II 抑制剂, $\text{IC}_{50} = 0.1 \mu\text{g/mL}$ 。

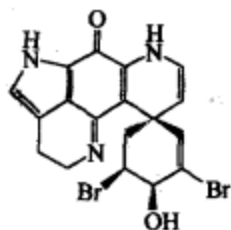
【参考文献】 1. Elen G Juagdan, et al. Tetrahedron Lett, 1995, 36 (17): 2905

2. Takanashi S, et al. J Chem Soc Perkin Trans 1, 1998, 1603

3. Hoyer R C, et al. J Org Chem, 1999, 64: 2450

A0065 Epinardin C

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{18}\text{H}_{15}\text{Br}_2\text{N}_3\text{O}_2$

【相对分子质量】 465

【理化常数及谱学数据】 绿色粉末; UV(MeOH) $\lambda_{\max}$ (nm) (ϵ): 210(11400), 250(5900), 290(4400), 370(3200), 535(374); CD(CH₃CN): +1.43(647), 0.00(414), -0.15(405), 0.00(396), +3.53(346), 0.00(302), -4.03(277), -3.77(256), -3.43(225); ¹H NMR(500MHz, Me₂CO-d₆) δ : 2.45(1H, ddt, 13.7, 4.7, 1.2, H-1a), 3.40(1H, t, 13.7, H-1b), 4.70(1H, ddd, 13.7, 4.7, 2.4, H-2), 4.13(1H, brs, H-3), 6.28(1H, brs, H-5), 4.68(1H, d, 7.4, H-7), 6.25(1H, d, 7.4, H-8), 7.13(1H, brs, H-14), 2.75(2H, brs, H-16), 3.92(1H, ddd, 16.8, 8.8, 7.8, H-17), 4.04(1H, dt, 16.8, 7.6, 7.6, H-17); ¹³C NMR(125MHz, Me₂CO-d₆) δ : 42.6(C-1), 49.4(C-2), 73.6(C-3), 114.8(C-4), 135.9(C-5), 42.8(C-6), 105.5(C-7), 121.0(C-8), 137.1(C-10), 168.4(C-11), 122.3(C-12), 123.2(C-14), 117.5(C-15), 17.4(C-16), 48.4(C-17), 155.6(C-19), 107.8(C-20), 122.2(C-21); FABMS m/z 464/466/468(1:2:1) [M+H]⁺ [1].

【来源】 海绵, 未定种属 [1].

【分析方法】 样品用 EtOH 提取, RP-18 硅胶柱层析 (MeOH-H₂O 8:2) 得到纯化合物 [1].

【生物活性与毒性】 细胞毒活性, L1210 IC₅₀ 1.7 μ g/mL; L1210/DX IC₅₀ 6.8 μ g/mL [1].

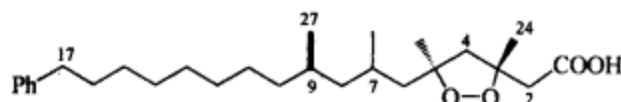
【参考文献】 1. Ambrosio M, et al. Tetrahedron, 1996, 52: 8899

2. Ding Q Z, et al. Curr Med Chem, 1999, 6: 1

3. Alvarez M, et al. Recent Res Dev Org Bioorg Chem, 1999, 3: 29

A0066 Epiplakinic acid G

【结构式】



【分子式】 C₂₇H₄₄O₄

【相对分子质量】 432

【理化常数及谱学数据】 colorless oil; $[\alpha]_D^{25}$ -17.2° (c 0.3, MeOH); UV(MeOH): 255nm, 260nm, 269nm; IR(film): 3300cm⁻¹ (br), 1705cm⁻¹, 1450cm⁻¹; ¹H NMR(CDCl₃; 300MHz) δ : 7.24(t, 2H, J = 7.5Hz), 7.18(m, 3H), 2.77(d, 1H, J = 16Hz, H-2), 2.73(d, 1H, J = 16Hz, H-2), 2.59(t, 2H, J = 8Hz, H-2~H-17), 2.49(d, 1H, J = 13Hz, H-4), 2.22(d, 1H, J = 13Hz, H-4), 1.46(s, 3H, Me-24), 1.33(s, 3H, Me-25), 0.95(d, 3H, J = 6.5Hz, Me-26), 0.83(d, 3H, J = 7Hz, Me-27); ¹³C NMR(MeOH-d₄, 400MHz) δ : 174.3(C-1), 143.8(C-18), 129.2(C-20, 22), 129.0(C-19, 23), 126.4(C-21), 87.8(C-5), 84.9(C-3), 58.3(C-4), 47.9(C-8), 47.5(C-6), 45.3(C-2), 37.9(C-10), 36.9(C-17), 32.7(C-15), 31.1, 31.0, 30.7(C-9), 30.6, 30.3, 28.1(C-7), 27.9(C-16), 24.8(C-24), 24.1(C-25), 22.2(C-26), 20.7(C-27); ESIMS(+ve) m/z 455 [M+Na]⁺, (-ve) 431 [M-H]⁻; HRMALDIMS [M+Na]⁺ m/z 455.3127 (calcd for C₂₇H₄₄O₄Na, 455.3132).

【来源】 海绵 *Plakortis nigra*

【分析方法】 甲醇提取液用乙酸乙酯和水分配, 含水层用稀 NaOH 溶液稀释至 pH 等于 10, 然后用乙酸乙酯萃取, 萃取物上 Sephadex LH-20, 以甲醇为洗脱液, 其中一部分用硅胶柱梯度洗脱, 洗脱溶剂为 20% 的乙酸乙酯: 正己烷到 100% 乙酸乙酯。活性部位用正相 HPLC 纯化, 得到化合物 Epiplakinic acids G。

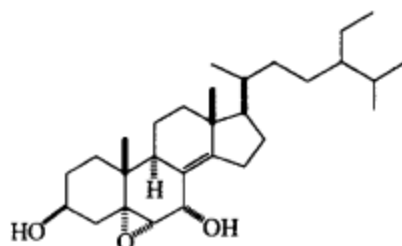
【生物活性与毒性】 抗人结肠肿瘤细胞系 HCT-116 的 IC₅₀ 值为 0.16 μ mol/L。

【参考文献】 1. Sandler J S, et al. J Nat Prod, 2002, 65: 1258

2. Horton P A, et al. J Nat Prod, 1994, 51: 1374

A0067 5 α , 6 α -Epoxy-24R*-ethylcholest-8(14)-en-3 β , 7 α -diol

【结构式】



【分子式】 $C_{29}H_{48}O_3$

【相对分子质量】 444

【理化常数及谱学数据】 不定形白色固体; $[\alpha]_D^{25} -69.0^\circ (c\ 2.25 \times 10^{-3}, CH_2Cl_2)$; UV(MeOH) λ_{max} : 248 (3.92)nm, 206(3.96)nm; $^1H\ NMR$: 3.15(d, H-6, $J=3.5$), 4.41(m, H-7), 0.85(s, H-18), 0.86(s, H-19), 0.93(d, $J=6.6$, H-21), 0.80(d, $J=6.8$, H-26), 0.82(d, $J=6.8$, H-27), 0.85(t, $J=7.0$, H-29); $^{13}C\ NMR$: 32.1(t, C-1)31.1(t, C-2)68.6(d, C-3)39.5(t, C-4)67.7(s, C-5)61.3(d, C-6)65.1(d, C-7)125.0(s, C-8)38.6(d, C-9)35.8(s, C-10)18.9(t, C-11)36.6(t, C-12)43.1(s, C-13)152.6(s, C-14)24.9(t, C-15)26.6(t, C-16)56.6(d, C-17)17.9(q, C-18)16.5(q, C-19)34.9(d, C-20)18.9(q, C-21)33.6(t, C-22)26.2(t, C-23)46.0(d, C-24)28.9(d, C-25)19.0(q, C-26)19.5(q, C-27)22.9(t, C-28)12.3(q, C-29); (+)-HR-FABMS m/z 467.3518 $[M+Na]^+$ (calcd for $C_{29}H_{48}O_3Na$).

【来源】 海绵 *Polymastia tenax*

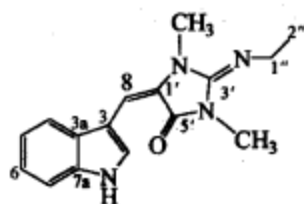
【分析方法】 海绵的 MeOH 提取物以 CH_2Cl_2/H_2O 进行分配, CH_2Cl_2 层再用含水 10% MeOH 和正己烷分配, 含水 MeOH 层溶解于 CH_2Cl_2 中, 用 50% 的 MeOH/ H_2O 萃取, 取 CH_2Cl_2 层进行硅胶柱层析, hexanes/EtOAc 梯度洗脱, EtOAc 洗脱部分经 RPHPLC 处理, 洗脱溶剂为 MeOH/ H_2O (9:1) 得到化合物 5 α ,6 α -Epoxy-24R*-ethyl cholest-8(14)-en-3 β ,7 α -diol.

【生物活性与毒性】 体外试验显示对 A-549 (人肺癌)、HT-29、H-116 (人结肠癌)、MS-1 (大鼠内皮组织癌) 和 PC-3 (人前列腺癌) 的 LC_{50} 值分别为 5~10 $\mu g/mL$ 、1~5 $\mu g/mL$ 、1~5 $\mu g/mL$ 、0.5~1 $\mu g/mL$ 和 1~5 $\mu g/mL$ 。

【参考文献】 1. Santafé G, et al. J Nat Prod, 2002, 65: 1161

A0068 N-3'-Ethylaplysinopsin

【结构式】



【分子式】 $C_{16}H_{18}N_4O$

【相对分子质量】 282

【理化常数及谱学数据】 黄色胶状物; IR(dry film) ν_{max} (cm^{-1}): 3420(brs), 2925, 2855, 1650, 1599, 1562, 1517, 1461, 1423, 1385, 1347, 1284, 1259, 1233, 905, 748; UV(MeOH) λ_{max} (nm): 219(4.13), 276(3.74), 409(4.11); $^1H\ NMR$ ($CDCl_3$): 8.61(brs, H-2), 7.83(brd, $J=8.0$; H-4), 7.16(m, H-6), 7.30(brd, $J=7.9$, H-7), 6.92(s, H-8), 3.28(s, H-2'), 3.28(s, H-4'), 4.54(q, $J=7.0$, H-1''), 1.48(t, $J=7.0$, H-2''), 9.61(brs, NH); $^{13}C\ NMR$ ($CDCl_3$): 130.97(d, C-2), 109.99(s, C-3), 127.80(s, C-3a), 118.91(d, C-4), 122.97(d, C-5), 120.93(d, C-6), 112.07(d, C-7), 136.43(s, C-7a), 110.22(d, C-8), 126.13(s, C-1'), 38.38(q, C-2'), 168.65(s, C-3'), 38.38(q, C-4'), 178.38(s, C-5'), 66.91(t, C-1''), 14.83(q, C-2''); ESI-FTMS m/z 283 $[M+H]^+$; ESI-FTMS m/z 283.1558 $[M+H]^+$ (calcd for $C_{16}H_{19}N_4O$, 283.1555).

【来源】 海绵 *Smenospongia aurea*

【分析方法】 海绵的乙醇提取物浓缩后经硅胶柱层析, 以 $CHCl_3$ -MeOH 梯度洗脱, 第 4 部分反复硅胶

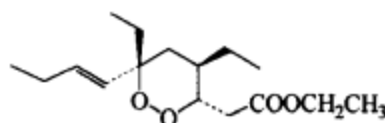
柱层析, 然后经 Sephadex LH-20 柱, 以 MeOH 为洗脱溶剂得到化合物 *N*-3'-Ethylaplysinopsin。

【生物活性与毒性】 与克隆的人 5-羟色胺 5-HT₂ 受体具有较强的结合能力。

【参考文献】 1. Schetz J A, et al. J Nat Prod, 2002, 65: 476

A0069 Ethyl didehydroplakortide Z

【结构式】



【分子式】 C₁₆H₂₈O₄

【相对分子质量】 284

【理化常数及谱学数据】 黄色油状物; $[\alpha]_D^{25} + 81.5^\circ$ (c 1.7, CH₂Cl₂); IR (neat) $\nu_{\max}$ (cm⁻¹): 2948, 1740, 1463, 1175; ¹H NMR (500MHz, CDCl₃) δ : 5.53 (1H, dt, 16.5, 5.5, H-8), 5.50 (1H, d, 16.5, H-7), 4.23 (1H, dt, 3.0, 9.5, H-3), 4.17 (2H, q, 7.5, H-15), 2.61 (1H, dd, 15.5, 3.0, H-2), 2.31 (1H, dd, 15.5, 9.5, H-2), 2.12 (2H, dq, 5.5, 7.5, H-9), 2.05 (1H, dd, 13.0, 4.5, H-5), 1.62 (1H, m, H-4), 1.49 (1H, m, H-13), 1.48 (2H, m, H-11), 1.30 (1H, t, 13.0, H-5), 1.27 (3H, t, 7.5, H-16), 1.15 (1H, m, H-13), 1.03 (3H, t, 7.5, H-10), 0.94 (3H, t, 7.5, H-14), 0.85 (3H, t, 7.5, H-12); ¹³C NMR (125MHz, CDCl₃) δ : 170.0 (C-1), 36.5 (C-2), 82.3 (C-3), 36.9 (C-4), 19.3 (C-5), 84.1 (C-6), 131.1 (C-7), 133.0 (C-8), 25.8 (C-9), 14.0 (C-10), 33.0 (C-11), 7.4 (C-12), 24.0 (C-13), 10.6 (C-14), 60.9 (C-15), 14.3 (C-16); LRESIMS; positive ion, *m/z* [M + Na]⁺ 307 (100), 213 (53), 167 (55), 139 (97); HRCIMS in methane gas, *m/z* 313.2372 [M + C₂H₅]⁺ (calcd for C₁₈H₃₃O₄, 313.2379)。

【来源】 海绵 *Plakortis lita*^[1]

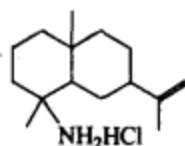
【分析方法】 样品分别用甲醇、二氯甲烷提取, 甲醇提取部分 hexane 萃取, hexane 萃取部分硅胶柱层析 (hexane-EtOAc), HPLC (MeOH-H₂O 75:25) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 中等强度的实体瘤细胞抑制活性^[1]。

【参考文献】 1. Harrison B, et al. J Nat Prod, 1998, 61: 1033

A0070 Eudesm-11-en-4-ylamine hydrochloride

【结构式】



【分子式】 C₁₅H₂₈ClN

【相对分子质量】 257

【理化常数及谱学数据】 mp 210~220°C; $[\alpha]_D - 17.2^\circ$ (c 1.0, CHCl₃); IR (KBr) $\nu_{\max}$ (cm⁻¹): 3383, 2932, 2048, 1614, 1515; ¹H NMR (CDCl₃) δ : 1.13 (td, *J* = 3.2, 3.0, H-1), 1.50~1.62 (m, H-2), 2.15 (brd, *J* = 9.0, H-3), 1.50~1.62 (m, H-5), 1.50~1.62 (m, H-6), 2.47 (brs, H-7), 1.72 (tt, *J* = 13.8, 3.0, H-8), 1.11 (dt, *J* = 13.2, 3.0, H-9), 4.87 (brs, H-12), 1.77 (brs, H-13), 0.97 (s, H-14), 1.31 (s, H-15); ¹³C NMR (CDCl₃) δ : 40.4 (t, C-1), 18.4 (t, C-2), 38.7 (t, C-3), 57.8 (s, C-4), 45.7 (d, C-5), 23.2 (t, C-6), 38.8 (d, C-7), 23.2 (t, C-8), 40.4 (t, C-9), 35.0 (s, C-10), 146.2 (s, C-11), 111.6 (t, C-12), 23.4 (q, C-13), 19.0 (q, C-14), 19.1 (q, C-15); EIMS *m/z* 221 [M - HCl]⁺ (4), 206 (10), 204 (2), 189 (1), 178 (8), 149 (1), 136 (1), 110 (2), 84 (18), 70 (100), 57 (60), 41 (18); positive FABMS *m/z* 222 [MH - HCl]⁺ (100), 205 [MH - HCl - NH₃]⁺ (80); HRFABMS *m/z* 222.2176 (calcd for C₁₅H₂₈N, 222.2222)。

【来源】 海绵 *Axinyssa ambrosia*

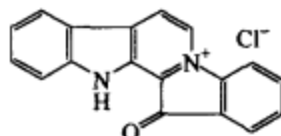
【分析方法】 丙酮: 甲醇 (1:1) 提取海绵, 提取物用硅胶柱粗分段, 正己烷/乙酸乙酯梯度洗脱, 最后用甲醇冲柱, 甲醇洗脱部分经反复硅胶柱层析得到化合物 Eudesm-11-en-4-ylamine hydrochloride。

【生物活性与毒性】 体外试验显示出对 P-388 (大鼠淋巴瘤)、A-549 (人肺癌) 以及 HT-29 (人结肠癌) 细胞具有较强的细胞毒活性, 其 IC_{50} 值均为 $2\mu\text{g/mL}$ 。

【参考文献】 1. Petrichtcheva N V, et al. J Nat Prod, 2002, 65: 851

A0071 Fascaplysin

【结构式】



【分子式】 $C_{18}H_{11}N_2O$

【相对分子质量】 271

【理化常数及谱学数据】 砖红色晶体; mp $232\sim 235^\circ\text{C}$; UV (MeOH) λ_{max} (nm): 413 (3100), 333 (3560), 301 (6800), 274 (5450), 262 (6400), 214 (7000); FTIR (neat) ν_{max} (cm^{-1}): 1721, 1618, 1594, 1502, 1462, 1450, 1080, 1061; HRFABMS m/z : 271.08606 ($C_{18}H_{11}N_2O$ require 271.08716); ^1H NMR (TFA- d) δ : 9.01 (d, $J = 5.93\text{Hz}$), 8.69 (d, $J = 5.93\text{Hz}$), 8.30 (d, $J = 7.25\text{Hz}$), 8.09 (d, $J = 7.91\text{Hz}$), 8.05 (d, $J = 7.25\text{Hz}$), 7.95 (dd, $J = 7.25, 7.91\text{Hz}$), 7.86 (dd, $J = 7.25, 7.91\text{Hz}$), 7.76 (d, $J = 7.91\text{Hz}$), 7.71 (dd, $J = 7.25, 7.25\text{Hz}$), 7.52 (dd, $J = 7.25, 7.25\text{Hz}$); ^1H NMR (DMSO- d_6) δ : 13.5 (brs, NH); ^{13}C NMR (TFA- d) δ : 186.4 (s), 149.9 (s), 149.8 (s), 145.4 (s), 141.0 (d), 138.8 (d), 135.0 (s), 134.8 (d), 129.5 (d), 128.5 (d), 127.2 (d), 126.4 (d), 126.1 (s), 123.5 (s), 122.4 (d), 122.2 (s), 117.2 (d), 116.1 (d)。

【来源】 海绵 *Fascaplysinopsis*

【分析方法】 甲醇粗提物的氯仿可溶部分经反复 Sephadex LH-20 (MeOH) 分离, 富集, 并通过氯仿或甲醇结晶, 获得活性成分 Fascaplysin。

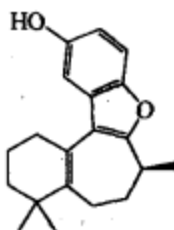
【生物活性与毒性】 抗微生物, 抑制依赖于细胞周期的激酶 CDK4, 抑制肿瘤细胞 DNA 的合成。

【参考文献】 1. Roll D M, et al. J Org Chem, 1988, 53: 3276

2. Pelcman B, et al. Tetrahedron Lett, 1990, 31: 2381
3. Popov A M, et al. Antibiot Khimioter, 1991, 36: 12
4. Jimenez C, et al. J Org Chem, 1991, 56: 3402
5. Molina P, et al. Tetrahedron Lett, 1994, 35: 8851
6. Kirsch G, et al. J Nat Prod, 2000, 63: 825
7. Soni R, et al. Biochem Biophys Res Commun, 2000, 275: 877
8. Hornmann A, et al. Bioorg Med Chem, 2001, 9: 917

A0072 Frondosin B

【结构式】



【分子式】 $C_{20}H_{24}O_2$

【相对分子质量】 296

【理化常数及谱学数据】 无色胶; $[\alpha]_D^{25} + 18.6^\circ$ (c 0.17, MeOH); UV (MeOH) $\lambda_{\max}$ (nm): 228, 245, 258; IR (KBr) $\nu_{\max}$ (cm⁻¹): 3370, 3000~3100, 2800~3000, 1619, 1590, 1462, 1380, 1197; ¹H NMR (400MHz, CDCl₃) δ : 7.24 (1H, d, 8.7, H-16), 7.12 (1H, d, 2.5, H-13), 6.71 (1H, dd, 2.5, 8.7, H-15), 4.77 (1H, OH-14), 3.19 (H, m, H-8), 2.55 (2H, t, 5.9, H-1), 2.15 (1H, m, H-6a), 2.15 (1H, m, H-4), 2.12 (1H, m, H-7a), 2.10 (1H, m, H-6b), 1.71 (2H, m, H-2), 1.62 (1H, m, H-7b), 1.56 (2H, m, H-3), 1.35 (3H, d, 7.0, H-19), 1.10 (3H, s, H-21), 1.09 (3H, s, H-20); ¹³C NMR (100MHz, CDCl₃) δ : 30.5 (C-1), 20.0 (C-2), 39.5 (C-3), 35.7 (C-4), 144.3 (C-5), 26.0 (C-6), 38.5 (C-7), 34.7 (C-8), 160.2 (C-9), 116.3 (C-10), 123.8 (C-11), 129.6 (C-12), 107.3 (C-13), 150.7 (C-14), 111.1 (C-15), 110.9 (C-16), 149.1 (C-17), 19.7 (C-19), 28.9 (C-20), 27.9 (C-21), 51.0 (CH₃O); LRDCIMS, m/z 296; HRDCIMS m/z 296.1768 (calcd for C₂₀H₂₄O₂, 296.1776)^[1].

【来源】 海绵 *Dysidea frondosa*^[1]

【分析方法】 样品分别用 EtOAc 和 CH₃OH 提取, EtOAc 提取部分 Sephadex LH-20 柱层析 (MeOH-CH₂Cl₂-hexane 1:1:1), 硅胶柱层析 (acetone-hexane 25:75), 反相制备 TLC (H₂O-CH₃CN 15:85), 正相 HPLC (EtOAc-hexane 3:7) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 抑制白介素-8 受体和蛋白激酶 C 活性, IC₅₀ μ mol/L: IL-8R α 9.6, IL-8R β 10.8, PKC- α 4.8^[1]。

【参考文献】 1. Patil A D, et al. Tetrahedron, 1997, 53: 5047

2. Hallock Y F, et al. Nat Prod Lett, 1998, 11: 153

3. Fraga B M. Nat Prod Rep, 1999, 16: 711

4. Inoue M Inoue M. Angew Chem Int Ed Eng, 2000, 39: 761

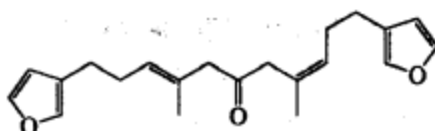
5. Danishefsky S J, et al. Ernst Schering Res Found Workshop, 2000, 32: 1

6. Inoue M, et al. J Am Chem Soc, 2001, 123: 1878

7. Hughes C C, et al. Angew Chem Int Ed Eng, 2002, 41: 1569

A0073 Furospingin-5

【结构式】



【分子式】 C₂₁H₂₆O₃

【相对分子质量】 326

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; UV (MeOH) $\lambda_{\max}$ (ϵ): 204 (11543) nm; IR (film) $\nu_{\max}$: 1718 cm⁻¹, 1671 cm⁻¹; ¹H NMR (400MHz, CDCl₃) δ : 7.34 (2H, dd, 1.7, 1.6, H-1, H-21), 7.21 (2H, dd, 1.6, 0.8, H-4, H-19), 6.27 (1H, brs, H-2), 6.26 (1H, brs, H-20), 5.40 (1H, brt, 6.9, H-15), 5.28 (1H, tq, 7.0, 1.2, H-7), 3.10 (2H, brs, H-12), 3.04 (2H, brs, H-10), 2.47 (2H, t, 7.5, H-5), 2.46 (2H, t, 7.5 Hz, H-17), 2.29 (2H, td, 7.5, 7.0, H-6), 2.23 (2H, td, 7.5, 6.9, H-16), 1.69 (3H, d, 1.2, H-14), 1.60 (3H, d, 1.2; H-9); ¹³C NMR (100MHz, CDCl₃) δ : 142.7 (C-1), 111.0 (C-2), 124.6 (C-3), 138.9 (C-4), 24.7 (C-5), 28.9 (C-6), 129.0 (C-7), 129.7 (C-8), 16.4 (C-9), 53.1 (C-10), 206.8 (C-11), 45.4 (C-12), 129.2 (C-13), 24.1 (C-14), 128.2 (C-15), 28.5 (C-16), 24.9 (C-17), 124.6 (C-18), 138.9 (C-19), 111.0 (C-20), 142.7 (C-21); EIMS (70 eV) m/z [M⁺] 326 (1), 245 (2), 177 (11), 149 (29), 135 (48), 134 (38), 95 (16), 81 (100), 67 (5); HREIMS m/z 326.1900, calcd for C₂₁H₂₆O₃ 326.1882^[1]。

【来源】 海绵 *Spongia officinalis*^[1]

【分析方法】 样品丙酮提取, 水-乙醚萃取, 乙醚部分硅胶柱层析 (梯度 hexane-Et₂O), 正相 HPLC (hexane-EtOAc 96:4) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 具有弱细胞毒活性, 对 P-388 细胞 ED_{50} $5\mu\text{g/mL}$ ^[1]。

【参考文献】 1. Garrido L, et al. J Nat Prod, 1997, 60: 794

2. Capon R J, et al. Experientia, 1982, 38: 1444

3. Cimino G, et al. Tetrahedron, 1972, 5983

4. De Pasquale R, et al. Phytother Res, 1991, 5: 49

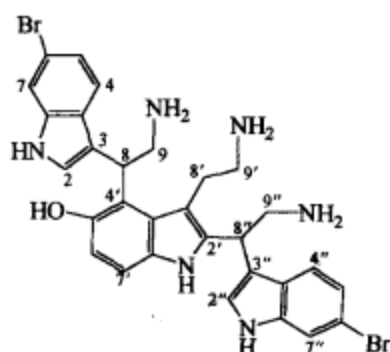
5. Anderson A P, et al. Clin Exp Pharmacol Physiol, 1994, 21: 945

6. Rao J V, et al. Toxicology, 1998, 129: 103

7. Capon R J, et al. J Nat Prod, 2001, 64: 638

A0074 (±)Gelliusine C

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{30}\text{H}_{30}\text{ON}_6\text{Br}_2$

【相对分子质量】 648/650/652

【理化常数及谱学数据】 FABMS m/z 799/801/803 $[\text{M} + \text{H} + \text{CF}_3\text{SO}_3\text{H}]^+$; UV(MeOH) λ_{max} (nm): 230, 284, 292; ^1H NMR(500MHz, CD_3OD) δ : 7.02(H, s, H-2), 7.64(H, dd, $J = 8.5\text{Hz}$, H-4), 7.19(H, dd, $J = 8.5, 1.8\text{Hz}$, H-5), 7.56(H, d, $J = 1.8\text{Hz}$, H-7), 5.35(H, dd, $J = 10.0, 5.2\text{Hz}$, H-8), 4.25(H, dd, $J = 12.1, 10.0\text{Hz}$, H-9a), 3.78(H, dd, $J = 12.1, 5.2\text{Hz}$, H-9b), 6.91(H, d, $J = 8.6\text{Hz}$, H-6'), 7.38(H, d, $J = 8.6\text{Hz}$, H-7'), 3.58, 3.20(2H, m, H-8'), 2.88, 2.67(2H, m, H-9'), 7.37(H, s, H-2''), 7.75(H, d, $J = 8.5\text{Hz}$, H-4''), 7.16(H, dd, $J = 8.5, 1.8\text{Hz}$, H-5''), 7.56(H, d, $J = 1.8\text{Hz}$, H-7''), 5.16(H, dd, $J = 8.2, 6.8\text{Hz}$, H-8''), 3.80(H, dd, $J = 12.7, 6.8\text{Hz}$, H-9'a), 3.66(H, dd, $J = 12.7, 8.2\text{Hz}$, H-9'b); ^{13}C NMR(125MHz, CD_3OD): 126.5(C-2), 114.9(C-3), 139.1(C-3a), 121.0(C-4), 123.5(C-5), 116.1(C-6), 115.5(C-7), 128.1(C-7a), 36.9(C-8), 43.7(C-9), 137.1(C-2'), 107.9(C-3'), 126.5(C-3'a), 114.6(C-4'), 151.5(C-5'), 113.1(C-6'), 114.2(C-7'), 133.5(C-7'a), 25.6(C-8'), 41.7(C-9'), 125.1(C-2''), 114.9(C-3''), 139.0(C-3'a), 121.1(C-4''), 123.5(C-5''), 116.4(C-6''), 115.5(C-7''), 126.3(C-7'a), 33.6(C-8''), 43.9(C-9'').

【来源】 海绵 *Orina* sp.

【分析方法】 海绵的二氯甲烷-甲醇提取物上 Sephadex LH-20 (甲醇), 馏分再上 SiO_2 柱 (正丁醇-乙酸-水), 最后经过 DCCC (正丁醇-丙酮-水) 和反相 HPLC (水) 的处理而得到纯品。结构通过 (HR) MS、UV 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

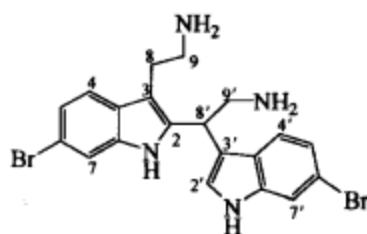
【生物活性与毒性】 抑制血清素的释放, IC_{50} 都为 $2\mu\text{mol/L}$ 。

【参考文献】 1. Bifulco G, et al. J Nat Prod, 1995, 58 (8): 1254

2. Bifulco G, et al. J Nat Prod, 1994, 57: 1294

A0075 (±)Gelliusine F

【结构式】



【分子式】 $C_{20}H_{20}N_4Br_2$

【相对分子质量】 474/476/478

【理化常数及谱学数据】 FABMS m/z 625/627/629 $[M + H + CF_3SO_3H]^+$; 1H NMR (500MHz, CD_3OD) δ : 7.51 (H, dd, $J = 8.5$ Hz, H-4), 7.20 (H, dd, $J = 8.5, 1.8$ Hz, H-5), 7.60 (H, d, $J = 1.8$ Hz, H-7), 3.27 (H, m, H-8), 3.07, 3.00 (2H, m, H-9), 7.38 (H, s, H-2'), 7.56 (H, d, $J = 8.5$ Hz, H-4'), 7.17 (H, dd, $J = 8.5, 1.8$ Hz, H-5'), 7.58 (H, d, $J = 1.8$ Hz, H-7'), 5.16 (H, dd, $J = 8.6, 6.9$ Hz, H-8'), 3.84 (H, dd, $J = 12.1, 6.9$ Hz, H-9'a), 3.66 (H, dd, $J = 12.1, 8.6$ Hz, H-9' b); ^{13}C NMR (125MHz, CD_3OD): 135.8 (C-2), 108.8 (C-3), 138.9 (C-3a), 120.2 (C-4), 123.5 (C-5), 116.3 (C-6), 115.2 (C-7), 127.9 (C-7a), 23.3 (C-8), 41.1 (C-9), 124.8 (C-2'), 113.6 (C-3'), 138.6 (C-3'a), 120.6 (C-4'), 123.6 (C-5'), 116.4 (C-6'), 115.5 (C-7'), 126.2 (C-7'a), 33.8 (C-8'), 43.9 (C-9').

【来源】 海绵 *Orina* sp.

【分析方法】 海绵的二氯甲烷-甲醇提取物上 Sephadex LH-20 (甲醇), 馏分再上 SiO_2 柱 (正丁醇-乙酸-水), 最后经过 DCCC (正丁醇-丙酮-水) 和反相 HPLC (水) 的处理而得到纯品。结构通过 (HR) MS、UV 和 NMR (1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

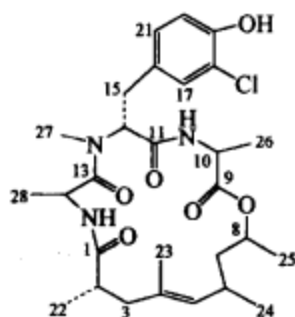
【生物活性与毒性】 抑制血清素的释放, IC_{50} 都为 $10\mu mol/L$; 在 $5\mu g/mL$ 浓度下能抑制神经肽 Y 受体 67% 的特异性配位结合, 能抑制缓激肽受体 89% 的特异性配位结合。

【参考文献】 1. Bifulco G, et al. *J Nat Prod*, 1995, 58 (8): 1254

2. Bifulco G, et al, *J Nat Prod*, 1994, 57: 1294

A0076 Geodiamolide C

【结构式】



【分子式】 $C_{28}H_{40}N_3O_6Cl$

【相对分子质量】 549/551

【理化常数及谱学数据】 无色玻璃状物; HREIMS m/z 549.2603, 551.2562 $[M]^+$; 1H NMR (400MHz, $CDCl_3$) δ : 2.32 (H, m, H-2), 2.16, 2.03 (2H, dd, $J = 13.8, 3.6$ Hz, H-3), 4.93 (H, d, $J = 8.8$ Hz, H-5), 2.16 (H, m, H-6), 1.60, 1.36 (2H, m, H-7), 4.88 (H, m, H-8), 4.48 (H, m, H-8), 4.48 (H, dq, $J = 7.7, 7.1$ Hz, H-10), 5.21 (H, dd, $J = 9.0, 7.3$ Hz, H-12), 4.75 (H, dq, $J = 6.3, 6.3$ Hz, H-14), 2.92 (H, dd, $J = 14.7, 9.0$ Hz, H-15a), 3.17 (H, dd, $J = 14.7, 7.3$ Hz, H-15b), 6.93 (H, d, $J = 8.3$ Hz, H-20), 7.15 (H, d, $J = 1.7$ Hz, H-17), 7.01 (H, dd, $J = 8.3, 1.7$ Hz, H-21), 1.15 (3H, d, $J = 6.7$ Hz, H-22), 1.51 (3H, s, H-23), 0.88 (3H, d, $J = 6.6$ Hz, H-24), 1.24 (3H, d, $J = 6.3$ Hz, H-25), 1.35 (3H, d, $J = 7.1$ Hz, H-26), 2.97 (3H, s, H-27), 1.09 (3H, d, $J = 6.7$ Hz, H-28), 6.56 (H, d, $J = 7.7$ Hz, NH), 6.46 (H, d, $J = 6.3$ Hz, NH), 5.5 (H, s, OH);

^{13}C NMR(75MHz, CDCl_3): 170.8(C-1), 42.6(C-2), 43.2(C-3), 129.0(C-4), 129.5(C-5), 28.9(C-6), 43.6(C-7), 70.9(C-8), 168.7(C-9), 49.0(C-10), 175.1(C-11), 56.6(C-12), 174.5(C-13), 45.8(C-14), 32.7(C-15), 113.0(C-16), 131.5(C-17), 119.8(C-18), 150.2(C-19), 116.3(C-20), 18.2(C-26), 30.5(C-27), 18.7(C-28)。

【来源】 巴布亚新几内亚海绵 *Pseudoaxinyssa* sp.

【分析方法】 海绵的甲醇提取物的氯仿萃取层经过 Sephadex LH-20 (甲醇)、硅胶柱 (正己烷-乙酸乙酯) 和反相 HPLC 纯化得到。结构通过 (HR)MS 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 对 L1210 体外细胞毒性 $\text{ED}_{50}=0.0025\mu\text{g/mL}$ 。

【参考文献】 1. de Silva E D, et al. Tetrahedron Lett, 1990, 31 (4): 489

2. Rao A V R, et al. Tetrahedron Lett, 1993, 34 (44): 7085

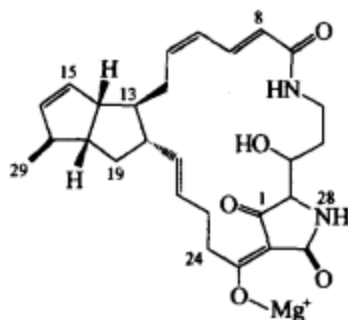
3. Coleman J E, et al. Tetrahedron, 1995, 51: 10653

4. Gulavita N K, et al. J Nat Toxins, 1996, 5: 225

5. Kerr R G, et al. Expert Opin Ther Pat, 1999, 9: 1207

A0077 Geodin A Mg salt

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{27}\text{H}_{31}\text{MgN}_2\text{O}_5$

【相对分子质量】 487

【理化常数及谱学数据】 不定形白色固体; mp 173° ; $[\alpha]^{25}_D + 179^\circ$ (c 1.0, DMSO); UV(OH) λ_{max} : 264nm; IR(KBr) $\nu_{\text{max}}(\text{cm}^{-1})$: 3345, 1610, 1535, 1480; ^1H NMR(CDCl_3) δ : 3.60(s, H-2), 3.81(brdd, H-3), 7.42(s, 3-OH), 1.40(t, 11.9, H-4), 2.75(brt, H-5), 8.15(t, 5.6, 6-NH), 5.92(d, 14.6, H-8), 7.20(dd, 12.1, 14.6, H-9), 2.24(brd, 12.0, H-12), 6.04(d, 5.5, H-16), 5.19(dt, 7.3, 15.0, H-22), 4.60(d, 5.5, 28-NH), 4.86(s, H-29a), 4.70(s, H-29b); ^{13}C NMR(CDCl_3) δ : 192.1(s, C-1), 66.7(d, C-2), 68.9(d, C-3), 30.1(t, C-4), 35.4(t, C-5), 165.2(s, C-7), 125.1(d, C-8), 133.7(d, C-9), 128.3(d, C-10), 133.5(d, C-11), 26.4(t, C-12), 50.8(d, C-13), 53.0(d, C-14), 141.5(d, C-15), 132.1(d, C-16), 158.8(s, C-17), 44.6(d, C-18), 39.3(t, C-19), 48.6(d, C-20), 130.7(d, C-21), 132.6(d, C-22), 30.2(t, C-23), 39.5(t, C-24), 193.7(s, C-25), 99.6(s, C-26), 177.7(s, C-27), 103.6(t, C-29); ESIMS m/z 463 (100); HRESIMS (+ve) m/z 487.2076(calcd for $\text{C}_{27}\text{H}_{31}\text{N}_2\text{O}_5\text{Mg}^+$, 487.2081)。

【来源】 海绵 *Geodia* sp.

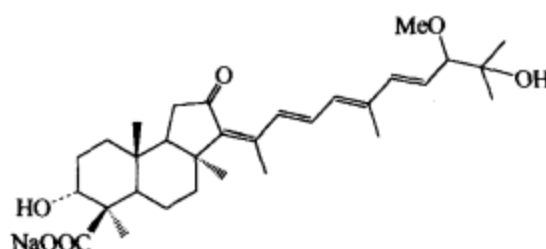
【分析方法】 冷冻干燥的海绵样品的乙醇提取物用二氯甲烷抽提, 二氯甲烷溶解部分分配于正丁醇和水之间, 正丁醇层具有杀线虫活性。正丁醇层经 Sephadex LH-20 柱层析, 甲醇洗脱。合并活性部位, 依次用石油醚和二氯甲烷冲洗, 不溶物即为化合物 Geodin A Mg salt。

【生物活性与毒性】 体外抑制线虫 *Haemonchus contortus* 生长的 LD_{99} 值为 $1\mu\text{g/mL}$ 。

【参考文献】 1. Capon R J, et al. J Nat Prod, 1999, 62: 1256

A0078 Globostellatic acid D

【结构式】



【分子式】 $C_{31}H_{45}NaO_6$

【相对分子质量】 536

【理化常数及谱学数据】 黄色无定形固体; $[\alpha]_D^{25} + 135.7^\circ (c\ 1.1, \text{MeOH})$; UV (MeOH) $\lambda_{\text{max}} (\epsilon)$: 257 (9800) nm, 368 (27000) nm; IR (film) $\nu_{\text{max}} (\text{cm}^{-1})$: 3450, 2970, 2930, 1735, 1685, 1570, 1545, 1450, 1205, 750; ^1H NMR (500 MHz, CD_3OD) δ : 7.12 (1H, dd, 15.0, 11.5, H-16), 6.75 (1H, d, 15.0, H-15), 6.42 (1H, d, 15.0, H-19), 6.33 (1H, brd, 11.5, H-17), 5.75 (1H, dd, 16.0, 8.0, H-20), 4.08 (1H, brs, H-3), 3.46 (1H, d, 8.0, H-21), 3.30 (3H, s, OMe), 2.51 (1H, brd, 12.0, H-5), 2.32 (3H, s, Me-28), 2.27 (1H, m, H-11 α), 2.24 (1H, m, H-7 β), 2.20 (1H, m, H-2 β), 2.14 (1H, m, H-7 α), 2.13 (1H, m, H-11 β), 2.00 (3H, d, 1.5, Me-29), 1.92 (1H, m, H-1 α), 1.88 (2H, m, H-6), 1.87 (1H, m, H-6), 1.87 (1H, m, H-9), 1.68 (1H, m, H-2 α), 1.46 (3H, s, Me-26), 1.27 (3H, s, Me-24), 1.16 (3H, s, Me-23), 1.15 (3H, s, Me-30), 1.11 (1H, m, H-1 β), 0.98 (3H, s, Me-27); ^{13}C NMR (125 MHz, CD_3OD) δ : 30.1 (C-1), 28.7 (C-2), 71.4 (C-3), 49.1 (C-4), 41.6 (C-5), 21.4 (C-6), 41.3 (C-7), 46.2 (C-8), 50.9 (C-9), 37.1 (C-10), 38.0 (C-11), 209.9 (C-12), 148.2 (C-13), 143.0 (C-14), 134.2 (C-15), 133.5 (C-16), 133.1 (C-17), 139.3 (C-18), 140.3 (C-19), 128.6 (C-20), 90.8 (C-21), 73.4 (C-22), 25.3 (C-23), 24.3 (C-24), 181.8 (C-25), 26.0 (C-26), 20.6 (C-27), 14.8 (C-28), 13.1 (C-29), 26.7 (C-30); FABMS m/z 535 $[(M-H)^-]$; HRFABMS m/z 535.2264 calcd for $C_{31}H_{44}O_6Na (\Delta + 2.8\text{mmu})^{[1]}$.

【来源】 海绵 *Stelletta globostellata*^[1]

【分析方法】 样品 EtOH 提取, 90% 甲醇水萃取部分 ODS 硅胶柱层析 (60%~100% MeOH), Sephadex LH-20 (CH_2Cl_2 - Me_2CO 1:4), HPLC (MeOH-0.1M NaClO_4 77:23) 得到纯化合物^[1]。

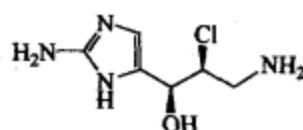
【生物活性与毒性】 细胞毒活性, 抗 P-388 IC_{50} 0.1 $\mu\text{g}/\text{mL}$ ^[1]。

【参考文献】 1. Ryu G, et al. J Nat Prod, 1996, 59: 512

2. Zampella A, et al. J Nat Prod, 2000, 63: 943

A0079 Girolline

【结构式】



【分子式】 $C_6H_{11}ClN_4O$

【相对分子质量】 190

【来源】 海绵 *Pseudaxinyssa cantharella*^[1]

【生物活性与毒性】 作用于真核细胞蛋白合成的终止阶段的蛋白合成抑制剂^[1]。

【临床与实用价值】 曾经进入 I 期临床, 但是由于具有引起高血压的副作用而终止。现在正研究其类似化合物的临床疗效^[2]。

【参考文献】 1. Ahond A, et al. P C R Acad Sci Paris, 1988, 307: 145

2. Schiavi B, et al. Tetrahedron, 2002, 58: 4201

3. Bedoya Zurita M, et al. Tetrahedron, 1989, 45: 6713

4. Ahond A, et al. C R Acad Sci P Ser II, 1988, 307: 145

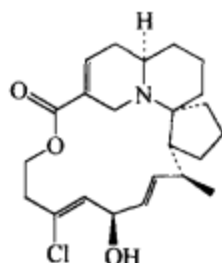
5. Commercon A, et al. Tetrahedron Lett, 1991, 32: 1419

6. Commercon A, et al. Tetrahedron Lett, 1991, 32: 4905

7. Ahond A, et al. Tetrahedron, 1992, 48: 4327
8. Hoffmann H, et al. Synthesis, 2003, 1753

A0080 Halichlorine

【结构式】



【分子式】 $C_{23}H_{32}ClNO_3$

【相对分子质量】 405

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D^{25} + 240.7^\circ (c\ 0.54, \text{MeOH})$; mp $183.5 \sim 185.5^\circ\text{C}$; IR (CS_2) ν_{max} (cm^{-1}): 3580, 1715, 1655; ^1H NMR (400MHz, CD_3OD) δ : 7.03 (1H, m, H-3), 5.76 (1H, m, H-15), 5.57 (1H, m, H-18), 5.35 (1H, m, H-16), 5.03 (1H, m, H-17), 4.62 (1H, m, H-21), 3.98 (1H, m, H-21), 3.45 (1H, m, H-23), 3.21 (1H, m, H-23), 3.18 (1H, m, H-5), 2.87 (1H, m, H-20), 2.73 (1H, m, H-14), 2.64 (1H, m, H-4), 2.56 (1H, m, H-20), 2.18 (1H, ddd, 12.0, 7.0, 4.0, H-10), 1.98 (1H, m, H-4), 1.78 (1H, m, H-7), 1.75 (1H, m, H-12), 1.74 (1H, m, H-12), 1.73 (1H, brs, H-13), 1.71 (1H, m, H-7), 1.68 (1H, m, H-11), 1.66 (1H, m, H-11), 1.64 (1H, ddd, 11.0, 7.0, 4.0, H-8), 1.50 (1H, m, H-6), 1.43 (1H, ddd, 12.0, 10.0, 3.0, H-10), 1.29 (1H, ddd, 11.0, 5.0, 2.0, H-8), 1.13 (1H, m, H-6), 1.01 (3H, d, 7.0, H-22); ^{13}C NMR (100MHz, CD_3OD) δ : 167.6 (C-1), 128.4 (C-2), 139.2 (C-3), 33.5 (C-4), 51.8 (C-5), 24.9 (C-6), 22.1 (C-7), 27.1 (C-8), 70.8 (C-9), 32.1 (C-10), 22.4 (C-11), 24.6 (C-12), 51.9 (C-13), 33.7 (C-14), 139.0 (C-15), 128.3 (C-16), 69.6 (C-17), 133.0 (C-18), 129.7 (C-19), 38.7 (C-20), 62.3 (C-21), 18.1 (C-22), 41.9 (C-23); EIMS m/z 405 (M^+), 407 ($M^+ + 2$); HREIMS m/z 405.2018 $C_{23}H_{32}^{35}\text{ClNO}_3 \Delta = -5.3\text{mmu}^{[1]}$.

【来源】 海绵 *Halichondria okadai*^[2]

【分析方法】 样品乙醇提取, hexane-含 70% 水的甲醇萃取, 含水甲醇部分聚苯乙烯柱层析 ($\text{EtOH}-\text{H}_2\text{O}$), ODS 柱层析 ($\text{MeOH}-\text{H}_2\text{O}$), 硅胶柱层析 ($\text{CHCl}_3-\text{MeOH}$), 制备 TLC ($\text{CHCl}_3-\text{MeOH}$ 9:1) 得到纯化合物^[2].

【生物活性与毒性】 抑制微管细胞黏合分子 1 VCAM-1 IC_{50} $7\mu\text{g}/\text{mL}^{[2]}$.

【参考文献】 1. Kuramotu M, et al. Tetrahedron Lett, 1996, 37: 3867

2. Arimoto H, et al. Tetrahedron Lett, 1998, 39: 861

3. Kuramoto M, et al. J Synth Org Chem Japan, 1999, 57: 105

4. Lee S, et al. Tetrahedron Lett, 1999, 40: 7921

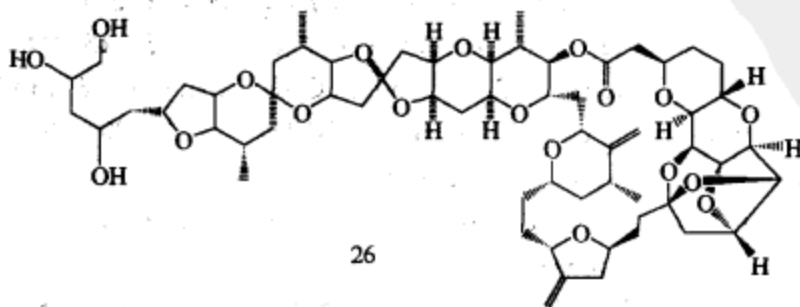
5. Shindo M, et al. Tetrahedron Lett, 2000, 41: 929

6. Kuramoto M, et al. J Synth Org Chem Japan, 2003, 61: 1099

7. Kuramoto M, Marine Drugs, 2004, 39

A0081 Halichondrin B

【结构式】



【来源】 海绵 *Halichondria okadai*

【分析方法】 参见文献 [1,2]。

【生物活性与毒性】 微管蛋白交换剂,影响微管蛋白的解聚作用,其作用位点与长春花碱的作用位点十分接近,但是截然不同^[3~5]。

【临床与实用价值】 未见该化合物的临床报道,但是其衍生物 E7389 已经应用于 I 期临床。体外应用于非小细胞肺癌 (NSCLC) 的研究显示,浓度为 0.5 pmol/L 时即产生 p53 非依赖性的抗肿瘤活性^[6~8]。

【参考文献】 1. Hirata Y, et al. *Pur Appl Chem*, 1986, 58, 701

2. Uemura D, et al. *J Am Chem Soc*, 1985, 107, 4796

3. Bai R, et al. *J Biol Chem*, 1991, 266, 15882

4. Luduena R F, et al. *Biochem Pharmacol*, 1993, 45, 421

5. Hamel E. *Pharmacol Ther*, 1992, 55, 31

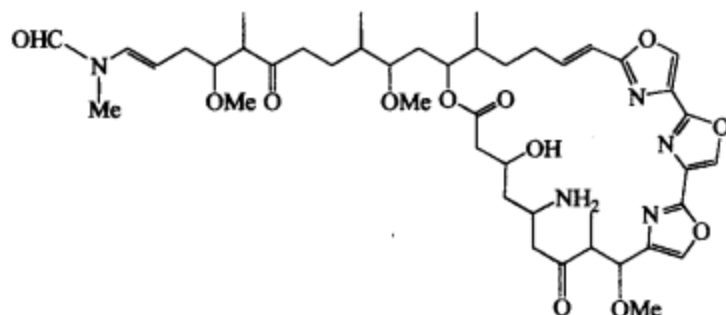
6. Choi H W, et al. *Pure Appl Chem*, 2003, 75, 1

7. Towle M J, et al. *Cancer Res*, 2001, 61, 1013

8. Yu, M J. *Abs Pap Am Chem Soc*, 2002, 224, 232

A0082 Halishigamide A

【结构式】



【分子式】 $C_{44}H_{63}N_5O_{12}$

【相对分子质量】 854

【理化常数及谱学数据】 无色无定形固体; $[\alpha]_D^{25} + 38.0^\circ$ (c 0.51, MeOH); UV(CH₃OH) λ_{max} (ϵ): 262.5 (15000) nm; IR(film) ν_{max} (cm⁻¹): 3600~3200, 1700, 1670; ¹H NMR (600 MHz, CD₃OD) δ : 8.58 (1H, s, H-14), 8.51 (1H, s, H-17), 8.30 (1H, s, NCHO), 7.96 (1H, s, H-11), 7.03 (1H, dt, 16.3, 6.1, H-20), 6.71 (1H, d, 14.5, H-35), 6.64 (1H, d, 16.3, H-19), 5.18 (1H, dt, 14.5, 7.8, H-34), 5.08 (1H, t, 9.3, H-24), 4.69 (1H, d, 3.6, H-9), 4.44 (1H, brt, 10.0, H-3), 4.25 (1H, brt, 9.9, H-5), 3.58 (1H, dd, 10.0, 19.0, H-6), 3.46 (1H, m, H-32), 3.38 (3H, s, MeO-9), 3.33 (3H, s, MeO-26), 3.31 (3H, s, MeO-32), 3.02 (1H, m, H-26), 3.01 (3H, s, N-CH₃), 2.95 (1H, m, H-6), 2.93 (1H, m, H-8), 2.82 (1H, m, H-31), 2.60 (1H, d, 15.3, H-2), 2.58 (2H, m, H-29), 2.54 (1H, dd, 15.3, 9.7, H-2), 2.51 (1H, m, H-33), 2.42 (1H, m, H-21), 2.20 (1H, m, H-33), 2.18 (1H, m, H-21), 2.05 (1H, dt, 13.9, 10.5, H-4), 1.84 (1H, d, 13.9, H-4), 1.83 (1H, m, H-22), 1.78 (1H, m, H-28), 1.75 (1H, m, H-27), 1.72 (1H, m, H-25), 1.66 (1H, m, H-23), 1.52 (1H, dd, 10.7, 13.8, H-25), 1.33 (1H, m, H-22), 1.28 (3H, d, 7.1, CH₃-8), 1.24 (1H, m, H-28), 0.99 (3H, d, 6.5, CH₃-31), 0.96 (3H, d, 6.5, CH₃-23), 0.85 (3H, d, 6.5, H-27); ¹³C NMR (150 MHz, CD₃OD) δ : 173.2 (C-1), 43.6 (C-2), 69.5 (C-3), 39.2 (C-4), 49.4 (C-5), 45.3 (C-6), 211.3 (C-7), 52.7 (C-8), 78.4 (C-9), 140.9 (C-10), 139.3 (C-11), 156.8 (C-12), 131.6 (C-13), 140.1 (C-14), 158.3 (C-15), 130.9 (C-16), 141.0 (C-17), 164.6 (C-18), 116.8 (C-19), 144.1 (C-20), 29.7 (C-21), 31.5 (C-22), 28.6 (C-23), 76.3 (C-24), 34.2 (C-25), 83.2 (C-26), 35.5 (C-27), 25.9 (C-28), 41.8 (C-29), 215.9 (C-30), 50.2 (C-31), 83.2 (C-32), 30.9 (C-33), 107.1 (C-34), 131.9 (C-35), 11.5 (CH₃-8), 57.5 (CH₃O-9), 16.0 (CH₃-23), 58.2 (CH₃O-26), 15.8 (CH₃-27), 12.8 (CH₃-31), 57.5 (CH₃O-32), 27.0 (NCH₃), 165.4 (NCHO); FABMS (pos) m/z 855 (M + H)⁺; HRFABMS m/z 854.4548 (M + H)⁺, calcd for

$C_{44}H_{64}N_5O_{12}$, 854.4552。

【来源】 海绵 *Halichondria* sp.^[1]

【分析方法】 样品甲醇提取, 乙酸乙酯萃取部分硅胶柱层析 ($CHCl_3$ -MeOH 85:15), 离心逆流层析 (EtOAc-MeOH- H_2O 2:1:2), HP-cellulofine column ($CHCl_3$ -MeOH 1:1) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 细胞毒活性, 抗老鼠淋巴瘤细胞 L1210 及人表皮癌细胞 KB IC_{50} 值分别为 0.0036 $\mu g/mL$ 和 0.012 $\mu g/mL$, 此外, 抗真菌活性 *Trichophyton mentagrophytes* MIC 0.1 $\mu g/mL$ ^[1]。

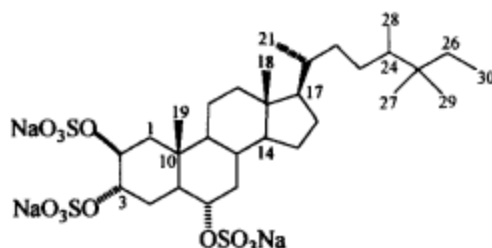
【参考文献】 1. Kobayashi J, et al. *J Nat Prod*, 1997, 60: 150

2. Kempson J, et al. *Synlett*, 1999, 533

3. Chattopadhyay S K. *J Chem Soc Perkin Trans 1*, 2000, 2415

A0083 Halistanol Sulfate F

【结构式】



【分子式】 $C_{30}H_{51}O_{12}S_3Na_3$

【相对分子质量】 768

【理化常数及谱学数据】 FABMS(-) m/z 745 $[M - Na]^-$, 723 $[M - 2Na + H]^-$, 643 $[723 - SO_3]^-$;

1H NMR(500MHz, CD_3OD) δ : 2.12(H, brd, $J = 14.5$ Hz, H-1a), 1.50(H, dd, $J = 14.5, 4$ Hz, H-1b), 4.48(H, brs, H-2), 4.78(H, brs, H-3), 2.32(H, brd, $J = 15$ Hz, H-4a), 1.83(H, dt, $J = 15, 2.7$ Hz, H-4b), 1.68(H, dt, $J = 2.7, 11.2$ Hz, H-5), 4.22(H, dt, $J = 4.4, 11.2$ Hz, H-6), 2.40(H, dt, $J = 4.4, 12.2$ Hz, H-7), 0.72(3H, s, H-18), 1.09(3H, s, H-19), 1.40(H, m, H-20), 0.97(3H, d, $J = 6.5$ Hz, H-21), 0.91(2H, m, H-22), 1.65(2H, m, H-23), 1.14(H, m, H-24), 1.28(2H, q, $J = 7$ Hz, H-26), 0.82(3H, s, H-27), 0.85(3H, d, $J = 6.5$ Hz, H-28), 0.83(3H, s, H-29), 0.84(3H, t, $J = 7$ Hz, H-30); ^{13}C NMR(125MHz, CD_3OD): 40.0(C-1), 75.3(C-2), 75.3(C-3), 25.1(C-4), 45.2(C-5), 78.5(C-6), 39.2(C-7), 35.2(C-8), 55.8(C-9), 36.5(C-10), 21.9(C-11), 41.1(C-12), 43.8(C-13), 57.2(C-14), 25.2(C-15), 29.2(C-16), 57.6(C-17), 12.6(C-18), 15.3(C-19), 37.5(C-20), 19.6(C-21), 36.6(C-22), 28.6(C-23), 42.3(C-24), 37.5(C-25), 33.8(C-26), 24.6(C-27), 14.6(C-28), 24.4(C-29), 8.5(C-30)。

【来源】 海绵 *Pseudoaxinissa Digitata*

【分析方法】 海绵的丙酮提取物在水和乙醚间分配, 水层再用正丁醇萃取, 正丁醇层上 Sephadex LH-20 (甲醇), 中间馏分合并后上 DCCC (正丁醇-丙酮-水 3:1:5), 馏分最后用反相 HPLC (40% 甲醇-水) 分离得到纯品。结构通过 MS 和 NMR (1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 及文献对照等方法确定。

【生物活性与毒性】 抗 HIV-1, $EC_{50} = 3\mu g/mL$ 。

【参考文献】 1. Bifulco G, et al. *J Nat Prod*, 1994, 57 (1): 164

2. Fusetani N, et al. *Tetrahedron Lett*, 1981, 22: 1985

3. Makar'eva T N, et al. *Khim Priro Soedin*, 1990, 215

4. Kanazawa S, et al. *Tetrahedron*, 1992, 48: 5467

5. Bifulco G, et al. *J Nat Prod*, 1994, 57: 164

6. Slate D L, et al. *Biochem Biophys Res Commun*, 1994, 203: 260

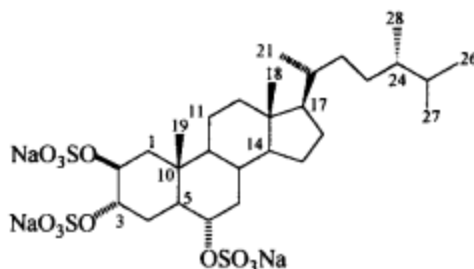
7. Patil A D, et al. *J Nat Prod*, 1996, 59: 606

8. Tsukamoto S, et al. *Biofouling*, 1997, 11: 283

9. Aiello A, et al. Steroids, 1999, 64: 687

A0084 Halistanol Sulfate G

【结构式】



【分子式】 C₂₈H₄₇O₁₂S₃Na₃

【相对分子质量】 740

【理化常数及谱学数据】 FABMS(-) m/z 717[M - Na]⁻, 695[M - 2Na + H]⁻; ¹H NMR(500MHz, CD₃OD) δ : 2.12(H, brd, J = 14.5Hz, H-1a), 1.50(H, dd, J = 14.5, 4Hz, H-1b), 4.48(H, brs, H-2), 4.78(H, brs, H-3), 2.32(H, brd, J = 15Hz, H-4a), 1.83(H, dt, J = 15, 2.7Hz, H-4b), 1.68(H, dt, J = 2.7, 11.2Hz, H-5), 4.22(H, dt, J = 4.4, 11.2Hz, H-6), 2.40(H, dt, J = 4.4, 12.2Hz, H-7), 0.72(3H, s, H-18), 1.09(3H, s, H-19), 0.98(3H, d, J = 7Hz, H-21), 0.83(3H, d, J = 7Hz, H-26), 0.83(3H, d, J = 7Hz, H-27), 0.91(3H, d, J = 7Hz, H-28); ¹³C NMR(125MHz, CD₃OD): 40.2(C-1), 75.7(C-2), 75.7(C-3), 25.2(C-4), 45.5(C-5), 78.9(C-6), 39.4(C-7), 35.3(C-8), 56.0(C-9), 37.4(C-10), 21.9(C-11), 41.3(C-12), 43.9(C-13), 57.6(C-14), 25.2(C-15), 29.2(C-16), 57.8(C-17), 12.5(C-18), 15.3(C-19), 37.5(C-20), 19.4(C-21), 34.2(C-22), 31.8(C-23), 40.6(C-24), 32.9(C-25), 18.2(C-26), 20.7(C-27), 16.0(C-28).

【来源】 海绵 *Pseudoaxinissa Digitata*

【分析方法】 海绵的丙酮提取物在水和乙醚间分配, 水层再用正丁醇萃取, 正丁醇层上 Sephadex LH-20 (甲醇), 中间馏分合并后上 DCCC (正丁醇-丙酮-水 3:1:5), 馏分最后用反相 HPLC (40% 甲醇-水) 分离得到纯品。结构通过 MS 和 NMR (¹H NMR、¹³C NMR 和 2D-NMR) 及文献对照等方法确定。

【生物活性与毒性】 抗 HIV-1, EC₅₀ = 6μg/mL。

【参考文献】 1. Bifulco G, et al. J Nat Prod, 1994, 57 (1): 164

2. Fusetani N, et al. Tetrahedron Lett, 1981, 22: 1985

3. Makar'eva T N, et al. Khim Prii Soedin, 1990, 215

4. Kanazawa S, et al. Tetrahedron, 1992, 48: 5467

5. Slate D L, et al. Biochem Biophys Res Commun, 1994, 203: 260

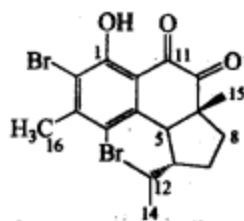
6. Patil A D, et al. J Nat Prod, 1996, 59: 606

7. Tsukamoto S, et al. Biofouling, 1997, 11: 283

8. Aiello A, et al. Steroids, 1999, 64: 687

A0085 Hamigeran B

【结构式】



【分子式】 C₁₈H₂₀Br₂O₃

【相对分子质量】 444

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} - 81.2^\circ$ (c 0.37, CH_2Cl_2); mp $144 \sim 148^\circ\text{C}$; IR (KBr) $\nu_{\max}$: 1723cm^{-1} , 1637cm^{-1} ; ^1H NMR (CDCl_3) δ : 12.94 (1H, s, OH), 3.71 (1H, d, $J = 10.2\text{Hz}$, H-5), 2.79 (3H, s, H-16), 2.76 (1H, m, H-6), 2.68 (1H, m, H-8), 1.84 (1H, m, H-7), 1.67 (1H, m, H-7), 1.52 (1H, m, H-8), 1.28 (3H, s, H-15), 1.21 (1H, m, H-12), 0.52 (3H, d, $J = 6.6\text{Hz}$, H-13), 0.46 (3H, d, $J = 6.6\text{Hz}$, H-14); ^{13}C NMR (CDCl_3) δ : 198.0 (s, C-10), 185.0 (s, C-11), 160.1 (s, C-1), 149.8 (s, C-3), 142.1 (s, C-4a), 119.3 (s, C-4), 117.6 (s, C-11a), 113.3 (s, C-2), 57.8 (d, C-5), 57.7 (s, C-9), 47.4 (d, C-6), 33.7 (t, C-8), 28.5 (d, C-12), 26.6 (q, C-16), 25.3 (t, C-7), 23.5 (q, C-15), 22.9 (q, C-13), 19.0 (q, C-14); EIMS m/z 446 (33), 444 (66), 442 (33), 364 (24); HREIMS m/z 445.9732, 443.9745, 441.9771 (calcd for $\text{C}_{18}\text{H}_{20}\text{Br}_2\text{O}_3$, 445.9738, 443.9759, 441.9780)。

【来源】 海绵 *Hamigera tarangaensis*

【分析方法】 海绵的甲醇提取物经快速硅胶柱层析分离, 正己烷: 乙酸乙酯洗脱部分经制备薄层, 由乙酸乙酯: 正己烷制备得到化合物 Hamigeran B。

【生物活性与毒性】 体外的抗 P-388 细胞系试验显示其 IC_{50} 值为 $13.5 \mu\text{mol/L}$ 。

【参考文献】 1. Wellington K D, et al. J Nat Prod, 2000, 63: 79

2. Cambie R C, et al. Acta Crystallogr Sect C, 2001, 57: 958

3. Nicolaou K C, et al. Angew Chem Int Ed Eng, 2001, 40: 3679

4. Nicolaou K C, et al. Angew Chem Int Ed Eng, 2001, 40: 3675

5. Clive D L J, et al. Angew Chem Int Ed Eng, 2003, 42: 3406

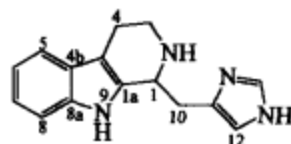
6. Mehta G, et al. Tetrahedron Lett, 2003, 44: 7049

7. Clive D L J, et al. Tetrahedron Lett, 2003, 44: 7731

8. Clive D L J, et al. J Org Chem, 2004, 69: 2773

A0086 Haploscleridamine

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{15}\text{H}_{16}\text{N}_4$

【相对分子质量】 252

【理化常数及谱学数据】 无色胶状物; $[\alpha]_D - 3.4^\circ$ (c 0.78, MeOH); IR (KBr) $\nu_{\max}$ (cm^{-1}): 3370~3380, 2800~3100, 1623, 1589, 1570, 1453, 1318, 745; UV (MeOH) $\lambda_{\max}$ (nm): 235 (3.72), 270 (3.41), 278 (3.55), 288 (3.06); DCMS m/z 253 ($\text{M} + \text{H}^+$); HR-DCMS m/z 253.1444 ($\text{M} + \text{H}^+$) calcd for $\text{C}_{15}\text{H}_{17}\text{N}_4$, 253.1453; ^1H NMR (CD_3OD , 400MHz) δ : 7.65 (1H, d, $J = 1.2\text{Hz}$, H-13), 7.39 (1H, ddd, $J = 1.0, 1.0, 7.7\text{Hz}$, H-5), 7.31 (1H, ddd, $J = 1.0, 1.0, 8.0\text{Hz}$, H-8), 7.07 (1H, ddd, $J = 1.0, 8.0, 8.0\text{Hz}$, H-7), 6.98 (1H, ddd, $J = 1.0, 7.7, 8.0\text{Hz}$, H-6), 6.87 (1H, dt, $J = 1.2, 1.0\text{Hz}$, H-12), 4.48 (1H, m, H-1), 3.36~3.32 (2H, m, H-3, 10), 3.04~3.01 (2H, m, H-3, 10), 2.82~2.78 (2H, m, H-4, 4); ^{13}C NMR (CD_3OD , 100MHz) δ : 137.9 (s, C-8a), 136.6 (d, C-13), 135.4 (s, C-11), 134.2 (s, C-1a), 128.2 (s, C-4b), 122.6 (d, C-7), 120.0 (d, C-6), 118.8 (d, C-5), 117.8 (d, C-12), 112.1 (d, C-8), 108.7 (s, C-4a), 54.3 (d, C-1), 43.0 (t, C-3), 32.2 (t, C-10), 21.9 (t, C-4)。

【来源】 目海绵 *Haplosclerida*

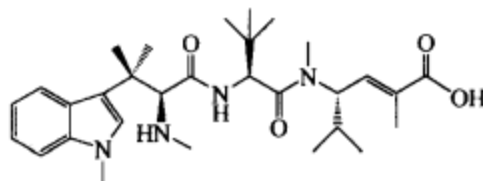
【分析方法】 用 EtOAc 和 MeOH 提取海绵, 合并提取物, 应用 Sephadex LH-20 柱层析, 以 MeOH 洗脱, 结合 ^1H NMR 和活性筛选确定活性部位, 经过 RP-HPLC 柱层析, 以 $\text{H}_2\text{O}/\text{MeOH}$ (15:85) 为洗脱剂去除脂肪酸和其他杂质, 含 1% NH_4OH 的 MeOH 洗脱部分通过制备薄层色谱制备得到化合物 Haploscleridamine。

【生物活性与毒性】 作为组织蛋白酶 K 抑制剂, 其 IC_{50} 值为 $26 \mu\text{mol/L}$ 。

【参考文献】 1. Patil A D, et al. J Nat Prod, 2002, 65: 628

A0087 Hemiasterlin

【结构式】



【分子式】 $C_{30}H_{46}N_4O_4$

【相对分子质量】 526

【来源】 海绵 *Hemiasterella minor*

【分析方法】 甲醇提取物经 HPLC 分离得到^[1]。

【生物活性与毒性】 细胞毒活性。其作用机理为与微管蛋白结合导致微管解聚^[2]，抑制微管装配，并可能作用于“肽结合位点”^[3]。

【参考文献】 1. Talpir R, et al. Tetrahedron Lett, 1994, 35: 4453

2. Anderson H J, et al. Cancer Chemother Pharmacol, 1997, 39: 223

3. Bai R, et al. Biochemistry, 1999, 38: 14302

4. Coleman J E, et al. Tetrahedron, 1995, 51: 10653

5. Gulavita N K, et al. J Nat Toxins, 1996, 5: 225

6. Coleman J E, et al. Acta Crystallogr Sect C, 1996, 52: 1525

7. Anderson R J, et al. Tetrahedron Lett, 1997, 38: 317

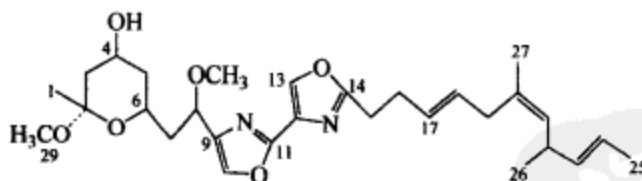
8. Kerr R G, et al. Expert Opin Ther Pat, 1999, 9: 1207

9. Gamble W R, et al. Bioorg Med Chem, 1999, 7: 1611

10. Matsunaga S, et al. Curr Org Chem, 2003, 7: 945

A0088 Hennoxazole A

【结构式】



【分子式】 $C_{29}H_{42}N_2O_6$

【相对分子质量】 514

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha] -47^\circ (c\ 3.116, CHCl_3)$; HREIMS $m/z\ 514.3045 [M]^+$; UV (MeOH) λ_{max} : 254 nm; IR ($CHCl_3$) ν_{max} (cm^{-1}): 3580, 3380; 1H NMR (Acetone- d_6) δ : 1.23 (3H, s, H-1), 1.98 (H, ddd, $J = 12.6, 4.6, 1.6$ Hz, H-3), 1.22 (H, t, $J = 11.7$ Hz, H-3'), 3.89 (H, m, H-4), 1.89 (H, dtd, $J = 12.4, 4.5, 2.3$ Hz, H-5), 1.11 (H, q, $J = 11.6$ Hz, H-5'), 3.51 (H, m, H-6), 2.06 (2H, m, H-7), 4.45 (H, dd, $J = 7.7, 6.5$ Hz, H-8), 7.96 (H, s, H-10), 8.36 (H, s, H-13), 2.88 (2H, t, $J = 7.5$ Hz, H-15), 2.49 (2H, q, $J = 6.9$ Hz, H-16), 5.50 (H, dt, $J = 15.3, 6.2$ Hz, H-17), 5.44 (H, dt, $J = 15.3, 6.1$ Hz, H-18), 2.67 (2H, m, H-19), 4.94 (H, d, $J = 9.3$ Hz, H-21), 3.01 (H, m, H-22), 5.32 (2H, m, H-23, H-24), 1.58 (3H, s, H-25), 0.94 (3H, d, $J = 6.9$ Hz, H-26), 1.58 (3H, s, H-27), 3.21 (3H, s, H-28), 3.01 (3H, s, H-29), 3.74 (H, d, $J = 4.8$ Hz, —OH); ^{13}C NMR (Acetone- d_6): 23.9 (C-1), 99.9 (C-2), 45.7 (C-3), 64.1 (C-4), 41.4 (C-5), 66.3 (C-6), 41.2 (C-7), 73.1 (C-8), 156.1 (C-9), 137.5 (C-10), 142.1 (C-11), 131.2 (C-12), 139.4 (C-13), 165.9 (C-14), 28.4 (C-15), 30.2 (C-16), 129.5 (C-17), 129.9 (C-18), 35.6 (C-19), 132.5

(C-20), 130.8(C-21), 35.7(C-22), 136.8(C-23), 122.7(C-24), 17.9(C-25), 21.6(C-26), 23.3(C-27), 56.1(C-28), 47.7(C-29)。

【来源】 海绵 *Polyfibrospongia* sp.

【分析方法】 海绵的丙酮提取物上 flash 硅胶柱 (正己烷-乙酸乙酯-甲醇) 梯度洗脱, 乙酸乙酯洗脱部分上 Sephadex LH-20 (甲醇-二氯甲烷 2/1), 最后用反相 HPLC (甲醇-水 90:10) 分离得到纯品。结构通过 (HR) MS、IR、UV 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 抗疱疹单结构病毒 type I, $\text{IC}_{50}=0.6\mu\text{g/mL}$ 。

【参考文献】 1. Ichiba T, et al. J Am Chem Soc, 1991, 113: 3173

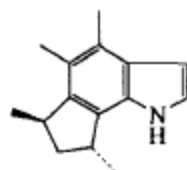
2. Higa T, et al. Pure Appl Chem, 1994, 66: 2227

3. Brzezinski L J, et al. Tetrahedron Lett, 1998, 39: 2039

4. Yokokawa F, et al. Tetrahedron, 2001, 57: 6311

A0089 Herbindol A

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{15}\text{H}_{19}\text{N}$

【相对分子质量】 213

【理化常数及谱学数据】 无色针状; mp $120\sim 122^\circ\text{C}$; UV (MeOH) λ_{max} (nm): 210 (lg ϵ 4.74), 226 (sh, 4.68), 272 (3.93); IR ν_{max} (cm^{-1}): 3380, 2990, 2960, 1480, 1470, 1130, 740; HREIMS m/z : 213 ($\text{C}_{15}\text{H}_{19}\text{N}$, require 213); ^1H NMR (C_6D_6) δ : 6.80 (bs, H-1), 6.65 (dd, $J=2.5, 0.5\text{Hz}$, H-2), 6.61 (dd, $J=2.5, 1.0\text{Hz}$, H-3), 3.34 (dq, $J=9.0, 7.0, 2.0\text{Hz}$, H-6), 2.60 (ddd, $J=12.8, 9.0, 9.0\text{Hz}$, 7a), 1.46 (ddd, $J=12.8, 2.0, 2.0\text{Hz}$, H-7 β), 3.18 (dq, $J=9.0, 7.0, 2.0\text{Hz}$, H-8), 2.45 (s, 5-Me), 1.34 (d, $J=7.0\text{Hz}$, 6-Me), 1.22 (d, $J=7.0\text{Hz}$, 8-Me), 2.28 (s, H-1'); ^{13}C NMR (C_6D_6) δ : 123.0 (C-2), 101.7 (C-3), 126.5 (C-3a), 128.7 (C-4), 122.9 (C-5), 126.4 (C-5a), 39.5 (C-6), 42.2 (C-7), 37.5 (C-8), 141.8 (C-8a), 130.9 (C-8b), 15.6 (5-Me), 24.0 (6-Me), 23.0 (8-Me), 15.4 (C-1')。

【来源】 海绵 *Axinella* sp.

【分析方法】 二氯甲烷-甲醇 (1:1) 粗提物经硅胶柱层析色谱 (hexane/ethyl acetate 系统梯度洗脱), 正相高效液相色谱 (hexane/ethyl acetate 9:1) 和反相高效液相色谱 (MeOH/ H_2O 4:1, 3:1) 分离, 纯化, 获得活性成分 Herbindol A。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 KB 的生长, 拒食作用。

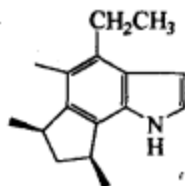
【参考文献】 1. Herb R, et al. Tetrahedron, 1990, 46: 3089

2. Muratake H, et al. Tetrahedron Lett, 1992, 33: 4595

3. Muratake H, et al. Chem Pharm Bull, 1994, 42: 854

A0090 Herbindol B

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{16}\text{H}_{21}\text{N}$

【相对分子质量】 227

【理化常数及谱学数据】 无色针状; mp 118~120°C; UV(MeOH) $\lambda_{\max}$: 222nm (lg ϵ 4.67), 272nm (4.09); IR $\nu_{\max}$ (cm⁻¹): 3410, 2970, 2920, 2880, 1450, 1400, 1130, 730; HREIMS m/z : 227.1679 (C₁₆H₂₁N, require 227.1684); ¹H NMR(C₆D₆) δ : 6.79(bs, H-1), 6.66(dd, J = 3.0, 2.4Hz, H-2), 6.61(dd, J = 3.0, 2.1Hz, H-3), 3.34(dqd, J = 9.3, 6.9, 1.8Hz, H-6), 2.59(ddd, J = 12.9, 9.3, 9.3Hz, 7a), 1.46(ddd, J = 12.9, 1.8, 1.8Hz, H-7 β), 3.16(dqd, J = 9.3, 7.2, 1.8Hz, H-8), 2.34(s, 5-Me), 1.35(d, J = 6.9Hz, 6-Me), 1.21(d, J = 7.2Hz, 8-Me), 2.97(q, J = 7.5Hz, H-1'), 1.27(t, J = 7.5Hz, H-2'); ¹³C NMR(C₆D₆) δ : 122.4(C-2), 101.1(C-3), 127.0(C-3a), 128.7(C-4), 121.4(C-5), 126.3(C-5a), 39.2(C-6), 41.8(C-7), 37.0(C-8), 141.6(C-8a), 132.6(C-8b), 14.4(5-Me), 23.3(6-Me), 22.6(8-Me), 14.6(C-1'), 23.7(C-2').

【来源】 海绵 *Axinella* sp.

【分析方法】 二氯甲烷-甲醇 (1:1) 粗提物经硅胶柱层析色谱 (hexane/ethyl acetate 系统梯度洗脱), 正相高效液相色谱 (hexane/ethyl acetate 9:1) 和反相高效液相色谱 (MeOH/H₂O 4:1, 3:1) 分离, 纯化, 获得活性成分 Herbindol B.

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 KB 的生长, 拒食作用。

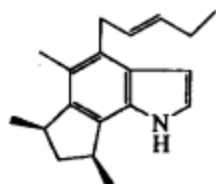
【参考文献】 1. Herb R, et al. Tetrahedron, 1990, 46: 3089

2. Muratake H, et al. Tetrahedron Lett, 1992, 33: 4595

3. Muratake H, et al. Chem Pharm Bull, 1994, 42: 854

A0091 Herbindol C

【结构式】



【分子式】 C₁₈H₂₃N

【相对分子质量】 253

【理化常数及谱学数据】 无色针状; mp 118~120°C; UV(MeOH) $\lambda_{\max}$ (nm): 212 (lg ϵ 4.70), 226 (4.63), 294 (4.00); IR $\nu_{\max}$ (cm⁻¹): 3420, 2980, 2940, 2880, 1460, 1270, 1100, 1020, 800, 730; HREIMS m/z : 253.1844 (C₁₈H₂₃N, require 253.1857); ¹H NMR(C₆D₆) δ : 6.82(bs, H-1), 6.69(dd, J = 3.0, 2.4Hz, H-2), 6.93(dd, J = 3.0, 2.1Hz, H-3), 3.33(dqd, J = 9.0, 7.2, 1.8Hz, H-6), 2.59(ddd, J = 13.2, 9.0, 9.0Hz, 7a), 1.45(ddd, J = 13.2, 1.8, 1.8Hz, H-7 β), 3.18(dqd, J = 9.0, 7.8, 1.8Hz, H-8), 2.40(s, 5-Me), 1.34(d, J = 7.2Hz, 6-Me), 1.22(d, J = 7.8Hz, 8-Me), 6.90(q, J = 16.2Hz, H-1'), 6.32(dt, J = 16.2, 6.3Hz, H-2'), 2.26(qd, J = 7.2, 6.3Hz, H-3'), 1.08(t, J = 7.2Hz, H-4'), ¹³C NMR(C₆D₆) δ : 123.1(C-2), 103.1(C-3), 127.4(C-3a), 128.6(C-4), 122.7(C-5), 127.0(C-5a), 39.5(C-6), 42.1(C-7), 37.4(C-8), 141.8(C-8a), 134.9(C-8b), 14.4(5-Me), 24.0(6-Me), 22.9(8-Me), 129.0(C-1'), 135.8(C-2'), 16.2(C-3'), 27.2(C-4').

【来源】 海绵 *Axinella* sp.

【分析方法】 二氯甲烷-甲醇 (1:1) 粗提物经硅胶柱层析色谱 (hexane/ethyl acetate 系统梯度洗脱), 正相高效液相色谱 (hexane/ethyl acetate 9:1) 和反相高效液相色谱 (MeOH/H₂O 4:1, 3:1) 分离, 纯化, 获得活性成分 Herbindol C.

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 KB 的生长, 拒食作用。

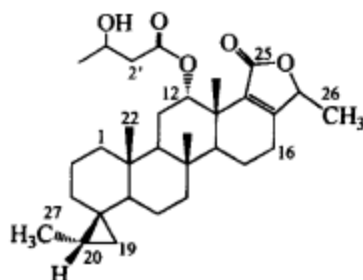
【参考文献】 1. Herb R, et al. Tetrahedron, 1990, 46: 3089

2. Muratake H, et al. Tetrahedron Lett, 1992, 33: 4595

3. Muratake H, et al. Chem Pharm Bull, 1994, 42: 854

A0092 Honulactone A

【结构式】



【分子式】 $C_{31}H_{46}O_5$

【相对分子质量】 498

【理化常数及谱学数据】 无色针晶; $[\alpha]^{25}_D + 73.2'$ (c 0.71, CH_2Cl_2); IR (KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3448, 2930, 1742, 1671, 1383, 1324, 1288, 1176, 1064; 1H NMR ($CDCl_3$) δ : 1.70 (dt, $J = 3, 13$ Hz, H-1eq), 0.71 (m, H-1ax), 1.44 (m, H-2), 1.5 (m, H-3eq), 1.23 (m, H-3ax), 1.37 (m, H-5ax), 1.05 (m, H-2-6), 1.77 (dt, $J = 3, 12$ Hz, H-7eq), 0.97 (m, H-7ax), 1.19 (dd, $J = 2, 14$ Hz, H-9ax), 2.09 (dt, $J = 3, 15$ Hz, H-11eq), 1.7 (ddd, $J = 2, 15, 15$ Hz, H-11ax), 5.61 (brt, $J = 2.6$ Hz, H-12eq), 1.52 (m, H-14ax), 1.91 (dd, $J = 6, 13$ Hz, H-15eq), 1.54 (m, H-15ax), 2.37 (m, H-16eq), 2.21 (m, H-16ax), 0.58 (dd, $J = 4.5, 8.7$ Hz, H-19cis), -0.49 (dd, $J = 4.5, 5.6$ Hz, H-19trans), 0.7 (ddq, $J = 4, 6, 8.4$ Hz, H-20), 0.88 (s, H-21), 0.79 (s, H-22), 1.17 (s, H-23), 4.78 (q, $J = 6.6$ Hz, H-24), 1.36 (d, $J = 6.8$ Hz, H-3-26), 1.08 (d, $J = 6.4$ Hz, H-3-27), 2.37 (m, H-2'a), 2.31 (m, H-2'b), 4.10 (m, H-3'), 3.06 (d, $J = 3.1$ Hz, HO-3'), 1.18 (d, $J = 6.9$ Hz, H-3-4'), ^{13}C NMR ($CDCl_3$) δ : 39.7 (C-1), 21.1 (C-2), 33.0 (C-3), 22.6 (C-4), 50.2 (C-5), 17.5 (C-6), 40.0 (C-7), 37.8 (C-8), 51.4 (C-9), 37.2 (C-10), 21.1 (C-11), 74.5 (C-12), 38.4 (C-13), 51.2 (C-14), 16.8 (C-15), 24.0 (C-16), 164.1 (C-17), 132.7 (C-18), 13.6 (C-19), 13.4 (C-20), 16.8 (C-21), 13.9 (C-22), 21.4 (C-23), 77.9 (C-24), 171.3 (C-25), 18.6 (C-26), 13.1 (C-27), 171.5 (C-1'), 43.4 (C-2'), 64.2 (C-3'), 22.3 (C-4'); HRFABMS m/z 499.3431 $[M+H]^+$ ($C_{31}H_{47}O_5$).

【来源】 海绵 *Strepsichordaia aliena*

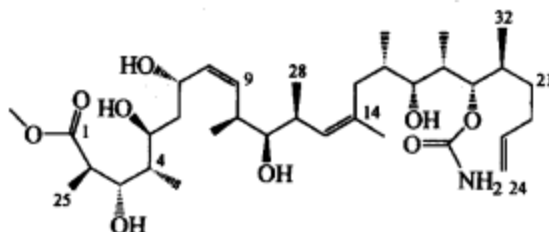
【分析方法】 海绵样品以 DCM:IPA (1:1) 提取, 浸膏加载到 Sephadex LH-20 柱, 依次以二氯甲烷、二氯甲烷:丙酮和甲醇洗脱。每个洗脱部分均依靠 HPLC (Phenomenex Ultracarb 10 ODS 30, 250mm $\times$ 22mm) 分段, 洗脱溶剂为 80% 含水乙腈到 100% 乙腈。部位 3, 4 经过正相 HPLC (Microsorb Si, 300mm $\times$ 7.0mm), 正己烷:异丙醇洗脱得到化合物 Honulactones A。

【生物活性与毒性】 体外试验抗 P-388 (ATCC: CCL 46), A-549 (ATCC: CCL 8), HT-29。

【参考文献】 1. Jiménez J I, et al. J Org Chem, 2000, 65: 6837

A0093 5-Hydroxymethyldiscodermolate

【结构式】



【分子式】 $C_{34}H_{61}NO_9$

【相对分子质量】 627

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D^{25} + 14.6^\circ$ (c 0.1, MeOH); IR (neat/NaCl) $\nu_{\max}$ (cm^{-1}): 3361, 1710, 1393, 1046; ^1H NMR δ : 2.66 (m, H-2), 3.91 (m, H-3), 1.64 (ddq, 2.5, 5.0, 6.9, H-4), 3.90 (m, H-5), 1.63 (m, H-6), 1.45 (ddd, 3.1, 9.3, 12.0, H-6), 4.50 (ddd, 7.5, 9.1, 9.3, H-7), 5.42 (m, H-8), 5.42 (m, H-9), 2.64 (m, H-10), 3.07 (m, H-11), 2.36 (ddq, 5.2, 6.8, 9.9, H-12), 5.03 (d, 9.9, H-13), 1.79, 1.68 (m, H-15), 1.76 (m, H-16), 3.14 (dd, 4.3, 6.2, H-17), 1.74 (m, H-18), 4.70 (dd, 4.7, 7.5, H-19), 3.08 (m, H-20), 5.42 (m, H-21), 6.04 (dd, 10.9, 11.0, H-22), 6.67 (ddd, 10.4, 11.0, 16.8, H-23), 5.23, 5.13 (d, 16.8, H-24), 1.07 (d, 7.1, H-25), 0.76 (d, 7.0, H-26), 0.98 (d, 6.7, H-27), 0.88 (d, 6.7, H-28), 1.59 (s, H-29), 0.74 (d, 6.3, H-30), 0.84 (d, 6.7, H-31), 0.95 (d, 6.6, H-32), 3.63 (s, 1-OMe), 5.05 (brs, NH_2); ^{13}C NMR δ : 76.7 (s, C-1), 43.1 (d, C-2), 76.6 (d, C-3), 42.0 (d, C-4), 73.0 (d, C-5), 41.7 (t, C-6), 65.6 (d, C-7), 134.5 (d, C-8), 133.7 (d, C-9), 36.5 (d, C-10), 79.7 (d, C-11), 36.5 (d, C-12), 131.2 (d, C-13), 133.8 (s, C-14), 36.3 (t, C-15), 34.3 (d, C-16), 76.1 (d, C-17), 38.4 (d, C-18), 79.1 (d, C-19), 34.9 (d, C-20), 134.2 (d, C-21), 130.4 (d, C-22), 113.3 (d, C-23), 118.3 (t, C-24), 9.3 (q, C-25), 12.9 (q, C-26), 19.3 (q, C-27), 16.7 (q, C-28), 23.4 (q, C-29), 15.2 (q, C-30), 9.2 (q, C-31), 18.2 (q, C-32); HRFABMS (glycerol) m/z 626.4252, for $\text{C}_{34}\text{H}_{60}\text{NO}_9$ ($\text{M} + \text{H}$) $^+$.

【来源】 海绵 *Discodermia* sp.

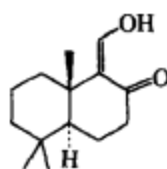
【分析方法】 海绵提取物用乙酸乙酯和水进行分配, 乙酸乙酯层上硅胶柱, 以二氯甲烷/甲醇梯度洗脱, 活性部位采用正相 HPLC, 使用 7% MeOH/ CH_2Cl_2 进行洗脱, 得到化合物 5-Hydroxymethyl-discodermolate.

【生物活性与毒性】 体外抑制 P-388 和 A-549 细胞系增殖的 IC_{50} 值分别为 65.8 nmol/L 和 74 nmol/L.

【参考文献】 1. Gunasekera S P, et al. J Nat Prod, 2002, 65: 1643

A0094 1-Hydroxymethylene-5,5,8a-trimethyl-octahydro-naphthalen-2-one ester

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{17}\text{H}_{24}\text{O}_2$

【相对分子质量】 292

【理化常数及谱学数据】 白色固体; $[\alpha]_D^{25} + 9.6^\circ$ (c 0.1, MeOH); UV (MeOH) $\lambda_{\max}$: 294 nm ($\lg \epsilon$ 3.34); IR (KBr) $\nu_{\max}$ (cm^{-1}): 3500 (broad, —OH), 2930, 2870, 1620, 1590, 1460, 1380, 1290, 1200, 940; ^1H NMR (500 MHz, CDCl_3) δ : 15.36 (1H, d, 4.4, OH), 8.60 (1H, d, 4.4, H-11), 2.48 (1H, ddd, 13.6, 7.7, 1.8, H-7), 2.39 (1H, ddd, 19.8, 11.0, 7.7, H-7), 2.01 (1H, brd, 12.7, H-1), 1.80 (1H, brddd, 13.7, 13.7, 5.9, H-6), 1.63 (1H, m, H-2), 1.58 (1H, m, H-6), 1.53 (1H, m, H-2), 1.45 (1H, dddd, 13.6, 3.3, 3.3, 1.5, H-3), 1.30 (1H, ddd, 12.7, 12.7, 3.7, H-1), 1.20 (1H, m, H-3), 1.16 (1H, dd, 12.0, 1.8, H-5), 1.15 (3H, s, H-13), 0.91 (3H, s, H-15), 0.86 (3H, s, H-16); ^{13}C NMR (125.5 MHz, CDCl_3) δ : 38.3 (C-1), 18.9 (C-2), 41.4 (C-3), 32.9 (C-4), 50.3 (C-5), 17.7 (C-6), 33.1 (C-7), 188.9 (C-8), 122.8 (C-9), 35.1 (C-10), 183.0 (C-11), 25.0 (C-13), 21.3 (C-14), 33.3 (C-15); HREIMS (M) $^+$ m/z 222.1614 (calcd for $\text{C}_{14}\text{H}_{22}\text{O}_2$, 222.1619) $^{[1]}$.

【来源】 海绵 *Dysidea* sp. $^{[1]}$

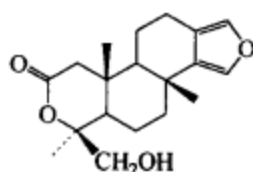
【分析方法】 样品 CH_2Cl_2 、MeOH 提取, 提取物合并, 硅胶柱层析 (梯度 hexane-EtOAc), 正相 HPLC (hexane-EtOAc) 得纯化合物 $^{[1]}$.

【生物活性与毒性】 具有中等强度的抗菌和酶抑制活性 (Na^+/K^+ -ATPase and PLA2) $^{[1]}$.

【参考文献】 1. Paul V J, et al. J Nat Prod, 1997, 60: 1115

A0095 4-Hydroxymethyl-4, 8, 10-trimethyl-1, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12-decahydro-3, 16-dioxacyclopenta[α]phenanthrene-2-one

【结构式】



【分子式】 $C_{19}H_{26}O_4$

【相对分子质量】 318

【理化常数及谱学数据】 白色粉末固体; $[\alpha]_D^{25} + 15.2^\circ (c 0.27, CHCl_3)$; IR($CHCl_3$) ν_{max} (cm^{-1}): 3700~3250(br), 1712, 1670~1683(br); 1H NMR(500MHz, $CDCl_3$) δ : 7.08(1H, s, H-15), 7.04(1H, s, H-16), 3.94(1H, d, 12.0, H-19), 3.43(1H, brd, 12.0, H-19), 2.82(1H, d, 17.0, H-1 β), 2.80, 3.45(each 1H, m, H-12), 2.16(1H, d, 5.5, H-7), 1.95(1H, d, 17.0, H-1 α), 1.72(1H, m, H-5), 1.58~1.66(5H, m, H-6, H-7 and H-11), 1.48(3H, s, H-18), 1.28(1H, t, 7.0, H-9), 1.20(3H, s, H-17), 1.02(3H, s, H-20); ^{13}C NMR(125MHz, $CDCl_3$) δ : 46.3(C-1), 170.0(C-2), 87.2(C-4), 52.8(C-5), 19.8(C-6), 39.6(C-7), 33.8(C-8), 53.2(C-9), 36.4(C-10), 18.2(C-11), 20.3(C-12), 118.9(C-13), 135.9(C-14), 135.1(C-15), 137.1(C-16), 25.4(C-17), 26.2(C-18), 65.6(C-19), 17.1(C-20); FABMS m/z 319 $[M+1]^+$ [1].

【来源】 海绵 *Spongia matamata* [1]

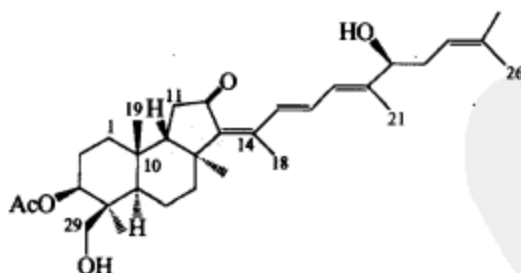
【分析方法】 样品分别用甲醇、甲醇-二氯甲烷 1:1 提取, 提取物合并, hexane、 CH_2Cl_2 、BuOH 萃取, CH_2Cl_2 部分硅胶柱层析(hexane-EtOAc), HPLC(MeOH- H_2O) 得到纯化合物 [1].

【生物活性与毒性】 对海水虾致死性, LC_{50} 50~100 $\mu g/mL$ [1].

【参考文献】 1. Li C J, et al. J Nat Prod, 1998, 61: 546

A0096 29-Hydroxystelliferin A

【结构式】



【分子式】 $C_{32}H_{48}O_5$

【相对分子质量】 512

【理化常数及谱学数据】 亮黄色固体; $[\alpha]_D^{25} - 37^\circ (c 0.10, MeOH)$; UV(OH) λ_{max} : 348(4.04) nm, 232(3.77) nm; IR(KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3398, 2925, 2856, 1727, 1679, 1566; 1H NMR(benzene- d_6) δ : 0.87(brd, $J = 12.5$, H-1), 1.15(dd, $J = 12.5, 3.5$, H-1), 4.72(dd, $J = 12.0, 5.5$, H-3), 1.72(dd, $J = 13.0, 8.5$, H-7), 1.40(dd, $J = 16.0, 7.0$, H-9), 1.93(t, $J = 16.0$, H-11), 2.01(dd, $J = 16.0, 7.0$, H-11), 8.75(d, $J = 15.5$, H-15), 6.93(dd, $J = 15.5, 11.0$, H-16), 6.36(d, $J = 11.0$, H-17), 1.77(s, H-18), 0.65(s, H-19), 1.76(s, H-21), 3.88(brt, $J = 7.0$, H-22), 2.19(dt, $J = 14.0, 7.0$, H-23), 2.25(dt, $J = 14.0, 7.0$, H-23), 5.15(brt, $J = 7.0$, H-24), 1.59(brs, H-26), 1.49(brs, H-27), 1.10(s, H-28), 3.52 br(d, $J = 11.5$, H-29), 3.80(d, $J = 11.5$, H-29), 0.95(s, H-30), 1.59(s, H-Ac); ^{13}C NMR(benzene- d_6) δ : 32.9(t, C-1), 25.9(t, C-2), 81.9(d,

C-3), 43.4(s, C-4), 47.6(d, C-5), 19.8(t, C-6), 38.7(t, C-7), 44.4(s, C-8), 49.9(d, C-9), 35.3(s, C-10), 36.9(t, C-11), 204.5(s, C-12), 146.2(s, C-13), 141.6(s, C-14), 133.0(d, C-15), 130.3(d, C-16), 126.8(d, C-17), 15.9(q, C-18), 21.9(q, C-19), 143.5(s, C-20), 12.7(q, C-21), 77.1(d, C-22), 34.8(t, C-23), 120.9(d, C-24), 134.1(s, C-25), 25.4(q, C-26), 18.0(q, C-27), 23.8(q, C-28), 64.4(t, C-29), 25.0(q, C-30), 20.6(q, —Ac), 169.5(s, —Ac); FABMS m/z 535 $[M + Na]^+$, 513 $[M + H]^+$; HRFABMS m/z 513.3577, calcd for $C_{32}H_{49}O_5$, 513.3580.

【来源】 海绵 *Jaspis* sp.

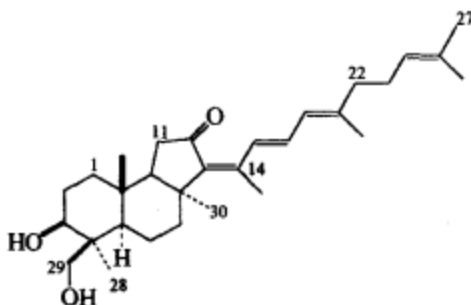
【分析方法】 海绵的有机层经过 Sephadex LH-20 (CH_2Cl_2 -MeOH, 1:1) 分成 7 个部分, 两个活性部位 (C 和 D) 由 HPLC (Dynamax C-18, MeOH- H_2O , 80:20) 分离得到化合物 29-Hydroxystelliferin A。

【生物活性与毒性】 恶性黑色素瘤 (MALME-3M) 生长抑制剂, $IC_{50} = 0.11 \mu g/mL$ 。

【参考文献】 1. Karina M, et al. J Nat Prod, 2001, 64: 389~392

A0097 29-Hydroxystelliferin D

【结构式】



【分子式】 $C_{30}H_{46}O_3$

【相对分子质量】 454

【理化常数及谱学数据】 淡黄色固体; $[\alpha]^{25}_{-34}$ (c 0.20, MeOH); UV(OH) λ_{max} : 239(3.88)nm, 353(4.46)nm; IR(KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3364, 2932, 2876, 1690, 1632, 1586, 1555, 1377, 1026, 974, 793; 1H NMR($CDCl_3$) δ : 0.925(ddd, $J = 13.0, 4.1, 3.0$, H-1), 3.11(dd, $J = 5.0, 11.5$, H-3), 1.45(dd, $J = 12.3, 1.2$, H-5), 1.73(dd, $J = 13.1, 8.1$, H-7), 1.38(dd, $J = 15.2, 7.5$, H-9), 8.70(d, $J = 15.4$, H-15), 6.97(dd, $J = 11.0, 15.4$, H-16), 6.25(dq, $J = 11.2, 1.3$, H-17), 1.81(s, H-18), 0.60(s, H-19), 1.72(d, $J = 1.5$, H-21), 5.15(sept, $J = 6.9, 1.4$, H-24), 1.52(d, $J = 1.2$, H-26), 1.64(d, $J = 1.2$, H-27), 1.26(s, H-28), 3.26(dd, $J = 11.2, 1.2$, H-29), 4.09(d, $J = 11.2$, H-29), 1.04(s, H-30); ^{13}C NMR($CDCl_3$) δ : 33.0(C-1), 29.5(C-2), 80.6(C-3), 43.7(C-4), 47.2(C-5), 18.7(C-6), 38.6(C-7), 44.5(C-8), 50.0(C-9), 35.2(C-10), 36.8(C-11), 206.0(C-12), 145.8(C-13), 142.0(C-14), 131.2(C-15), 131.0(C-16), 127.1(C-17), 15.8(C-18), 22.5(C-19), 142.3(C-20), 17.0(C-21), 40.5(C-22), 27.0(C-23), 124.4(C-24), 131.6(C-25), 17.7(C-26), 25.8(C-27), 23.8(C-28), 64.0(C-29), 24.8(C-30); HRFABMS m/z 455.3554($M + H$) $^+$ (calcd for $C_{30}H_{47}O_3$, 455.3525).

【来源】 海绵 *Stelletta globostellata*

【分析方法】 海绵的乙醇提取物经水和乙酸乙酯分配后, 乙酸乙酯层悬浮于 MeOH/ H_2O (9:1) 中, 正己烷萃取。含水甲醇层经过快速反相柱层析, MeOH/ H_2O (1:1 和 3:1)、MeOH、以及 $CHCl_3$ /MeOH/ H_2O (7:3:0.5) 洗脱。甲醇洗脱部分经 Sephadex LH-20 柱层析后, 上 RP HPLC, 依次用 MeCN/ H_2O (95:5), MeCN/50mmol/L NH_4OAc in H_2O (80:20), MeOH/50mmol/L NH_4OAc (88:12 或 86:14), MeCN/ H_2O (76:24) 洗脱得到化合物 29-Hydroxystelliferin D。

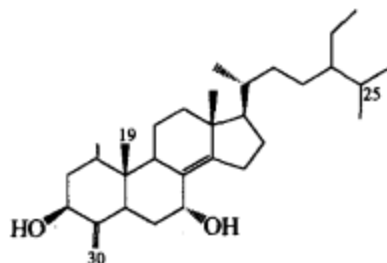
【生物活性与毒性】 3Y1 大鼠胚胎纤维原细胞与 0.2 $\mu mol/L$ 的化合物接触, 即失去伪足, 从而影响到它们与酶底物的接触。未经清洗的细胞大多在 5 天后死去。但是使用 MTT 法对 3Y1 和 P388 细胞系所做的检测却显示, 该化合物在 18 $\mu mol/L$ 时还没有细胞毒性。此外, 化合物浓度为 100 $\mu g/disk$ 时对三种真菌 (*Candida albicans*, *Mortierella ramanniana*, *Penicillium chrysogenum*) 和四种细菌 (*Bacillus*

subtilis, *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Staphylococcus aureus*) 显示抗菌活性。

【参考文献】 1. Oku N, et al. *J Nat Prod*, 2000, 63: 205

A0098 7R-Hydroxytheonellasterol

【结构式】



【分子式】 $C_{30}H_{50}O_2$

【相对分子质量】 442

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]^{25}_D + 19.4^\circ$ (c 0.35, $CHCl_3$); UV(OH) λ_{max} : 248nm; IR(KBr) ν_{max} : 3340 cm^{-1} ; 1H NMR($CDCl_3$) δ : 4.84(t, H-7), 0.87(Me-18), 0.60(Me-19), 0.97(Me-21), 0.81(Me-26), 0.83(Me-27), 1.34(H-28), 0.86(Me-29), 4.64(H-30), 5.11(H-30); ^{13}C NMR($CDCl_3$) δ : 36.3(C-1), 32.9(C-2), 73.2(C-3), 152.3(C-4), 42.6(C-5), 27.3(C-6), 79.8(C-7), 122.4(C-8), 44.6(C-9), 39.6(C-10), 19.9(C-11), 36.8(C-12), 43.5(C-13), 153.6(C-14), 25.6(C-15), 26.8(C-16), 56.5(C-17), 17.9(Me-18), 12.4(Me-19), 34.8(C-20), 19.2(Me-21), 33.6(C-22), 26.2(C-23), 46.0(C-24), 28.9(C-25), 19.0(Me-26), 19.5(Me-27), 23.0(C-28), 12.3(Me-29), 103.1(C-30); EIMS m/z 442 $[M]^+$; HRFABMS m/z 441.3718 $[M-H]^+$ (calcd for $C_{30}H_{49}O_2$, 441.3733)。

【来源】 海绵 *Theonella swinhoei*

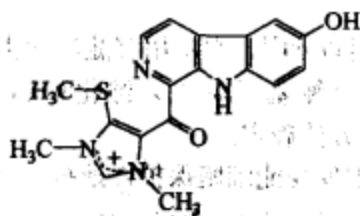
【分析方法】 海绵的甲醇提取物由乙酸乙酯和水进行分配, 乙酸乙酯层悬浮于水中, 再以正己烷萃取。所得的正己烷层经过硅胶柱层析, 以正己烷/乙酸乙酯梯度洗脱, 上正相 HPLC (Microsorb, 5 μ m, 10mm $\times$ 250mm), 正己烷: 乙酸乙酯 (85:15) 洗脱得到化合物 7R-Hydroxytheonellasterol。

【生物活性与毒性】 体外对 8 种细胞系的抗肿瘤研究显示其平均 IC_{50} 值为 29.5 μ mol/L。

【参考文献】 1. Qureshi A, et al. *J Nat Prod*, 2000, 63: 841

A0099 Hyrtiomanzamine

【结构式】



【分子式】 $C_{18}H_{18}N_4SO_2$

【相对分子质量】 354

【理化常数及谱学数据】 橘色玻璃质的固体; UV λ_{max} : 394nm; IR(KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3408, 1604, 1720, 1356; 1H NMR(300MHz, $DMSO-d_6$) δ : 12.05(1H, s, NH), 9.54(1H, s, H-13), 8.46(2H, s, H-3, 4), 7.63(1H, d, 8.3, H-8), 7.62(1H, d, 2.3, H-5), 7.60(1H, brs, OH), 7.17(1H, dd, 2.3, 9.0, H-7), 3.95(3H, s, N-CH₃), 3.90(3H, s, N-CH₃), 2.41(3H, s, S-CH₃); ^{13}C NMR(75MHz, $DMSO-d_6$) δ : 136.5(C-1), 137.3(C-3), 121.0(C-4), 132.8(C-4a), 120.8(C-4b), 106.1(C-5), 152.1(C-6), 119.4(C-7), 113.7(C-8), 136.1(C-8a), 134.1(C-9a), 184.2(C-10), 134.4(C-11), 140.2(C-13), 131.6(C-15), 37.8(N-CH₃), 33.9(N-CH₃), 18.6(S-CH₃); HRFABMS m/z 353.1053, M^+ , $\Delta + 1.8mmu^{[1]}$ 。

【来源】 海绵 *Hyrtios erecta*^[1]

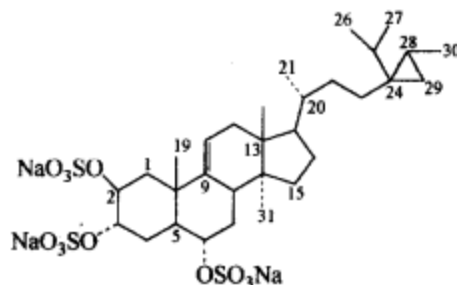
【分析方法】 样品分别用 MeOH、MeOH-CHCl₃ 1 : 1 提取, 合并提取物, 硅胶柱层析 (MeOH-CHCl₃), Sephadex LH-20 凝胶柱层析 (MeOH-CHCl₃ 8 : 2), 硅胶柱层析 (CH₃COC₂H₅-EtOAc-H₂O-HCOOH 5 : 3 : 0.5 : 0.5) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 免疫抑制活性, B 淋巴细胞反映检测 EC₅₀ 2μg/mL^[1]。

【参考文献】 1. Bourguet M L. et al. Tetrahedron Lett, 1996, 37: 3457

A0100 Ibisterol sulfate

【结构式】



【分子式】 C₃₁H₄₉S₃O₁₂Na₃

【相对分子质量】 778

【理化常数及谱学数据】 ¹H NMR (500MHz, CD₃OD) δ: 1.83 (H, dd, J = 14.0, 2.9Hz, H-1a), 2.21 (H, brd, J = 14.0Hz, H-1b), 4.90 (H, brs, H-2), 4.75 (H, brd, J = 2.4Hz, H-3), 2.34 (H, brd, J = 14.5Hz, H-4a), 1.80 (H, dd, J = 14.5; 2.4Hz, H-4b), 1.69 (H, dt, J = 10.8, 2.4Hz, H-5), 4.41 (H, dt, J = 10.8, 4.2Hz, H-6), 2.26, 1.50 (2H, m, H-7), 2.43 (H, brd, J = 12.7Hz, H-8), 5.36 (H, brd, J = 4.9Hz, H-11), 2.11 (H, brd, = 17.4Hz, H-12a), 1.94 (H, dd, J = 17.4, 4.9Hz, H-12b), 1.40 (2H, m, H-15), 1.90, 1.30 (2H, m, H-16), 1.62 (H, dt, J = 10.3, 9.3Hz, H-17), 0.68 (3H, s, H-18), 1.20 (3H, s, H-19), 1.30 (H, m, H-20), 1.01 (3H, d, J = 7.3Hz, H-21), 1.28, 1.36 (2H, m, H-22), 1.50 (2H, m, H-23), 1.30 (H, m, H-25), 0.98 (3H, d, J = 6.9Hz, H-26), 0.87 (3H, d, J = 6.4Hz, H-27), 0.65 (H, m, H-28), 0.44 (H, dd, J = 8.9, 4.4Hz, H-29a), 0.22 (H, brt, J = 4.4Hz, H-29b), 1.09 (3H, d, J = 6.3Hz, H-30), 0.85 (3H, s, H-31); ¹³C NMR (125MHz, CD₃OD): 37.55 (C-1), 75.61 (C-2), 75.39 (C-3), 25.38 (C-4), 43.50 (C-5), 78.84 (C-6), 35.34 (C-7), 41.20 (C-8), 145.80 (C-9), 40.06 (C-10), 117.97 (C-11), 38.37 (C-12), 45.51 (C-13), 48.09 (C-14), 34.80 (C-15), 28.96 (C-16), 52.15 (C-17), 15.01 (C-18), 22.60 (C-19), 38.27 (C-20), 20.77 (C-21), 34.80 (C-22), 30.41 (C-23), 28.81 (C-24), 33.05 (C-25), 18.92 (C-26), 20.69 (C-27), 18.90 (C-28), 20.28 (C-29), 14.07 (C-30), 18.75 (C-31)。

【来源】 深海海绵 *Topsentia* sp.

【分析方法】 海绵提取物在水和有机相分配, 水层用沉淀法除去多糖和蛋白等生物高聚物后上 Sephadex LH-20 (水), 再使用反相 HPLC (氰基 C18 柱) 纯化得到。结构通过 (HR) MS、IR 和 NMR (¹H NMR、¹³C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

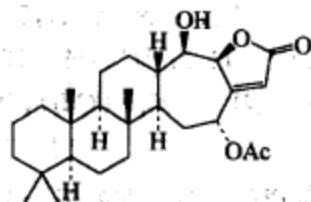
【生物活性与毒性】 在 NCI 基础筛选中发现能细胞保护性地抗 HIV-1, IC₅₀ = 10μg/mL。

【参考文献】 1. McKee T C, et al. Tetrahedron Lett, 1993, 34 (3): 389

2. Aiello A, et al. Steroids, 1999, 64: 687

A0101 Inorolide A

【结构式】



【分子式】 $C_{27}H_{40}O_5$

【相对分子质量】 444

【理化常数及谱学数据】 IR($CHCl_3$) ν_{max} (cm^{-1}): 3400, 2850 ~ 3000, 1760, 1730, 1390, 1370, 1220; HREIMS m/z : 444. 2879, $C_{27}H_{40}O_5$; 1H NMR(270MHz, $CDCl_3$) δ : 0.83(s), 0.81(s), 0.86(s), 2.03(s), 2.03(dd, $J = 4.3, 15.5$ Hz), 2.09(s), 4.04(bris), 5.17(bris), 5.91(m), 6.14(d, $J = 1.7$ Hz); ^{13}C NMR(270MHz, $CDCl_3$) δ : 39.7(t), 18.7(t), 39.9(t), 33.3(s), 56.6(d), 18.7(t), 42.0(t), 37.9(s), 59.4(d), 37.6(s), 20.8(t), 33.5(t), 43.4(d), 47.7(d), 27.7(t), 67.0(d), 163.8(s), 122.7(d), 172.2(s), 33.3(s), 21.4(q), 16.1(q), 14.9(q), 75.9(d), 83.3(d), 21.4(q), 169.5(s)。

【来源】 海绵 *Chromodoris inornata*

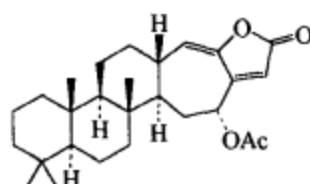
【分析方法】 氯仿/甲醇粗提物的氯仿可溶部分通过 Sephadex LH-20 和硅胶柱层析分离, 反相高效液相色谱法纯化获得活性化合物 Inorolide A。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 L1210 和 KB 的生长。

【参考文献】 1. Miyamoto T, et al. Tetrahedron Lett, 1992, 33: 5811

A0102 Inorolide B

【结构式】



【分子式】 $C_{27}H_{39}O_4$

【相对分子质量】 427

【理化常数及谱学数据】 IR(CCl_4) ν_{max} (cm^{-1}): 2850 ~ 3000, 1770, 1750, 1235; HRPFBMS m/z : 427. 2856, $C_{27}H_{39}O_4$; 1H NMR(270MHz, $CDCl_3$) δ : 0.77(s), 0.79(s), 0.81(s), 0.82(s), 1.79(dt, $J = 3.3, 12.9$ Hz), 1.96(dd, $J = 3.5, 12.7$ Hz), 2.09(s), 2.14(s), 2.36(m), 5.76(dd, $J = 1.7, 3.3$ Hz), 5.95(d, $J = 5.0$ Hz), 6.20(bris); ^{13}C NMR(270MHz, $CDCl_3$) δ : 39.9(t), 18.5(t), 40.0(t), 33.3(s), 56.4(d), 18.6(t), 42.0(t), 37.9(s), 59.0(d), 37.6(s), 20.5(t), 34.9(t), 40.0(d), 48.7(d), 30.2(t), 65.7(d), 147.0(s), 121.0(d), 168.8(s), 33.3(s), 21.2(q), 16.3(q), 14.9(q), 123.5(d), 153.8(d), 21.5(q), 169.9(s)。

【来源】 海绵 *Chromodoris inornata*

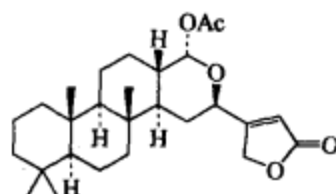
【分析方法】 氯仿/甲醇粗提物的氯仿可溶部分通过 Sephadex LH-20 和硅胶柱层析分离, 反相高效液相色谱法纯化获得活性化合物 Inorolide B。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 L1210 和 KB 的生长。

【参考文献】 1. Miyamoto T, et al. Tetrahedron Lett, 1992, 33: 5811

A0103 Inorolide C

【结构式】



【分子式】 $C_{27}H_{40}O_5$

【相对分子质量】 445

【理化常数及谱学数据】 IR($CHCl_3$) ν_{max} (cm^{-1}): 2850 ~ 3050, 1780, 1745, 1240; HRPFBMS m/z :

$C_{27}H_{40}O_5$, 445.2934; 1H NMR (270MHz, $CDCl_3$) δ : 0.81(s), 0.84(s), 0.85(s), 0.86(s), 2.12(s), 4.76 (brd, $J = 10.9$ Hz), 4.84(brs), 5.92(d, $J = 1.3$ Hz), 6.03(d, $J = 3.1$ Hz); ^{13}C NMR (270MHz, $CDCl_3$) δ : 39.9(t), 18.4(t), 40.4(t), 33.3(s), 56.7(d), 18.6(t), 42.1(t), 37.6(s), 59.6(d), 37.6(s), 19.5(t), 29.7(t), 37.5(d), 46.3(d), 27.8(t), 68.3(d), 169.7(s), 114.7(d), 173.4(s), 33.4(s), 21.4(q), 16.5(q), 14.6(q), 93.5(d), 70.9(t), 21.0(q), 1696(s).

【来源】 海绵 *Chromodoris inornata*

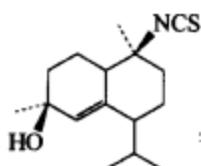
【分析方法】 氯仿/甲醇粗提物的氯仿可溶部分通过 Sephadex LH-20 和硅胶柱层析分离, 反相高效液相色谱法纯化获得活性化合物 Inorolide C。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 L1210 和 KB 的生长。

【参考文献】 1. Miyamoto T, et al. Tetrahedron Lett, 1992, 33: 5811

A0104 (4S*, 10S*)-10-Isothiocyanato-5-amorphene-4-ol

【结构式】



【分子式】 $C_{16}H_{25}NSO$

【相对分子质量】 279

【理化常数及谱学数据】 油状物; IR ν_{max} (cm^{-1}): 3561 (br OH), 2100 (NCS); IREIMS m/z : $[M]^+$ 261 (61), 85 (70), 83 (100) ($C_{16}H_{23}NS$ requires 261); 1H NMR (300MHz, C_6D_6) δ : 6.24(s, H-5), 3.01(s, H-7), 3.01(h, $J = 6.9$ Hz, H-11), 0.96(d, $J = 6.6$ Hz, Me-12), 1.01(d, $J = 6.6$ Hz, Me-13), 1.63(s, Me-14), 1.63(s, Me-15), 2.21~0.83(complex); ^{13}C NMR (75MHz, $CDCl_3$) δ : 47.5(d, C-1), 22.6(t, C-2), 36.0(t, C-3), 69.0(s, C-4), 130.0(d, C-5), 137.0(s, C-6), 47.0(d, C-7), 22.0(t, C-8), 40.5(t, C-9), 66.0(s, C-10), 28.0(d, C-11), 17.6(q, C-12), 22.0(q, C-13), 26.8(q, C-14), 26.8(q, C-15), 126.0(s, NCS).

【来源】 海绵 *Axinyssa fenestratus*

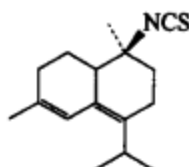
【分析方法】 甲醇粗提物用氯仿萃取得到的活性部位, 经硅胶柱层析分离, 正相及反相高效液相色谱法纯化获得活性成分 (4S*, 10S*)-10-Isothiocyanato-5-amorphene-4-ol。

【生物活性与毒性】 抗寄生虫作用。

【参考文献】 1. Alvi K A, et al. J Nat Prod, 1991, 54: 71

A0105 10-Isothiocyanato-4,6-amorphene

【结构式】



【分子式】 $C_{16}H_{23}NS$

【相对分子质量】 261

【理化常数及谱学数据】 油状物; $[\alpha]_D + 74.4$ (c 9.8, $CHCl_3$); IR ν_{max} : 2104 cm^{-1} (NCS), 1673 cm^{-1} ; IREIMS m/z : $[M]^+$ 261 (61), 85 (70), 83 (100) ($C_{16}H_{23}NS$ requires 261); 1H NMR (300MHz, $CDCl_3$) δ : 2.12(bd, $J = 5.1$ Hz, H-3), 6.22(brs, H-5), 1.04(m), 2.04(bm, H-8 ax and H-9 eq), 2.20(m, H-8 eq), 1.60(dt, $J = 13.0, 12.9, 6.0$ Hz, H-9 ax), 3.07(h, $J = 6.9$ Hz, H-11), 0.97(d, $J = 6.6$ Hz, Me-12), 1.02(d, $J = 6.6$ Hz, Me-13), 1.44(s, Me-14), 1.77(s, Me-15); ^{13}C NMR (75MHz, $CDCl_3$) δ : 46.7(d, C-

1), 25.4(t, C-2), 29.5(t, C-3), 137.0(s, C-4), 121.5(d, C-5), 125.8(s, C-6), 135.6(s, C-7), 22.2(t, C-8), 37.7(t, C-9), 63.5(s, C-10), 32.0(d, C-11), 21.9(q, C-12), 21.9(q, C-13), 28.6(q, C-14), 24.5(q, C-15), 131.4(s)。

【来源】 海绵 *Axinyssa fenestratus*

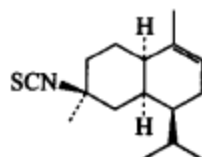
【分析方法】 甲醇粗提物用氯仿萃取得到的活性部位, 经硅胶柱层析分离, 正相及反相高效液相色谱法纯化获得活性成分 10-Isothiocyanato-4,6-amorphene。

【生物活性与毒性】 抗寄生虫作用。

【参考文献】 1. Alvi K A, et al. J Nat Prod, 1991, 54: 71

A0106 (1R*, 4S*, 6R*, 7S*)-4-Isothiocyanato-9-amorphene

【结构式】



【分子式】 $C_{16}H_{25}NS$

【相对分子质量】 263

【理化常数及谱学数据】 油状物; $[\alpha]_D^{25} + 111.7^\circ (c\ 2.5, CHCl_3)$; IR ν_{max} : 2103(NCS) cm^{-1} ; IREIMS m/z : $[M]^+$ 263(60), 230(—SH, 10), 205(—NCS, 100), 204(—HNCS, 72), 161(—HNCS-isopropyl, 60) ($C_{16}H_{25}NS$ requires 263); 1H NMR(300MHz, $CDCl_3$) δ : 2.20(m), 1.96(m), 1.04(m), 1.90(m), 5.47(m, H-9), 1.43(m, H-11), 0.87(d, $J = 6.0$ Hz, Me-12 and Me-13), 1.63(s, Me-14), 1.47(s, Me-15); ^{13}C NMR(75MHz, $CDCl_3$) δ : 44.5(d, C-1), 24.1(t, C-2), 33.9(t, C-3), 61.4(s, C-4), 35.0(t, C-5), 32.8(d, C-6), 38.8(d, C-7), 27.7(t, C-8), 124.2(d, C-9), 132.3(s, C-10), 29.6(d, C-11), 20.7(q, C-12), 20.6(q, C-13), 21.2(q, C-14), 24.5(q, C-15)。

【来源】 海绵 *Axinyssa fenestratus*

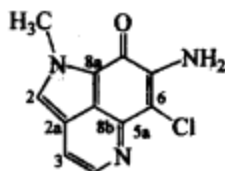
【分析方法】 甲醇粗提物用氯仿萃取得到的活性部位, 经硅胶柱层析分离, 正相及反相高效液相色谱法纯化获得活性成分 (1R*, 4S*, 6R*, 7S*)-4-Isothiocyanato-9-amorphene。

【生物活性与毒性】 抗寄生虫作用。

【参考文献】 1. Alvi K A, et al. J Nat Prod, 1991, 54: 71

A0107 Isobatzelline E

【结构式】



【分子式】 $C_{11}H_8ClN_3O$

【相对分子质量】 233

【理化常数及谱学数据】 红色固体; UV(MeOH) λ_{max} : 224nm(3.72), 341nm(2.26), 422nm(3.43); IR (film) ν_{max} (cm^{-1}): 3250, 2960, 2927, 1680, 1620, 1550, 1196; 1H NMR(500MHz, $DMSO-d_6$) δ : 8.25(s, H-2), 7.56(d, H-3), 8.35(d, H-4), 4.27(s, —NMe), 8.33(brs, 5-NH), 6.33(brs, 7-NH₂); ^{13}C NMR(125MHz, $DMSO-d_6$) δ : 132.2(d, C-2), 123.4(s, C-2a), 112.9(d, C-3), 142.0(d, C-4), 143.8(s, C-5a), 104.9(s, C-6), 146.0(s, C-7), 164.8(s, C-8), 117.9(s, C-8a), 117.4(s, C-8b), 37.3(q, C-NMe); HRFABMS(NBA) m/z 234.0441 $[(M+H)^+]$; $C_{11}H_8ON_3Cl$ m/z 234.0445。

【来源】 海绵 *Zyzya fuliginosa*

【分析方法】 1:1 CH₂Cl₂-MeOH 的海绵提取物浓缩后以 EtOAc-H₂O 进行分配, EtOAc 层经快速硅胶柱层析, 氯仿/甲醇梯度洗脱, 活性部位经 Sephadex LH-20 柱层析, 得到化合物 Isobatzelline E。

【生物活性与毒性】 体外试验具有微弱的 DNA 修复酶干扰作用。

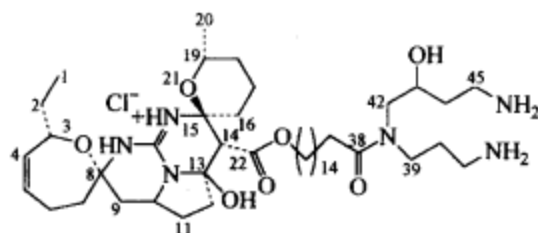
【参考文献】 1. Chang C, et al. J Nat Prod, 2002, 65: 776

2. Sun H H, et al. J Org Chem, 1990, 55: 4964

3. Ding Q Z, et al. Curr Med Chem, 1999, 6: 1

A0108 Isocrambescidin 816

【结构式】



【分子式】 C₄₅H₈₀N₆O₇

【相对分子质量】 816

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha] + 166.8^\circ$ (c 0.45, MeOH); HRFABMS m/z 817.6151 [M + H]⁺; ¹H NMR (500 MHz, MeOD) δ : 0.88 (3H, t, $J = 7.0$ Hz, H-1), 1.65, 1.45 (2H, m, H-2), 4.47 (H, brd, $J = 10.0$ Hz, H-3), 5.50 (H, brd, $J = 11.0$ Hz, H-4), 5.72 (H, brt, $J = 11.0$ Hz, H-5), 2.37, 2.19 (2H, m, H-6), 2.40, 1.95 (2H, m, H-7), 1.44 (H, t, $J = 13.0$ Hz, H-9a), 2.65 (H, dd, $J = 13.0, 4.5$ Hz, H-9b), 4.29 (H, m, H-10), 2.41, 1.61 (2H, m, H-11), 2.20, 2.00 (2H, m, H-12), 3.46 (H, s, H-14), 1.87, 1.65 (2H, m, H-16), 2.00, 1.70 (2H, m, H-17), 1.72, 1.35 (2H, m, H-16), 3.96 (H, m, H-19), 1.12 (3H, d, $J = 6.5$ Hz, H-20), 4.15 (2H, t, $J = 6.5$ Hz, H-23), 1.62 (2H, m, H-24), 2.50 (2H, m, H-37), 3.65, 3.40 (2H, m, H-39), 1.90 (2H, m, H-40), 2.28 (2H, m, H-41), 3.45, 3.30 (2H, m, H-42), 3.96 (H, m, H-43), 1.87, 1.73 (2H, m, H-44), 3.10 (2H, m, H-45); ¹³C NMR (MeOD): 10.9 (C-1), 26.4 (C-2), 72.5 (C-3), 134.3 (C-4), 131.3 (C-5), 24.4 (C-6), 38.2 (C-7), 85.1 (C-8), 37.5 (C-9), 64.1 (C-10), 30.0 (C-11), 37.7 (C-12), 90.5 (C-13), 55.9 (C-14), 85.4 (C-15), 32.8 (C-16), 19.1 (C-17), 32.4 (C-18), 70.0 (C-19), 21.7 (C-20), 149.5 (C-21), 168.7 (C-22), 67.1 (C-23), 29.6 (C-24), 27.0 (C-36), 34.2 (C-37), 177.5 (C-38), 43.9 (C-39), 26.6 (C-40), 38.3 (C-41), 54.8 (C-42), 68.5 (C-43), 32.9 (C-44), 38.5 (C-45)。

【来源】 地中海海绵 *Crambe crambe*

【分析方法】 海绵甲醇-甲苯 (3:1) 提取物在水和氯仿间分配, 氯仿层上 Sephadex LH-20 (甲醇), 得到的 HSV-1 抗病毒分析有活性的部分用正己烷-乙酸乙酯-甲醇-水 (4:7:4:3) 萃取, 有机层再使用反相 HPLC (1.8 mL/min) 分离得到。平面结构通过 (HR) MS 和 NMR (¹H NMR, ¹³C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。立体结构由 Mosher 法确定。

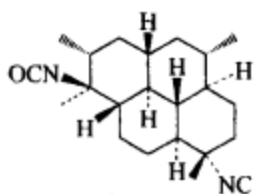
【生物活性与毒性】 1. 钙离子通道阻断剂, IC₅₀ = 0.15 μ mol/L $\pm$ 0.02 μ mol/L。2. 在 2×10^{-2} mg/L 下对 *L. reticulatus* 鱼有毒鱼作用。

【参考文献】 1. Berlinck R G S, et al. J Org Chem, 1991, 56 (9): 5712

2. Berlinck R G S, et al. J Nat Prod, 1993, 56 (7): 1007

A0109 (1S, 3S, 4R, 7S, 8S, 11S, 12S, 13S, 15R, 20R)-20-Isocyanto-7-isocyanoisocycloamphilectane

【结构式】



【分子式】 $C_{22}H_{32}N_2O$

【相对分子质量】 340

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} + 37.0^\circ$ (c 0.58); UV $\lambda_{max}(\epsilon)$: 226(1530) nm; IR (KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 2930, 2260, 2130, 1450, 1380; 1H NMR (300 MHz, $CDCl_3$) δ : 2.11(1H, m, H-9), 2.05(1H, m, H-10), 2.01(1H, m, H-6), 1.96(1H, m, H-1), 1.84(1H, m, H-5), 1.81(1H, m, H-6), 1.55(1H, m, H-22), 1.46(1H, m, H-15), 1.38(1H, m, H-8), 1.37(1H, m, H-14), 1.32(3H, s, H-16), 1.28(3H, s, H-19), 1.25(1H, m, H-10), 1.12(1H, m, H-3), 1.09(1H, m, H-14), 1.07(1H, m, H-9), 0.97(1H, m, H-11), 0.96(3H, d, 6.7, H-17), 0.92(1H, m, H-12), 0.91(1H, m, H-5), 0.87(3H, d, 6.5, H-18), 0.81(1H, m, H-2), 0.74(1H, m, H-4), 0.64(1H, m, H-13); ^{13}C NMR (75 MHz, $CDCl_3$) δ : 40.9(C-1), 42.4(C-2), 36.5(C-3), 47.7(C-4), 25.7(C-5), 40.5(C-6), 60.5(C-7), 48.4(C-8), 25.4(C-9), 25.8(C-10), 50.1(C-11), 46.4(C-12), 45.4(C-13), 38.2(C-14), 41.3(C-15), 25.1(C-16), 16.3(C-17), 19.7(C-18), 20.4(C-19), 64.5(C-20), 152.4(C-21), 121.9(C-22); HREIMS $[M]^+$ m/z obsd 340.2497, $\Delta = 0.0$ mmu; EIMS m/z 340(8), 325(13), 313(40), 298(25), 270(100), 255(90)^[1].

【来源】 海绵 *Cymbastela hooperi*^[1]

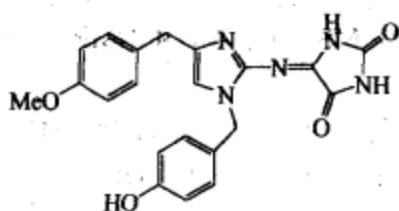
【分析方法】 样品分别用 CH_2Cl_2 、acetone 提取, 合并提取物, 硅胶柱层析 (P. ether-EtOAc), HPLC (acetone- H_2O 4:1) 得到纯化合物^[1].

【生物活性与毒性】 细胞毒和抗疟活性: 细胞毒 KB IC_{50} 4300 ng/mL, 抗疟 *P. falciparum* Clone D6 IC_{50} 3.2 ng/mL, *P. falciparum* W2 IC_{50} 2.5 ng/mL^[1].

【参考文献】 1. Koenig G M, et al. J Org Chem, 1996, 61: 3259

A0110 Isonaamidine D

【结构式】



【分子式】 $C_{21}H_{19}N_5O_4$

【相对分子质量】 405

【理化常数及谱学数据】 黄色无定形粉末; UV (MeOH) $\lambda_{max}(\epsilon)$ (nm): 226(18900), 278(4000), 370(6600); 1H NMR (500 MHz, $DMSO-d_6$) δ : 8.46(1H, br, NH), 7.13(2H, d, 8.5, H-14), 7.04(2H, d, 8.5, H-19), 6.81(2H, d, 8.5, H-15), 6.67(2H, d, 8.5, H-20), 6.62(1H, s, H-4), 6.44(1H, s, NH), 5.02(2H, s, H-12), 3.71(2H, s, H-17), 3.69(3H, s, 21-OMe); 1H NMR (500 MHz, CD_3OD) δ : 7.13(2H, d, 8, H-14), 7.12(2H, d, 8, H-19), 6.82(2H, d, 8, H-15), 6.70(2H, d, 8, H-20), 6.64(1H, s, H-4), 5.15(2H, s, H-12), 3.80(2H, s, H-17), 3.74(3H, s, 21-OMe); ^{13}C NMR (125 MHz, $DMSO-d_6$) δ : 34.3(q), ca. 49(t, overlapped with solvent peaks), 55.6(q), 114.8(d), 116.4(d), 116.9(d), 130.5(d), 130.7(d); ^{13}C NMR (125 MHz, CD_3OD) δ : 33.6(t), 46.8(t), 54.9(q), 113.9(d), 115.4(d), 115.6(d), 129.1(d), 129.6(d) (due to the scarcity of sample, the quaternary carbon signals are weak or could not be observed); MALDI-TOFMS m/z 406 $[M+H]^+$ ^[1].

【来源】 海绵 *Leucetta* cf. *chagosensis*^[1]

【分析方法】 样品甲醇、甲醇-二氯甲烷 1:1 提取, 提取物合并, hexane、CH₂Cl₂、BuOH 萃取, CH₂Cl₂ 部分硅胶柱层析 (CH₂Cl₂-MeOH), HPLC 柱层析 (MeOH-H₂O 62:38) 得到纯化合物^[1]。

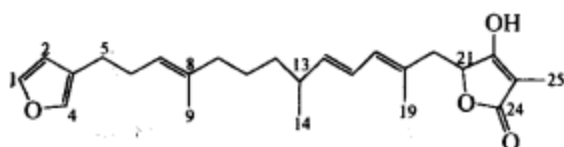
【生物活性与毒性】 弱的抗真菌活性, 抗 *Aspergillus niger* MIC 100 μg/mL^[1]。

【参考文献】 1. Fu X, et al. J Nat Prod, 1998, 61: 384

2. Alvi K A, et al. Tetrahedron, 1993, 49: 329

A0111 Isopalinurin

【结构式】



【分子式】 C₂₅H₃₄O₄

【相对分子质量】 398

【理化常数及谱学数据】 不稳定黄色油状物; $[\alpha] + 32.4^\circ$ (c 1.31, CHCl₃); HREIMS m/z 398.2462 $[M]^+$; LREIMS m/z (rel. int.) 398 ($[M]^+$, 2), 285 (1.7), 135 (60), 107 (32), 81 (71), 43 (100), 18 (74); IR (film) $\nu_{\max}$ (cm⁻¹): 3441, 2928, 1735, 1664; UV (CHCl₃) $\lambda_{\max}$: 292 nm; ¹H NMR (CDCl₃) δ : 0.97 (3H, d, J = 6.8 Hz, H-14), 1.32 (2H, m, H-11), 1.32 (2H, m, H-12), 1.55 (3H, s, H-9), 1.71 (3H, s, H-25), 1.80 (3H, s, H-19), 1.94 (2H, t, J = 7.0 Hz, H-10), 2.14 (H, dd, J = 14.6, 1.5 Hz, H-20a), 2.22 (2H, m, H-6), 2.44 (H, dd, J = 14.6, 1.5 Hz, H-20a), 4.77 (H, dd, J = 6.6, 1.5 Hz, H-21), 5.14 (H, t, J = 6.8 Hz, H-7), 5.48 (H, dd, J = 15.1, 7.8 Hz, H-15), 5.90 (H, d, J = 10.5 Hz, H-17), 6.16 (H, dd, J = 15.1, 10.5 Hz, H-16), 6.26 (H, brs, H-2), 7.19 (H, brs, H-4), 7.32 (H, brs, H-1); ¹³C NMR (CDCl₃): 142.5 (C-1), 111.0 (C-2), 124.9 (C-3), 138.7 (C-4), 25.0 (C-5), 28.4 (C-6), 123.6 (C-7), 135.0, 135.5 (C-8, C-18), 15.9 (C-9), 39.7 (C-10), 25.6, 29.6 (C-11, C-12), 36.9 (C-13), 20.6 (C-14), 140.3 (C-15), 124.2 (C-16), 128.6 (C-17), 17.0 (C-19), 42.2 (C-20), 77.5 (C-21), 174.7 (C-22), 97.1 (C-23), 6.0 (C-25)。

【来源】 巴士海峡海绵 *Dydidea* sp.

【分析方法】 海绵的乙醇提取物的二氯甲烷萃取层上闪式硅胶柱 (石油醚-乙酸乙酯), 在 80% 乙酸乙酯-石油醚部分得到。结构通过 (HR) MS、IR、UV 和 NMR (¹H NMR、¹³C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

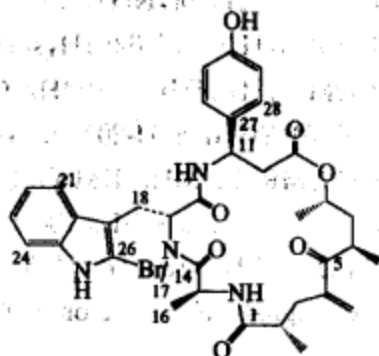
【生物活性与毒性】 1. 缓和的抗菌活性。2. 在 2.5 mmol 时有弱的蛋白磷酸酯酶抑制作用。

【参考文献】 1. Murray L, et al. Aust J Chem, 1993, 46: 1291

2. Murray L, et al. Aust J Chem, 1993, 46: 1824

A0112 Jaspamide B

【结构式】



【分子式】 C₃₆H₄₃BrN₄O₇

【相对分子质量】 723/725

【理化常数及谱学数据】 无色玻璃状化合物; $[\alpha]^{25} + 11.4^\circ (c\ 0.0014, \text{CHCl}_3)$; UV(OH) $\lambda_{\max}$: 232(3.75) nm, 278(3.66) nm; IR(KBr) $\nu_{\max} (\text{cm}^{-1})$: 3400, 1724, 1680, 1639; $^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3) \delta$: 8.15(1H, s, NH-Br-Trp), 7.52(1H, d, $J = 7.9\text{Hz}$, H-21), 7.26(1H, d, $J = 7.9\text{Hz}$, H-24), 7.15(1H, t, $J = 7.9\text{Hz}$, H-23), 7.10(1H, t, $J = 7.9\text{Hz}$, H-22), 7.05(1H, d, $J = 6.8\text{Hz}$, NH- α -Tyr), 6.78(2H, d, $J = 8.3\text{Hz}$, H-28), 6.60(2H, d, $J = 8.3\text{Hz}$, H-29), 6.35(1H, d, $J = 6.9\text{Hz}$, NH-Ala), 5.92(1H, s, H-35a), 5.82(1H, s, H-35b), 5.68(1H, dd, $J = 7.5, 9.0\text{Hz}$, H-13), 5.23(1H, m, H-11), 4.75(1H, m, H-8), 4.65(1H, m, H-15), 3.40(1H, dd, $J = 14.7, 7.5\text{Hz}$, H-18a), 3.26(1H, dd, $J = 14.7, 9.0\text{Hz}$, H-18b), 3.12(1H, m, H-6), 3.02(3H, s, H-17), 2.70(2H, d, $J = 5.7\text{Hz}$, H-10), 2.57(1H, dd, $J = 12.7, 3.1\text{Hz}$, H-3a), 2.50(1H, m, H-2), 2.32(1H, t, $J = 12.7\text{Hz}$, H-3b), 1.98(1H, m, H-7a), 1.45(1H, m, H-7b), 1.15(3H, d, $J = 5.88\text{Hz}$, H-36), 1.15(3H, d, $J = 5.70\text{Hz}$, H-33), 1.05(3H, d, $J = 6.8\text{Hz}$, H-34), 0.85(3H, d, $J = 6.8\text{Hz}$, H-16); $^{13}\text{C NMR}(\text{CDCl}_3) \delta$: 217.0 (s, C-5), 176.2 (s, C-1), 173.4 (s, C-14), 170.2 (s, C-9), 169.0 (s, C-12), 155.7 (s, C-30), 147.4 (s, C-4), 135.2 (s, C-25), 133.0 (s, C-27), 128.3 (s, C-20), 127.5 (t, C-35), 127.0 (d, C-28), 120.4 (d, C-22), 122.4 (d, C-23), 118.2 (d, C-21), 115.4 (d, C-29), 110.6 (s, C-24), 110.1 (d, C-19), 109.0 (s, C-26), 69.3 (d, C-8), 55.5 (d, C-13), 49.0 (d, C-11), 45.3 (d, C-15), 40.8 (d, C-7), 40.8 (t, C-10), 40.1 (d, C-2), 37.5 (t, C-3), 36.0 (d, C-6), 30.8 (q, C-17), 23.2 (t, C-18), 20.6 (q, C-33), 18.4 (q, C-36), 17.9 (q, C-16), 17.7 (q, C-34); FABMS 723-725 $[\text{M} + \text{H}]^+$.

【来源】 海绵 *Jaspis splendans*

【分析方法】 海绵的甲醇提取物悬浮于含水 10% 的甲醇中, 正己烷萃取。往含水甲醇层加水稀释至含水量为 20% 和 40%, 依次用四氯甲烷和氯仿萃取。有活性的氯仿层经硅胶 MPLC (Merck Kiesegel 60, 230~400 mesh), MeOH/CH₂Cl₂ 0~10% 洗脱, 接下来上 C18 μ -Bondapak HPLC 柱, 65% 含水 MeOH 洗脱得到化合物 Jaspamide B。

【生物活性与毒性】 体外试验显示抗人 NSCLC-N6 肿瘤细胞株的 IC₅₀ 值为 3.3 $\mu\text{g/mL}$ 。

【参考文献】 1. Zampella A, et al. J Nat Prod, 1999, 62: 332

2. Zabriskie T M, et al. J Am Chem Soc, 1986, 108: 3123

3. Braekman J C, et al. J Nat Prod, 1987, 50: 994

4. Inman W, et al. J Am Chem Soc, 1989, 111: 2822

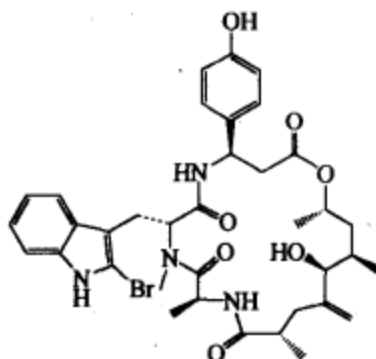
5. Antonio J, et al. J Nat Prod, 1993, 56: 54

6. Gulavita N K, et al. J Nat Toxins, 1996, 5: 225

7. Hibino S, et al. Nat Prod Rep, 2001, 104: 65

A0113 Jaspamide C

【结构式】



【分子式】 C₃₆H₄₅BrN₄O₇

【相对分子质量】 725/727

【理化常数及谱学数据】 无色玻璃状化合物; $[\alpha]^{25} + 25.4^\circ (c\ 0.0013, \text{CHCl}_3)$; UV(OH) $\lambda_{\max}$: 220(3.37) nm, 276(2.71) nm; $^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3) \delta$: 8.08(1H, s, NH-Br-Trp), 7.57(1H, d, $J = 7.3\text{Hz}$, NH- α -Tyr),

7.56(1H, d, $J = 7.3$ Hz, H-21), 7.24(1H, d, $J = 7.3$ Hz, H-24), 7.13(1H, t, $J = 7.3$ Hz, H-23), 7.09(1H, t, $J = 7.3$ Hz, H-22), 6.97(2H, d, $J = 8.3$ Hz, H-28), 6.62(2H, d, $J = 8.3$ Hz, H-29), 6.07(1H, d, $J = 8.4$ Hz, NH-Ala), 5.80(1H, dd, $J = 10.3, 6.0$ Hz, H-13), 5.18(1H, m, H-11), 5.14(1H, s, H-35a), 5.10(1H, s, H-35b), 4.90(1H, m, H-8), 4.44(1H, m, H-15), 4.08(1H, d, $J = 5.9$ Hz, H-5), 3.43(1H, dd, $J = 15.3, 6.0$ Hz, H-18a), 3.15(1H, dd, $J = 15.3, 10.3$ Hz, H-18b), 3.05(3H, s, H-17), 3.01(1H, dd, $J = 15.8, 8.3$ Hz, H-10a), 2.70(1H, dd, $J = 15.8, 9.9$ Hz, H-10b), 2.36(1H, dd, $J = 14.5, 3.1$ Hz, H-3a), 2.17(1H, dd, $J = 14.5, 8.6$ Hz, H-3b), 1.62(1H, m, H-2), 1.62(2H, m, H-7), 1.60(1H, m, H-6), 1.14(3H, d, $J = 6.8$ Hz, H-36), 1.05(3H, d, $J = 6.3$ Hz, H-33), 0.84(3H, d, $J = 6.8$ Hz, H-34), 0.74(3H, d, $J = 6.6$ Hz, H-16); ^{13}C NMR(CDCl_3) δ : 175.7(s, C-1), 174.8(s, C-12), 174.0(s, C-14), 170.6(s, C-9), 155.7(s, C-30), 140.2(s, C-4), 135.0(s, C-25), 133.0(s, C-27), 128.2(s, C-20), 127.2(d, C-28), 122.3(d, C-23), 120.4(d, C-22), 119.6(t, C-35), 118.3(d, C-21), 117.4(d, C-29), 110.5(s, C-24), 110.2(d, C-19), 109.0(s, C-26), 91.5(d, C-5), 70.3(d, C-8), 55.2(d, C-13), 49.2(d, C-11), 45.3(d, C-15), 41.0(d, C-7), 40.8(t, C-10), 40.4(d, C-2), 36.4(t, C-3), 30.5(d, C-6), 30.8(q, C-17), 23.5(t, C-18), 20.9(q, C-34), 20.0(q, C-36), 19.5(q, C-33), 17.8(q, C-16); FABMS m/z 725~727 $[\text{M} + \text{H}]^+$ 。

【来源】 海绵 *Jaspis splendans*

【分析方法】 海绵的甲醇提取物悬浮于含水 10% 的甲醇中，正己烷萃取。往含水甲醇层加水稀释至含水量为 20% 和 40%，依次用四氯甲烷和氯仿萃取。有活性的氯仿层经硅胶 MPLC (Merck Kiesegel 60, 230~400 mesh)， $\text{MeOH}/\text{CH}_2\text{Cl}_2$ 0~10% 洗脱，接下来上 C18 μ -Bondapak HPLC 柱，65% 含水 MeOH 洗脱得到化合物 Jaspamide C。

【生物活性与毒性】 体外试验显示抗人 NSCLC-N6 肿瘤细胞株的 IC_{50} 值为 1.1 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 。

【参考文献】 1. Zampella A, et al. *J Nat Prod*, 1999, 62: 332

2. Zabriskie T M, et al. *J Am Chem Soc*, 1986, 108: 3123

3. Braekman J C, et al. *J Nat Prod*, 1987, 50: 994

4. Inman W, et al. *J Am Chem Soc*, 1989, 111: 2822

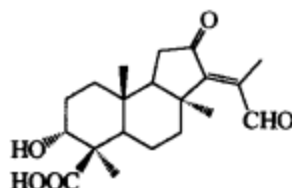
5. Antonio J, et al. *J Nat Prod*, 1993, 56: 54

6. Gulavita N K, et al. *J Nat Toxins*, 1996, 5: 225

7. Hibino S, et al. *Nat Prod Rep*, 2001, 104: 65

A0114 Jaspiferal G

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{20}\text{H}_{28}\text{O}_5$

【相对分子质量】 348

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} - 82^\circ$ (c 0.18, C_6H_6); UV(MeOH) λ_{max} (ϵ): 205(7000) nm, 266(12000) nm; IR(neat) ν_{max} (cm^{-1}): 3500, 1730, 1700, 1680; ^1H NMR(500 MHz, CDCl_3 -MeOH 9:1) δ : 10.1(1H, s, H-15), 4.06(1H, brs, H-3), 2.41(1H, dd, 8.2, 2.4, H-5), 2.22(2H, m, H-7), 2.18(1H, m, H-11), 2.14(1H, m, H-11), 2.12(1H, brd, 13.1, H-2), 2.05(3H, s, CH_3 -14), 1.94(1H, m, H-9), 1.80(1H, m, H-1), 1.75(2H, m, H-6), 1.65(1H, m, H-2), 1.48(3H, s, CH_3 -8), 1.25(3H, s, CH_3 -4), 1.06(1H, brd, 13.1, H-1), 0.95(3H, s, CH_3 -10); ^{13}C NMR(125 MHz, CDCl_3 -MeOH 9:1) δ : 28.7(C-1), 27.3(C-2), 70.2(C-3), 47.5(C-4), 40.5(C-5), 21.2(C-6), 43.4(C-7), 45.4(C-8), 49.7(C-9), 35.9(C-10), 35.4(C-11), 208.9(C-12), 158.9(C-13), 137.3(C-14), 194.8(C-15), 23.9(CH_3 -4), 180.3(COOH), 27.6(CH_3 -

8), 20.2(CH₃-10), 11.0(CH₃-14)^[1]。

【来源】 海绵 *Jaspis stellifera*^[1]

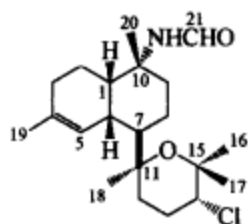
【分析方法】 样品用 MeOH 提取, EtOAc 萃取部分硅胶柱层析 (CHCl₃-MeOH 9 : 1), 正相 HPLC (hexane-CHCl₃-MeOH 60 : 37 : 3) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 细胞毒活性 IC₅₀: L1210 0.54μg/mL, KB 1.8μg/mL, 抗真菌 *Cryptococcus neoformans* (MIC 50μg/mL), *Trichophyton mentagrophytes* (MIC 12.5μg/mL), 抗菌 *Sarcina lutea* (MIC 50μg/mL)^[1]。

【参考文献】 1. Kobayashi J, et al. Tetrahedron, 1996, 52: 5745

A0115 Kalihinene X

【结构式】



【分子式】 C₂₁H₃₄O₂ClN

【相对分子质量】 367

【理化常数及谱学数据】 HRFABMS m/z 368.2374[M + H]⁺; ¹³C NMR(CDCl₃) δ: 45.9(C-1), 19.1(C-2), 30.6(C-3), 129.7(C-4), 128.0(C-5), 35.0(C-6), 50.8(C-7), 22.5(C-8), 32.8(C-9), 55.2(C-10), 76.0(C-11), 37.0(C-12), 27.5(C-13), 65.0(C-14), 75.2(C-15), 22.8(C-16), 30.5(C-17), 21.0(C-18), 23.2(C-19), 27.2(C-20), 162.8(C-21)。

【来源】 海绵 *Acanthella cavernosa*

【分析方法】 海绵的乙醇提取物在水和乙醚间分配, 乙醚层再在甲醇-水和正己烷间分配, 正己烷层经过反复硅胶柱 (正己烷-乙醚-乙酸乙酯以及苯-乙酸乙酯) 分离得到纯品。平面结构通过 (HR) MS 和 NMR (¹H NMR、¹³C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。立体结构由文献对照法确定。

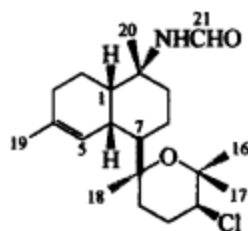
【生物活性与毒性】 抑制白鹅黑雁 *B. amphitrite* 幼虫的附着与变形, ED₅₀ = 0.49μg/mL。

【参考文献】 1. Okino T, et al. Tetrahedron Lett, 1995, 36 (47): 8637

2. Fusetani N, et al. Tennen Yuki Kagobutsu Toronkai Koen Yosh, 1989, 31: 340
3. Fusetani N, et al. Tetrahedron Lett, 1990, 31: 3599
4. Braekman J C, et al. Bull Soc Chim Belg, 1994, 103: 187
5. Rodriguez J, et al. Tetrahedron, 1994, 50: 11079
6. Fusetani N, et al. J Nat Toxins, 1996, 5: 249
7. Dumdei E J, et al. Comp Biochem Physiol A Comp Physiol, 1997, 118: 1385
8. Braekman J C, et al. Bull Soc Chim Belg, 1994, 103: 187
9. Miyaoka H, et al. Tetrahedron Lett, 2002, 43: 2227

A0116 Kalihinene Z

【结构式】



【分子式】 $C_{21}H_{34}O_2ClN$

【相对分子质量】 367

【理化常数及谱学数据】 HRFABMS m/z 368.2333 $[M+H]^+$; ^{13}C NMR($CDCl_3$) δ : 45.8(C-1), 19.5(C-2), 30.6(C-3), 130.3(C-4), 128.0(C-5), 35.1(C-6), 48.6(C-7), 22.9(C-8), 33.2(C-9), 56.7(C-10), 76.0(C-11), 29.2(C-12), 25.7(C-13), 64.1(C-14), 76.0(C-15), 22.8(C-16), 29.3(C-17), 18.4(C-18), 23.2(C-19), 27.2(C-20), 162.8(C-21)。

【来源】 海绵 *Acanthella cavernosa*

【分析方法】 海绵的乙醇提取物在水和乙醚间分配, 乙醚层再在甲醇-水和正己烷间分配, 正己烷层经过反复硅胶柱(正己烷-乙醚-乙酸乙酯以及苯-乙酸乙酯)分离得到纯品。平面结构通过(HR)MS和NMR(1H NMR、 ^{13}C NMR和2D-NMR)等方法确定。立体结构由文献对照法确定。

【生物活性与毒性】 抑制白鹅黑雁 *B. amphitrite* 幼虫的附着与变形, $ED_{50}=1.1\mu g/mL$ 。

【参考文献】 1. Okino T, et al. *Tetrahedron Lett*, 1995, 36(47): 8637

2. Fusetani N, et al. *Tennen Yuki Kagobutsu Toronkai Koen Yosh*, 1989, 31: 340

3. Fusetani N, et al. *Tetrahedron Lett*, 1990, 31: 3599

4. Braekman J C, et al. *Bull Soc Chim Belg*, 1994, 103: 187

5. Rodriguez J, et al. *Tetrahedron*, 1994, 50: 11079

6. Fusetani N, et al. *J Nat Toxins*, 1996, 5: 249

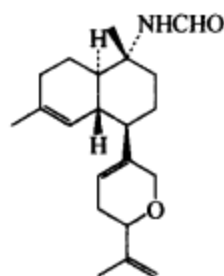
7. Dumdei E J, et al. *Comp Biochem Physiol A Comp Physiol*, 1997, 118: 1385

8. Braekman J C, et al. *Bull Soc Chim Belg*, 1994, 103: 187

9. Miyaoka H, et al. *Tetrahedron Lett*, 2002, 43: 2227

A0117 Kalihipyran A

【结构式】



【分子式】 $C_{21}H_{31}NO_2$

【相对分子质量】 329

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} + 38.6^\circ$ (c 0.08, $CHCl_3$); IR(neat) ν_{max} : 3320 cm^{-1} , 1664 cm^{-1} ; 1H NMR(500MHz, $CDCl_3$) δ : 8.25(1H, d, 12.3, H-21), 5.62(1H, NH), 5.58(1H, H-12), 5.26(1H, brs, H-5), 4.99(1H, s, H-16), 4.84(1H, s, H-16), 4.15(2H, s, H-18), 3.88(1H, brd, 9.4, H-14), 2.20(1H, m, H-13), 2.11(1H, m, H-13), 1.98(2H, br, H-3), 1.93(1H, m, H-6), 1.88(1H, m, H-9), 1.86(1H, m, H-7), 1.80(1H, m, H-2), 1.77(3H, s, Me-17), 1.67(1H, m, H-8), 1.62(3H, s, Me-19), 1.59(1H, m, H-9), 1.48(1H, m, H-8), 1.28(1H, m, H-2), 1.25(3H, s, Me-20), 1.18(1H, m, H-1); ^{13}C NMR(125MHz, $CDCl_3$) δ : 162.7(C-21), 145.4(C-15), 138.7(C-11), 134.9(C-4), 122.7(C-5), 120.0(C-12), 110.6(C-16), 76.9(C-14), 67.0(C-18), 55.3(C-10), 49.0(C-1), 45.2(C-7), 41.9(C-9), 39.1(C-6), 31.0(C-3), 29.7(C-8), 29.6(C-13), 23.3(C-19), 22.7(C-2), 19.0(C-20), 18.9(C-17); HRFABMS(glycerol) m/z $[M+H]^+$ 330.2430, calcd for $C_{21}H_{32}NO_2$ 330.2433^[1]。

【来源】 海绵 *Acanthella cavernosa*^[1]

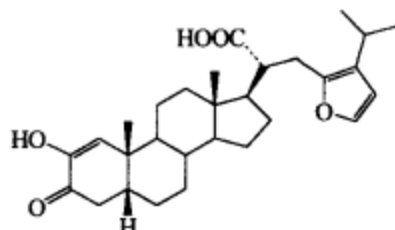
【分析方法】 样品 EtOH 提取, hexane 萃取部分硅胶柱层析(hexane-EtOAc), 硅胶柱层析(C_6H_6 -EtOAc), HPLC(75%~85% MeOH)得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 抑制幼虫的变形活性, *Balanus amphitrite* IC_{50} 1.3 $\mu g/mL$ ^[1]。

【参考文献】 1. Okina T, et al. J Nat Prod, 1996, 59; 1081

A0118 Kiheisterone A

【结构式】



【分子式】 $C_{29}H_{40}O_5$

【相对分子质量】 468

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D^{25} + 144^\circ$ (c 1.72, MeOH); EIMS m/z : 468 (M^+ , 7), 422(1), 285(1), 137(5), 123(100); HREIMS m/z : 468.2863 (calcd for $C_{29}H_{40}O_5$ 468.2876); $UV\lambda_{max}$ (MeOH): 266nm (10300); IR(neat) ν_{max} (cm^{-1}): 3450, 2960, 2930, 2870, 1705, 1670, 1410, 1075; 1H NMR($CDCl_3$) δ : 6.07 (s, H-1), 2.88(dd, $J = 17.7, 14.6$ Hz, H-4a), 2.25(dd, $J = 17.7, 4.5$ Hz, H-4 β), 2.11(bd, $J = 14.6$ Hz, H-5), 1.38(m, H-6a), 1.88(tt, $J = 14.1, 4.6$ Hz, H-6 β), 1.09(m, H-7a), 1.54(bdq, $J = 12.7, 4.6$ Hz, H-7 β), 1.39(m, H-8), 1.31(td, $J = 10.7, 4.4$ Hz, H-9), 1.42(m, H-11), 1.07(m, H-12a), 1.63(m, H-12 β), 1.08(m, H-14), 1.14(m, H-15), 1.68(m, H-15), 1.40(m, H-16), 1.97(m, H-16), 1.71(q, $J = 9.7$ Hz, H-17), 0.76(s, H-18), 1.18(s, H-19), 2.66(td, $J = 10.7, 4.5$ Hz, H-20), 2.76(dd, $J = 14.4, 10.7$ Hz, H-22), 2.79(dd, $J = 14.4, 4.5$ Hz, H-22), 2.72(d, $J = 6.8$ Hz, H-25), 1.04(d, $J = 6.8$ Hz, H-26), 1.09(d, $J = 6.8$ Hz, H-27), 6.19(d, $J = 1.9$ Hz, H-28), 7.20(d, $J = 1.9$ Hz, H-29); ^{13}C NMR($CDCl_3$) δ : 129.6(d, C-1), 144.9(s, C-2), 196.1(s, C-3), 37.4(t, C-4), 41.4(d, C-5), 26.0(t, C-6), 25.9(t, C-7), 35.1(d, C-8), 47.0(d, C-9), 38.0(s, C-10), 22.3(t, C-11), 37.4(t, C-12), 42.5(s, C-13), 55.3(d, C-14), 23.6(t, C-15), 27.1(t, C-16), 52.5(d, C-17), 12.0(q, C-18), 21.8(q, C-19), 46.8(d, C-20), 180.6(s, C-21), 28.6(t, C-22), 146.0(s, C-23), 127.1(s, C-24), 24.2(d, C-25), 23.7(q, C-26), 24.0(q, C-27), 108.6(d, C-28), 140.8(d, C-29).

【来源】 海绵 *A. unidentified*

【分析方法】 粗提物分配于乙酸乙酯-二氯甲烷-水 (1:1:1), 上层部分再用环己烷-甲醇 (2:1) 萃取, 得到的活性部分经硅胶柱层析色谱 (hexanes/ether 梯度洗脱) 和 C-18 反相柱层析色谱 (MeOH) 分离, 反相高效液相色谱 (MeOH/ H_2O 9:1) 纯化, 获得活性成分 Kiheisterone A。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 P388、A549 和 HT29 的生长。

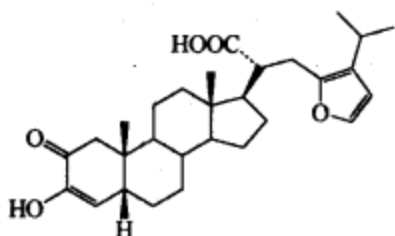
【参考文献】 1. Carney J R, et al. J Org Chem, 1992, 57; 6637

2. Carney J R, et al. J Org Chem, 1993, 58; 3460

3. Aiello A, et al. Steroids, 1999, 64; 687

A0119 Kiheisterone B

【结构式】



【分子式】 $C_{29}H_{40}O_5$

【相对分子质量】 468

【理化常数及谱学数据】 白色针晶; mp 223~225°C; $[\alpha]_D^{25} + 19^\circ$ (c 0.7, CHCl₃); HREIMS m/z : 468.2863 (calcd for C₂₉H₄₀O₅ 468.2876); IR (Nujol mull) $\nu_{\max}$ (cm⁻¹): 3450, 1705, 1670; ¹H NMR (CDCl₃) δ : 0.67(s, H-18), 0.95(m, H-7a), 0.96-1.03(m, H-14, H-12a, H-15), 1.04(d, $J = 6.8$ Hz, H-26, H-27), 1.05(s, H-19), 1.26-1.33(m, H-8, H-9, H₂-11), 1.35(m, H-16a), 1.46(bd, $J = 13.0$ Hz, H-7 β), 1.56(m, H-6 β , H-15), 1.60(m, H-12 β), 1.62(bq, $J = 9.8$ Hz, H-17), 1.83(tt, $J = 14.1, 4.2$ Hz, H-6a), 1.98(m, H-16b), 2.18(d, $J = 16.5$ Hz, H-1a), 2.53(td, $J = 11.1, 4.2$ Hz, H-20), 2.61(bs, H-5), 2.62(d, $J = 16.5$ Hz, H-1b), 2.67-2.76(m, H₂-22, H-25), 5.70(d, $J = 2.6$ Hz, H-4), 6.14(d, $J = 1.9$ Hz, H-28), 7.15(d, $J = 1.9$ Hz, H-29); ¹³C NMR (CDCl₃) δ : 11.8(C-18), 20.9(C-11), 22.2(C-19), 23.4(C-26), 23.5(C-27), 23.8(C-15), 24.1(C-25), 27.2(C-16), 27.4(C-6), 27.4(C-7), 28.6(C-22), 35.7(C-8), 37.2(C-12), 40.8(C-10), 41.7(C-9), 42.2(C-13), 43.6(C-5), 47.1(C-20), 48.4(C-1), 52.2(C-17), 55.1(C-14), 108.4(C-28), 123.0(C-4), 126.8(C-24), 140.5(C-29), 146.5(C-23), 147.0(C-3), 177.8(C-21), 195.7(C-2)。

【来源】 海绵 *A. unidentifed*

【分析方法】 粗提物分配于乙酸乙酯-二氯甲烷-水 (1:1:1), 上层部分再用环己烷-甲醇 (2:1) 萃取, 得到的活性部分经硅胶柱色谱 (hexanes/ether 梯度洗脱) 和 C-18 反相柱色谱 (MeOH) 分离, 反相高效液相色谱 (MeOH/H₂O 9:1) 纯化, 获得活性成分 Kiheisterone B。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 P388、A-549 和 HT-29 的生长。

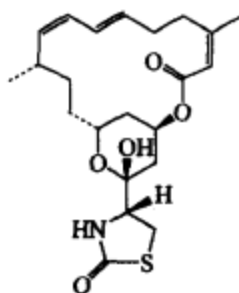
【参考文献】 1. Carney J R, et al. J Org Chem, 1992, 57: 6637

2. Carney J R, et al. J Org Chem, 1993, 58: 3460

3. Aiello A, et al. Steroids, 1999, 64: 687

A0120 Latrunculin A

【结构式】



【分子式】 C₂₂H₃₁NO₅S

【相对分子质量】 421

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D^{25} + 152^\circ$ (c 1.2, CHCl₃); UV $\lambda_{\max}$ (CH₃OH): 218nm(23500), 268nm(sh); IR (CHCl₃) (cm⁻¹): 3570, 3430, 3350, 2960, 2930, 1690 (strong), 1495, 1440, 1380, 1270, 1220, 1140, 1095, 1065, 990, 825; MS m/z : 421 (20), 403 (47), 385 (46), 301 (100), 149 (48), 135 (50), 102 (10), 85 (44); ¹H NMR (270MHz, CDCl₃) δ : 6.41(dd, $J = 15.0, 10.5$ Hz, H-7), 5.98(t, $J = 10.5$ Hz, H-8), 5.80(brs, H-NH), 5.74(dt, $J = 15.0, 4.5$ Hz, H-6), 5.69(d, $J = 1.3$ Hz, H-2), 5.43(brt, $J = 3.0$ Hz, H-15), 5.02(t, $J = 10.5$ Hz, H-9), 4.29(m, H-13), 3.93(s, OH), 3.87(dd, $J = 8.0, 7.0$ Hz, H-18), 3.51(dd, $J = 11.5, 7.0$ Hz, H-19), 3.48(dd, $J = 11.5, 8.0$ Hz, H-19'), 3.00(dt, $J = 13.0, 8.0$ Hz, H-4), 2.83(m, H-10), 2.60(dt, $J = 13.0, 8.0$ Hz, H-4'), 2.26(m, H-5, 5'), 1.92(d, $J = 1.3$ Hz, H-21), 0.98(d, $J = 6.7$ Hz, H-22); ¹³C NMR (75MHz, CDCl₃) δ : 166.0(s, C-1), 117.6(d, C-2), 158.3(s, C-3), 32.7(t, C-4), 30.6(t, C-5), 131.8(d, C-6), 126.3(d, C-7), 127.3(d, C-8), 136.5(d, C-9), 29.2(d, C-10), 31.8(t, C-11), 31.2(t, C-12), 62.3(d, C-13), 35.1(t, C-14), 68.1(d, C-15), 32.1(t, C-16), 96.9(s, C-17), 62.1(d, C-18), 28.7(t, C-19), 175.5(s, C-20), 24.7(q, C-21), 21.8(q, C-22)。

【来源】 海绵 *Latrunculia magnifica*

【分析方法】 样品粗提物经 Sephadex LH-20 柱层析 (petroleum ether-CHCl₃-CH₃OH 2:1:1) 和硅胶

柱层析色谱法 (40%~50% ethyl acetate-petroleum ether) 分离, 纯化获得活性成分。

【生物活性与毒性】 对实验小鼠的 neuroblastoma and fibroblast cells 有影响。

【参考文献】 1. Groweiss A, et al. J Org Chem, 1983, 48: 3512

2. Kashman Y, et al. Tetrahedron Lett, 1980, 21: 3629

3. Spector I, et al. Science (Washington DC), 1983, 219: 493

4. Lim D, et al. FASEB Journal, 2002, 16: 1050

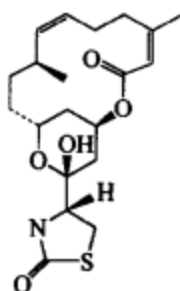
5. Cutignano A, et al. Eur J Org Chem, 2001, 775

6. Matsunaga S, et al. J Am Chem Soc, 1999, 121: 5605

7. Kashman Y, et al. Pure Appl Chem, 1989, 67: 517

A0121 Latrunculin B

【结构式】



【分子式】 $C_{20}H_{29}NO_5S$

【相对分子质量】 395

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D^{24} + 112^\circ (c\ 0.48, CHCl_3)$; $UV\lambda_{max}(CH_3OH)$: 212nm(17250), 268nm(sh); $IR(CHCl_3)(cm^{-1})$: 3520, 3400, 2910, 1675, 1205, 1115, 1085, 1045, 987, 975, 960; $MS\ m/e$: 377(50), 359(27), 326(16), 275(40), 256(16), 149(52), 128(63), 109(68), 95(65), 81(87), 71(72), 69(86), 57(100); $^1H\ NMR(270MHz, CDCl_3)\delta$: 6.10(brs, H-NH), 5.68(d, $J=1.5Hz$, H-2), 5.43(brt, $J=3.0Hz$, H-13), 5.25(brt, $J=3.3, 11.2Hz$, H-6), 5.04(t, $J=11.2Hz$, H-7), 4.24(brt, $J=10.0Hz$, H-11), 3.90(brs, OH), 3.83(dd, $J=8.6, 6.3Hz$, H-16), 3.47(dd, $J=11.5, 8.6Hz$, H-17), 3.39(dd, $J=11.5, 6.3Hz$, H-17'), 2.71(m, H-4, 8), 2.38(m, H-5, 5'), 1.90(d, $J=1.5Hz$, H-19), 0.95(d, $J=6.6Hz$, H-20); $^{13}C\ NMR(23MHz, CDCl_3)\delta$: 165.6(s, C-1), 118.0(d, C-2), 154.7(s, C-3), 35.8(t, C-4), 26.9(t, C-5), 127.6(d, C-6), 135.9(d, C-7), 28.9(d, C-8), 31.2(t, C-9), 31.2(t, C-10), 62.6(d, C-11), 35.4(t, C-12), 68.7(d, C-13), 31.8(t, C-14), 97.7(s, C-15), 61.8(d, C-16), 28.7(t, C-17), 175.3(s, C-18), 24.1(q, C-19), 22.3(q, C-20)。

【来源】 海绵 *Latrunculia magnifica*

【分析方法】 样品粗提物经 Sephadex LH-20 柱色谱法 (petroleum ether- $CHCl_3$ - CH_3OH 2:1:1) 和硅胶柱色谱法 (40%~50% ethyl acetate-petroleum ether) 分离, 纯化获得活性成分。

【生物活性与毒性】 对实验小鼠的 neuroblastoma and fibroblast cells 有影响。

【参考文献】 1. Groweiss A, et al. J Org Chem, 1983, 48: 3512

2. Kashman Y, et al. Tetrahedron Lett, 1980, 21: 3629

3. Spector I, et al. Science (Washington DC), 1983, 219: 493

4. Lim D, et al. FASEB Journal, 2002, 16: 1050

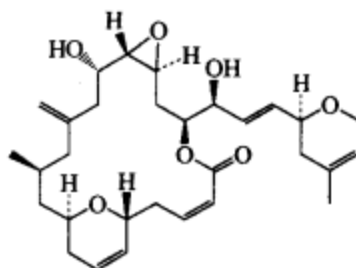
5. Cutignano A, et al. Eur. J Org Chem, 2001, 775

6. Matsunaga S, et al. J Am Chem Soc, 1999, 121: 5605

7. Kashman Y, et al. Pure Appl Chem, 1989, 67: 517

A0122 Laulimalide

【结构式】



【分子式】 $C_{30}H_{42}O_7$

【相对分子质量】 514

【来源】 海绵 *Cacospongia mycofijiensis*^[1], 在 *Hyatella*、*Fasciospongia*、*Dactylospongia* 等属中也有报道。

【生物活性与毒性】 微管稳定剂, 常与未聚合微管或变异的聚合微管蛋白结合。浓度为 5~7 nmol/L 时能导致变异的有丝分裂^[2,3]。

【参考文献】 1. Mooberry S L, et al. *Cancer Res*, 1998, 58: 653

2. Hamel E. *Biopolymers* 2002, 66: 142

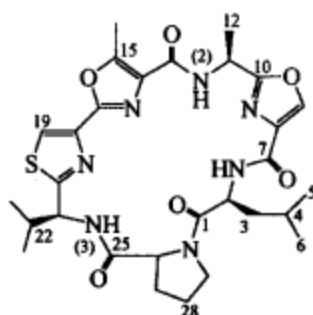
3. Mooberry S L, et al. *Clin Cancer Res*, 2003, 9 (Suppl): A274

4. Jefford C W, et al. *Tetrahedron Lett*, 1996, 37: 159

5. Corley D G, et al. *J Org Chem*, 1988, 53: 3644

A0123 Leucamide A

【结构式】



【分子式】 $C_{29}H_{37}N_7O_6S$

【相对分子质量】 611

【理化常数及谱学数据】 白色不定形粉末; $[\alpha]_D^{25} - 69.3^\circ$ (c 0.60, $CHCl_3$); UV($CHCl_3$) λ_{max} : 246 nm; IR (ATR) ν_{max} (cm^{-1}): 3382, 3261, 2959, 1668, 1628, 1518, 1445, 877, 732; 1H NMR: 4.91 (1H, ddd, $J = 1.8, 8.8, 10.6$, H-2), 1.55, 1.72 (1H, m, H-3), 1.85 (1H, m, H-4), 0.95 (3H, d, $J = 6.2$, H-5), 1.14 (3H, d, $J = 6.2$, H-6), 8.77 (1H, d, $J = 8.8$, NH-1), 8.15 (1H, s, H-9), 5.19 (1H, dd, $J = 5.9, 6.6$, H-11), 1.68 (3H, d, $J = 6.6$, H-12), 8.62 (1H, d, $J = 5.9$, NH-2), 2.74 (3H, s, H-16), 7.81 (1H, s, H-19), 5.06 (1H, dd, $J = 7.0, 8.4$), 2.21 (1H, m, H-22), 0.97 (3H, d, $J = 6.6$, H-23), 0.87 (3H, d, $J = 6.6$, H-24), 9.48 (1H, d, $J = 8.4$, NH-3), 4.77 (1H, dd, $J = 2.9, 8.1$, H-26), 1.80 (1H, m, H-27), 2.04 (2H, m, H-28), 3.58 (2H, m, H-29); ^{13}C NMR: 173.3 (s, C-1), 49.2 (d, C-2), 43.2 (t, C-3), 24.9 (d, C-4), 23.6 (q, C-5), 21.2 (q, C-6), 159.5 (s, C-7), 135.7 (s, C-8), 140.9 (d, C-9), 164.3 (s, C-10), 44.6 (d, C-11), 20.7 (q, C-12), 161.3 (s, C-13), 130.2 (s, C-14), 153.2 (s, C-15), 11.8 (q, C-16), 154.4 (s, C-17), 143.2 (s, C-18), 119.5 (d, C-19), 169.3 (s, C-20), 56.9 (d, C-21), 34.9 (d, C-22), 19.0 (q, C-23), 18.7 (q, C-24), 169.5 (s, C-25), 60.2 (d, C-26), 25.0 (t, C-27), 25.4 (t, C-28), 47.3 (t, C-29); EIMS m/z 611 (44), 568 (40), 555 (36), 499 (56), 70 (100); HREIMS m/z 611.2522 (calcd for $C_{29}H_{37}N_7O_6S$, 611.2525)。

【来源】 海绵 *Leucetta microraphis*

【分析方法】 海绵的二氯甲烷提取物经 VLC 硅胶柱层析, $CH_2Cl_2/MeOH$ 梯度洗脱, 得到 5 个部分, 第 4 部分经 Polyoprep 60-50 C18 柱层析后, RP-HPLC (Knauer C8 Eurospher-100, 250 mm $\times$ 8 mm,

5 μ m) 纯化, 洗脱溶剂为 MeOH/H₂O (8:2), 得到化合物 Leucamide A。

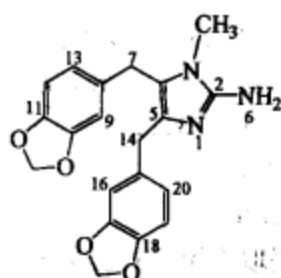
【生物活性与毒性】 体外试验能抑制 HM02、HepG2、Huh7 等三种肿瘤细胞株的生长, 其 GI₅₀ 值分别为 5.2 μ g/mL、5.9 μ g/mL、5.1 μ g/mL。

【参考文献】 1. Kehraus S, et al. J Org Chem, 2002, 67: 4989

2. Wang W, et al. J Org Chem, 2003, 68: 1636

A0124 Leucetta mine A

【结构式】



【分子式】 C₂₀H₁₉N₃O₄

【相对分子质量】 365

【理化常数及谱学数据】 黄色无定形固体; HRFABMS m/z 366.1456 [$M+H$]⁺; LREIMS m/z (rel. int.) 245(62), 188(3), 160(20), 107(6), 85(4), 57(100); IR(KBr) $\nu_{\max}$ (cm⁻¹), 3600~3100, 1681, 1503, 1490, 1444, 1246, 1203, 1186, 1040; UV(MeOH) $\lambda_{\max}$: 205nm, 285nm; ¹H NMR(Me₂CO-d₆) δ : 4.00(2H, brs, H-7), 6.65(H, d, J =0.7Hz, H-9), 6.67(H, d, J =7.6Hz, H-12), 6.66(H, dd, J =0.7, 7.6Hz, H-13), 3.84(2H, brs, H-14), 6.86(H, d, J =1.7Hz, H-16), 6.72(H, d, J =7.9Hz, H-19), 6.81(H, dd, J =1.7, 7.9Hz, H-20), 3.28(3H, s, 3-NCH₃), 7.84(2H, brs, 6-NH₂), 5.96(2H, s, 10-CH₂O—), 5.93(2H, s, 17-OCH₂O—); ¹³C NMR(Me₂CO-d₆): 148.4(C-1), 122.2(C-2), 123.8(C-3), 28.4(C-4), 131.9(C-5), 109.3(C-6), 149.0(C-7), 147.4(C-8), 109.0(C-9), 121.9(C-13), 30.12(C-14), 132.9(C-15), 109.8(C-16), 148.8(C-17), 147.3(C-18), 108.9(C-19), 122.5(C-20), 29.7(3-NCH₃), 102.0(10-CH₂O—), 101.8(17-OCH₂O—)。

【来源】 帕劳海绵 *Leucetta microraphis*

【分析方法】 海绵的二氯甲烷提取物上 ODS 柱 (乙腈-水, 0.2% TFA), 再上反相 HPLC (30% 乙腈-水, 0.2% TFA), 最后用硅胶柱和反相 HPLC (36% 乙腈-水, 0.2% TFA) 纯化得到。结构通过 (HR) MS、IR、UV 和 NMR (¹H NMR、¹³C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 白三烯 B₄ (LTB₄) 受体拮抗剂, IC₅₀=4.0 μ mol/L。

【参考文献】 1. Chan G W, et al. J Nat Prod, 1993, 56 (1): 116

2. Kong F, et al. J Org Chem, 1993, 58: 970

3. Molina P, et al. Tetrahedron Lett, 1994, 35: 2235

4. Rou N, et al. Tetrahedron, 1999, 55: 14729

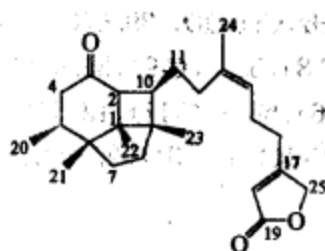
5. Watanabe K, et al. J Nat Prod, 2000, 63: 258

6. Crews P, et al. J Nat Prod, 2003, 66: 177

7. Chouvier J R, et al. Tetrahedron Lett, 2002, 43: 3581

A0125 Lintenone

【结构式】



【分子式】 $C_{25}H_{36}O_3$

【相对分子质量】 384

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha] - 75^\circ (c\ 0.03, CHCl_3)$; HREIMS m/z 384.2672 $[M]^+$, CD(EtOH): $(\theta)_{301} - 9530^\circ$; IR $\nu_{max}(cm^{-1})$: 1783, 1749, 1714; 1H NMR(500MHz, $CDCl_3$) δ : 2.02(H, d, H-2), 2.27(2H, dd, $J = 16, 11Hz$, H-4), 1.94(H, m, H-5), 1.40, 1.80(2H, m, H-7), 1.52(2H, m, H-8), 1.80(H, m, H-10), 1.33, 1.57(2H, m, H-11), 1.78, 2.07(2H, m, H-12), 5.05(H, brt, $J = 7.5Hz$, H-14), 2.27(2H, brq, $J = 7.5Hz$, H-15), 2.43(2H, brt, $J = 7.5Hz$, H-17), 5.86(H, brs, H-18), 0.96(3H, s, H-20), 0.89(3H, s, H-21), 0.98(3H, s, H-22), 1.02(3H, s, H-23), 1.66(3H, s, H-24), 4.75(2H, brs, H-25); ^{13}C NMR(125MHz, $CDCl_3$): 50.71(C-1), 57.11(C-2), 214.81(C-3), 43.85(C-4), 35.65(C-5), 45.61(C-6), 30.39(C-7), 38.83(C-8), 47.39(C-9), 43.16(C-10), 31.25(C-11), 29.73(C-12), 137.87(C-13), 122.34(C-14), 25.55(C-15), 28.96(C-16), 174.04(C-17), 115.70(C-18), 170.45(C-19), 17.59(C-20), 23.45(C-21), 19.47(C-22), 16.95(C-23), 23.29(C-24), 73.17(C-25)。

【来源】 加勒比海绵 *Cacospongia cf. linteiformis*

【分析方法】 海绵的甲醇-甲苯 (3:1) 提取物用乙酸乙酯固态萃取, 乙酸乙酯层在 SiO_2 柱上 MPLC 层析, 石油醚-乙酸乙酯梯度洗脱, 馏分用正相 HPLC (正己烷-乙酸乙酯) 分离得到纯品。结构通过 (HR) MS、CD、IR 和 NMR (1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

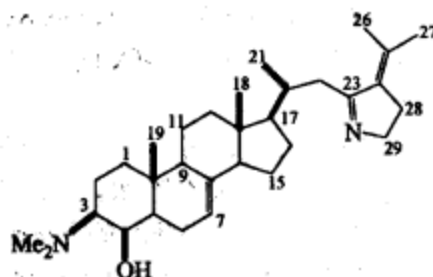
【生物活性与毒性】 1. 10mg/kg 浓度下对 *Gambusia affinis* 鱼有毒鱼作用。2. 在 $30\mu g/cm^2$ 下对 *Carassius auratus* 有很强的进食阻断作用。

【参考文献】 1. Carotenuto A, et al. Tetrahedron, 1995, 51 (39): 10751

2. Fattorusso E, et al. J. Org. Chem, 1992, 57: 6921

A0126 Lokysterolamine A

【结构式】



【分子式】 $C_{31}H_{50}ON_2$

【相对分子质量】 466

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha] + 12.6^\circ (c\ 2.0, CHCl_3)$; HREIMS m/z 466.3932 $[M]^+$; UV λ_{max} : 247nm; IR $\nu_{max}(cm^{-1})$: 3400, 1645, 1575; 1H NMR(500MHz, $CDCl_3$) δ : 1.88, 1.04(2H, m, H-1), 1.69(2H, m, H-2), 2.01(H, m, H-3), 3.92(H, t, $J = 2.5Hz$, H-4), 1.24(H, m, H-5), 2.38, 1.74(2H, m, H-6), 5.26(H, brs, H-7), 1.65(H, m, H-9), 1.48(2H, m, H-11), 2.07, 1.27(2H, m, H-12), 1.81(H, m, H-14), 1.57, 1.45(2H, m, H-15), 1.98, 1.42(2H, m, H-16), 1.29(H, m, H-17), 1.04(3H, s, H-19), 0.60(3H, s, H-18), 1.95(H, m, H-20), 0.88(3H, d, $J = 6.5Hz$, H-21), 2.80(H, brd, $J = 16Hz$, H-22a), 2.26(H, dd, $J = 16, 3Hz$, H-22b), 2.03(3H, brs, H-26), 1.83(3H, brs, H-27), 2.59(2H, brs, H-28), 3.69(2H, m, H-29), 2.34(6H, s, $-NMe_2$); ^{13}C NMR(125MHz, CD_3OD): 39.6(C-1), 21.7(C-2), 69.2(C-3), 70.4(C-4), 46.6(C-5), 27.4(C-6), 119.4(C-7), 139.9(C-8), 52.0(C-9), 35.5(C-10), 22.0(C-11), 40.8(C-22), 44.8(C-13), 56.2(C-14), 24.0(C-15), 28.7(C-16), 58.8(C-17), 12.5(C-19), 15.8(C-19), 35.7(C-20), 19.5(C-21), 41.8(C-22), 176.2(C-23), 137.4(C-24), 133.3(C-25), 21.9(C-26), 25.4(C-27), 32.1(C-28), 56.3(C-29), 42.9(NMe_2)。

【来源】 海绵 *Corticium* sp.

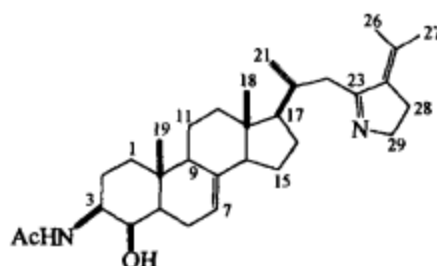
【分析方法】 海绵的乙醇提取物在水-乙醇和正丁醇间分配，正丁醇层在 NaHCO_3 水溶液和氯仿间分配，氯仿层用 HPLC (氨基柱) 分离得到纯品。结构通过 (HR) MS、IR、UV 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 1. 对肿瘤细胞的抑制作用 (IC_{50} , $\mu\text{g/mL}$): P-388 (0.5), A-549 (0.5), HT-29 (1), MEL-28 (5)。2. 免疫调节活性: $50\mu\text{g/disk}$ 下, 对 MLR 和 LcV 的抑制环分别为 0.13mm 和 $>25.0\text{mm}$ 。3. 抗菌和抗真菌活性: $50\mu\text{g/disk}$ 下, 对 *B. subtilis* 和 *C. albicans* 的抑菌环分别为 19mm 和 11mm。

【参考文献】 1. Jurek J, et al. *J Nat Prod*, 1994, 57 (7): 1004
2. Atta-ur-Rahman, et al. *Alkaloids* (Academic Press), 1999, 52: 233

A0127 Lokysterolamine B

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{31}\text{H}_{48}\text{O}_2\text{N}_2$

【相对分子质量】 480

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} -3.1^\circ$ (c 1.6, CHCl_3); HREIMS m/z 480.3722 $[\text{M}]^+$; UV λ_{max} : 247nm; IR ν_{max} (cm^{-1}): 3450, 3350, 1660, 1580; ^1H NMR (500MHz, CDCl_3) δ : 1.84, 1.18 (2H, dt, $J=12.5, 3.1\text{Hz}$, H-1), 1.77, 1.47 (2H, m, H-2), 3.69 (H, m, H-3), 3.70 (H, t, $J=2.5\text{Hz}$, H-4), 1.35 (H, m, H-5), 2.35, 1.72 (2H, m, H-6), 5.25 (H, brs, H-7), 1.68 (H, m, H-9), 1.48 (2H, m, H-11), 2.05, 1.27 (2H, m, H-12), 1.83 (H, m, H-14), 1.57, 1.45 (2H, m, H-15), 1.97, 1.42 (2H, m, H-16), 1.29 (H, m, H-17), 1.02 (3H, s, H-19), 0.59 (3H, s, H-18), 1.93 (H, m, H-20), 0.88 (3H, d, $J=6.5\text{Hz}$, H-21), 2.80 (H, brd, $J=16\text{Hz}$, H-22a), 2.27 (H, dd, $J=16, 3\text{Hz}$, H-22b), 2.03 (3H, brs, H-26), 1.82 (3H, brs, H-27), 2.58 (2H, brs, H-28), 3.68 (2H, m, H-29), 1.94 (3H, s, —NHAc); ^{13}C NMR (125MHz, CD_3OD): 39.2 (C-1), 23.8 (C-2), 53.7 (C-3), 72.0 (C-4), 46.2 (C-5), 27.0 (C-6), 119.1 (C-7), 139.7 (C-8), 51.8 (C-9), 35.6 (C-10), 21.9 (C-11), 40.6 (C-12), 44.7 (C-13), 56.0 (C-14), 23.9 (C-15), 28.6 (C-16), 58.6 (C-17), 12.5 (C-19), 15.7 (C-18), 35.4 (C-20), 19.5 (C-21), 41.6 (C-22), 176.1 (C-23), 137.2 (C-24), 133.2 (C-25), 21.7 (C-26), 25.5 (C-27), 32.0 (C-28), 56.1 (C-29), 22.8, 172.3 (NHAc).

【来源】 海绵 *Corticium* sp.

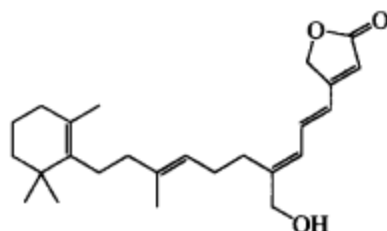
【分析方法】 海绵的乙醇提取物在水-乙醇和正丁醇间分配，正丁醇层在 NaHCO_3 水溶液和氯仿间分配，氯仿层用 HPLC (氨基柱) 分离得到纯品。结构通过 (HR) MS、IR、UV 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 1. 对肿瘤细胞的抑制作用 (IC_{50} , $\mu\text{g/mL}$): P-388 (1), A-549 (0.5), HT-29 (1), MEL-28 (>2)。2. 免疫调节活性: $50\mu\text{g/disk}$ 下, 对 MLR 和 LcV 的抑制环分别为 0.48mm 和 12.5mm。3. 抗菌和抗真菌活性: $50\mu\text{g/disk}$ 下, 对 *B. subtilis* 和 *C. albicans* 的抑菌环分别为 8mm 和 0mm。

【参考文献】 1. Jurek J, et al. *J Nat Prod*, 1994, 57 (7): 1004
2. Atta-ur-Rahman, et al. *Alkaloids* (Academic Press), 1999, 52: 233

A0128 Luffariolide A

【结构式】



【分子式】 $C_{25}H_{36}O_3$

【相对分子质量】 384

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; UV(EtOH) $\lambda_{\max}$: 325nm(25000); IR(neat) $\nu_{\max}$ (cm^{-1}): 3400, 2930, 2880, 1740, 1610; HREIMS m/z : 384.2679 (M^+ , calcd for $C_{25}H_{36}O_3$, 384.2665); 1H NMR (400MHz, $CDCl_3$) δ : 0.97(s, H_3 -20, H_3 -21), 1.39(m, H_2 -18), 1.56(m, H_2 -17), 1.57(s, H_3 -22), 1.64(s, H_3 -23), 1.89(t, $J = 6.9$ Hz, H_2 -16), 1.94(m, H_2 -12, H_2 -13), 2.17(brt, $J = 6.9$ Hz, H_2 -9), 2.31(brt, $J = 6.9$ Hz, H_2 -8), 4.22(brs, H_2 -24), 5.00(brs, H_2 -25), 5.13(brt, $J = 6.9$ Hz, H-10), 5.91(brs, H-2), 6.28(d, $J = 11.0$ Hz, H-6), 6.48(d, $J = 15.9$ Hz, H-4), 6.80(dd, $J = 11.0, 15.9$ Hz, H-5); ^{13}C NMR (400MHz, $CDCl_3$) δ : 174.0(s, C-1), 114.7(d, C-2), 162.2(s, C-3), 132.8(d, C-4), 123.3(d, C-5), 121.7(d, C-6), 149.6(s, C-7), 29.2(t, C-8), 27.8(t, t, C-9), 122.1(d, C-10), 136.9(s, C-11), 39.8(t, C-12), 27.4(t, C-13), 137.8(s, C-14), 127.2(s, C-15), 32.8(t, C-16), 19.8(t, C-17), 40.2(t, C-18), 35.0(s, C-19), 28.6(q, C-20, 21), 19.5(q, C-22), 16.2(q, C-23), 66.1(t, C-24), 70.5(t, C-25)。

【来源】 海绵 *Luffariella* sp.

【分析方法】 甲醇粗提物通过硅胶柱层析色谱法 [$CHCl_3$ /MeOH (100:0)~(85:15); hexanes/EtOAc 1:1], 反相高效液相色谱法 (MeOH/ H_2O 90:10) 分离得到活性成分 Luffariolide A。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 L1210 的生长。

【参考文献】 1. Tsuda M, et al. J Org Chem, 1992, 57: 3503

2. Kobayashi J, et al. J Nat Prod, 1993, 56: 436

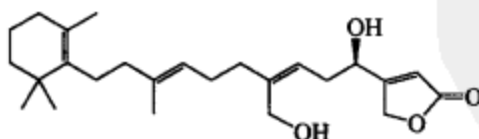
3. Hareau-Vittini G, et al. Synlett, 1995, 893

4. Hareau-Vittini G, et al. Synthesis, 1995, 1007

5. Tsuda M, et al. J Nat Prod, 2002, 65: 1507

A0129 Luffariolide B

【结构式】



【分子式】 $C_{25}H_{38}O_4$

【相对分子质量】 402

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} + 20.0^\circ$ (c 1.0, $CHCl_3$); UV(EtOH) $\lambda_{\max}$: 218nm(7400); IR(neat) $\nu_{\max}$ (cm^{-1}): 3380, 2930, 2880, 1740, 1440, 1020; EIMS m/z : 402 (M^+ , 1), 278(1.5), 137(100); HREIMS m/z : 402.2753 (M^+ , calcd for $C_{25}H_{38}O_4$, 402.2770); 1H NMR (400MHz, $CDCl_3$) δ : 0.98(s, H_3 -20, H_3 -21), 1.41(m, H_2 -18), 1.56(m, H_2 -17), 1.59(s, H_3 -22), 1.64(brs, H_3 -23), 1.90(t, $J = 6.2$ Hz, H_2 -16), 2.02(brs, H_2 -12, H_2 -13), 2.17(brs, H_2 -8, 9), 2.53(tt, $J = 6.2, 8.4$ Hz, H_2 -5), 4.08(d, $J = 10.2$ Hz, H_2 -24a), 4.17(d, $J = 10.2$ Hz, H_2 -24b), 4.64(t, $J = 6.2$ Hz, H-4), 4.87(brs, H_2 -25), 5.12(brt, $J = 6.2$ Hz, H-10), 5.38(t, $J = 8.4$ Hz, H-6), 5.97(d, $J = 1.5$ Hz, H-2), ^{13}C NMR (400MHz, $CDCl_3$) δ : 173.6(s, C-1), 114.9(d, C-2), 172.3(s, C-3), 67.4(d, C-4), 36.8(d, C-5), 120.0(d, C-6), 144.2(s, C-7), 35.2(t, C-8), 27.9(t, t, C-9), 122.8(d, C-10), 137.0(s, C-11), 39.8(t, C-12), 26.8(t, C-13), 137.2(s, C-14), 127.1(s, C-15), 32.7(t, C-16), 19.5(t, C-17), 40.2(t, C-18), 35.0(s, C-19), 28.6(q, C-20, 21), 19.8(q, C-22),

16. 2(q, C-23), 66. 2(t, C-24), 71. 3(t, C-25)。

【来源】 海绵 *Luffariella* sp.

【分析方法】 甲醇粗提物通过硅胶柱色谱法 [$\text{CHCl}_3/\text{MeOH}$ (100 : 0) ~ (85 : 15), hexanes/EtOAc 1 : 1], 反相高效液相色谱法 ($\text{MeOH}/\text{H}_2\text{O}$ 90 : 10) 分离得到活性成分 Luffariolide B。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 L1210 的生长。

【参考文献】 1. Tsuda M, et al. *J Org Chem*, 1992, 57: 3503

2. Kobayashi J, et al. *J Nat Prod*, 1993, 56: 436

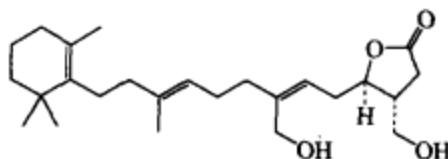
3. Hareau-Vittini G, et al. *Synlett*, 1995, 893

4. Hareau-Vittini G, et al. *Synthesis*, 1995, 1007

5. Tsuda M, et al. *J Nat Prod*, 2002, 65: 1507

A0130 Luffariolide C

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{25}\text{H}_{40}\text{O}_4$

【相对分子质量】 404

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} + 4.4'$ (c 1.6, CHCl_3); IR (neat) $\nu_{\max}$ (cm^{-1}): 3300, 2930, 2880, 1760, 1440, 1375, 1355, 1195, 1005; EIMS m/z : 404 (M^+ , 1), 386 (0.3), 137 (100); HREIMS m/z : 404. 2938 (M^+ , calcd for $\text{C}_{25}\text{H}_{40}\text{O}_4$, 404. 2927); ^1H NMR (400MHz, CDCl_3) δ : 0.99 (s, H_3 -20, H_3 -21), 1.40 (m, H_2 -18), 1.56 (m, H_2 -17), 1.59 (s, H_3 -22), 1.64 (brs, H_3 -23), 1.90 (t, $J = 6.2\text{Hz}$, H_2 -16), 2.02 (brs, H_2 -12, H_2 -13), 2.18 (brs, H_2 -8, 9), 2.38 (dd, $J = 7.3, 15.7\text{Hz}$, H-2b), 2.49 (dddd, $J = 4.8, 6.2, 7.3, 7.7\text{Hz}$, H-3), 2.57 (m, H_2 -5), 2.62 (dd, $J = 7.7, 15.7\text{Hz}$, H-2a), 3.64 (dd, $J = 4.8, 10.7\text{Hz}$ H-25b), 3.74 (dd, $J = 6.2, 10.7\text{Hz}$ H-25a), 4.08 (d, $J = 12.9\text{Hz}$, H-24b), 4.17 (d, $J = 12.9\text{Hz}$, H-24a), 4.44 (dd, $J = 6.1, 11.1\text{Hz}$, H-4), 5.13 (brt, $J = 6.2\text{Hz}$, H-10), 5.40 (t, $J = 7.7\text{Hz}$, H-6); ^{13}C NMR (400MHz, CDCl_3) δ : 176.1 (s, C-1), 32.7 (t, C-2), 41.5 (d, C-3), 82.8 (d, C-4), 30.9 (t, C-5), 121.7 (d, C-6), 142.8 (s, C-7), 35.8 (t, C-8), 27.8 (t, C-9), 123.0 (d, C-10), 137.1 (s, C-11), 39.8 (t, C-12), 26.7 (t, C-13), 136.9 (s, C-14), 127.0 (s, C-15), 32.6 (t, C-16), 19.5 (t, C-17), 40.3 (t, C-18), 35.0 (s, C-19), 28.6 (q, C-20, 21), 19.8 (q, C-22), 16.1 (q, C-23), 63.2 (t, C-24), 60.2 (t, C-25)。

【来源】 海绵 *Luffariella* sp.

【分析方法】 甲醇粗提物通过硅胶柱色谱法 [$\text{CHCl}_3/\text{MeOH}$ (100 : 0) ~ (85 : 15), hexanes/EtOAc 1 : 1], 反相高效液相色谱法 ($\text{MeOH}/\text{H}_2\text{O}$ 90 : 10) 分离得到活性成分 Luffariolide C。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 L1210 的生长。

【参考文献】 1. Tsuda M, et al. *J Org Chem*, 1992, 57: 3503

2. Kobayashi J, et al. *J Nat Prod*, 1993, 56: 436

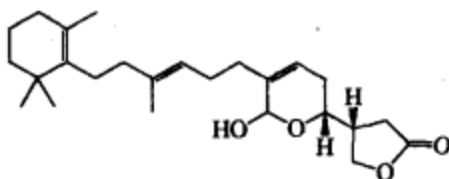
3. Hareau-Vittini G, et al. *Synlett*, 1995, 893

4. Hareau-Vittini G, et al. *Synthesis*, 1995, 1007

5. Tsuda M, et al. *J Nat Prod*, 2002, 65: 1507

A0131 Luffariolide D

【结构式】



【分子式】 $C_{25}H_{38}O_4$

【相对分子质量】 402

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{20} + 9.0^\circ (c\ 0.15, CHCl_3)$; IR(neat) ν_{max} (cm^{-1}): 3300, 2860, 1770, 1010; EIMS m/z : 402(M^+ , 0.5), 384(1), 369(0.7), 137(100); HREIMS m/z : 402.2777(M^+ , calcd for $C_{25}H_{38}O_4$, 402.2770); 1H NMR(400MHz, $CDCl_3$) δ : 0.99(s, H_3 -20, H_3 -21), 1.41(m, H_2 -18), 1.56(m, H_2 -17), 1.60(s, H_3 -22), 1.64(brs, H_3 -23), 1.90(t, $J = 6.3$ Hz, H_2 -16), 1.98(m, H_2 -5), 2.03(m, H_2 -12, H_2 -13), 2.13(m, H_2 -8, 9), 2.40(dd, $J = 7.3, 10.5$ Hz, H-2b), 2.59(dd, $J = 8.3, 10.5$ Hz, H-2a), 2.64(brs, 24-OH), 2.68(dddd, $J = 6.4, 7.3, 7.8, 8.3$ Hz, H-3), 3.95(dd, $J = 6.8, 14.4$ Hz, H-4), 4.30(dd, $J = 6.4, 9.3$ Hz, H-25b), 4.44(dd, $J = 7.8, 9.3$ Hz, H-25a), 5.66(brt, $J = 6.1$ Hz, H-6); ^{13}C NMR(400MHz, $CDCl_3$) δ : 176.5(s, C-1), 30.9(t, C-2), 39.7(d, C-3), 67.6(d, C-4), 32.8(t, C-5), 121.4(d, C-6), 137.3(s, C-7), 39.9(t, C-8), 28.0(t, t, C-9), 122.9(d, C-10), 137.1(s, C-11), 39.9(t, C-12), 26.1(t, C-13), 136.9(s, C-14), 127.0(s, C-15), 32.7(t, C-16), 19.6(t, C-17), 40.3(t, C-18), 35.0(s, C-19), 28.7(q, C-20, 21), 19.8(q, C-22), 16.1(q, C-23), 91.4(d, C-24), 70.3(t, C-25)。

【来源】 海绵 *Luffariella* sp.

【分析方法】 甲醇粗提物通过硅胶柱色谱法 [$CHCl_3/MeOH(100:0) \sim (85:15)$, hexanes/EtOAc 1:1], 反相高效液相色谱法 (MeOH/ H_2O 90:10) 分离得到活性成分 Luffariolide D。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 L1210 的生长。

【参考文献】 1. Tsuda M, et al. J Org Chem, 1992, 57: 3503

2. Kobayashi J, et al. J Nat Prod, 1993, 56: 436

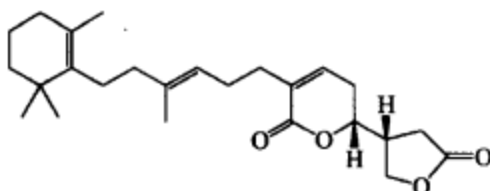
3. Hareau-Vittini G, et al. Synlett, 1995, 893

4. Hareau-Vittini G, et al. Synthesis, 1995, 1007

5. Tsuda M, et al. J Nat Prod, 2002, 65: 1507

A0132 Luffariolide E

【结构式】



【分子式】 $C_{25}H_{36}O_4$

【相对分子质量】 400

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} + 7.1^\circ (c\ 0.42, CHCl_3)$; UV(EtOH) λ_{max} : 230nm(7500); IR(neat) ν_{max} (cm^{-1}): 2920, 2850, 1775, 1710, 1430, 1375, 1210, 1095, 1015; EIMS m/z : 400(M^+ , 1.5), 386(1), 276(3), 264(2), 196(10), 137(100); HREIMS m/z : 400.2655(M^+ , calcd for $C_{25}H_{36}O_4$, 400.2614); 1H NMR(400MHz, $CDCl_3$) δ : 0.99(s, H_3 -20, H_3 -21), 1.41dd, $J = 3.5, 6.1$ Hz, H_2 -18), 1.56(m, H_2 -17), 1.60(s, H_3 -22), 1.63(brs, H_3 -23), 1.90(t, $J = 6.1$ Hz, H_2 -16), 2.02(m, H_2 -12, H_2 -13), 2.18(m, H_2 -9), 2.31(m, H-8b), 2.34(m, H_2 -5), 2.38(m, H-8a), 2.41(dd, $J = 17.6, 8.6$ Hz, H-2b), 2.63(dd, $J = 17.6, 9.0$ Hz, H-2a), 2.92(brdt, $J = 16.1, 7.6$ Hz, H-3), 4.33(dd, $J = 6.2, 11.2$ Hz, H-4), 4.34(dd, $J = 9.5, 7.1$ Hz, H-25b), 4.54(dd, $J = 9.5, 7.8$ Hz, H-25a), 5.11(brt, $J = 7.3$ Hz, H-10), 6.58(m, H-6); ^{13}C NMR(400MHz, $CDCl_3$) δ : 176.1(s, C-1), 30.2(t, C-2), 39.7(d, C-3), 77.4(C-4), 30.9(C-5), 137.4(d, C-6), 128.8(C-7), 39.8(t, C-8), 28.0(t, t, C-9), 122.7(d, C-10), 137.4(s, C-11), 39.8(t, C-12), 26.5(t, C-13), 137.9(s, C-14), 127.1(s, C-15), 32.8(t, C-16), 19.6(t, C-17), 40.3(t, C-18), 35.0(s, C-19), 28.7(q, C-20, 21), 19.8(q, C-22), 16.2(q, C-23), 163.1(s, C-24), 69.7(t, C-25)。

【来源】 海绵 *Luffariella* sp.

【分析方法】 甲醇粗提物通过硅胶柱色谱法 [$\text{CHCl}_3/\text{MeOH}$ (100 : 0) ~ (85 : 15), hexanes/EtOAc 1 : 1], 反相高效液相色谱法 ($\text{MeOH}/\text{H}_2\text{O}$ 90 : 10) 分离得到活性成分 Luffariolide E。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 L1210 的生长。

【参考文献】 1. Tsuda M, et al. J Org Chem, 1992, 57: 3503

2. Kobayashi J, et al. J Nat Prod, 1993, 56: 436

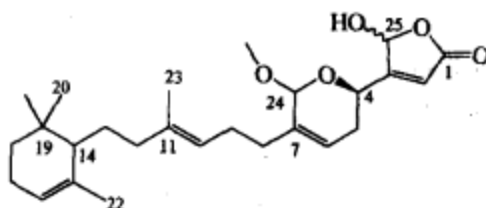
3. Hareau-Vittini G, et al. Synlett, 1995, 893

4. Hareau-Vittini G, et al. Synthesis, 1995, 1007

5. Tsuda M, et al. J Nat Prod, 2002, 65: 1507

A0133 Luffariolide H

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{26}\text{H}_{38}\text{O}_5$

【相对分子质量】 430

【理化常数及谱学数据】 无色油状化合物; UV (MeOH) λ_{max} : 230nm (sh); IR (KBr) ν_{max} : 3375 cm^{-1} , 1760 cm^{-1} ; ^1H NMR: 6.05(s, H-2), 4.76(m, H-4), 2.28(m, H-5), 5.68(bris, H-6), 2.09(m, H-8), 2.34(dd, H-9), 5.11(t, H-10), 2.10(m, H-12), 1.35(m, H-13), 1.42(t, H-14), 136.9(s, H-15), 5.29(bris, H-16), 1.95(m, H-17), 1.14(t, H-18), 28.7(s, H-19), 0.87(s, H-20), 0.92(s, H-21), 1.68(s, H-22), 1.61(s, H-23), 4.79(s, H-24), 6.10(s, H-25), 3.45(s, $-\text{OCH}_3$); ^{13}C NMR: 171.8(s, C-1), 117.5(d, C-2), 167.2(s, C-3), 62.2(d, C-4), 29.1(t, C-5), 120.6(d, C-6), 136.4(s, C-7), 32.5(t, C-8), 26.1(t, C-9), 123.3(d, C-10), 136.7(s, C-11), 40.5(t, C-12), 29.9(t, C-13), 49.1(d, C-14), 136.9(s, C-15), 120.6(d, C-16), 23.1(t, C-17), 31.8(d, C-18), 28.7(s, C-19), 27.4(q, C-20), 27.5(q, C-21), 23.5(q, C-22), 16.1(q, C-23), 98.3(d, C-24), 97.1(d, C-25), 55.8(s, $-\text{OCH}_3$); EIMS m/z 398 [$\text{M}-\text{MeOH}$] $^+$, 430 [M] $^+$; HREIMS m/z 430.2698 [M] $^+$ (calcd for $\text{C}_{26}\text{H}_{38}\text{O}_5$, 430.2719)。

【来源】 海绵 *Luffariella* sp.

【分析方法】 海绵的甲醇提取物经乙酸乙酯和水进行分配, 乙酸乙酯层上硅胶柱以 $\text{CHCl}_3/\text{MeOH}$ 梯度洗脱, 活性部位相继用反相液相进行纯化, 反相柱和洗脱溶剂分别为: Luna Phenyl-hexyl, 5 μm ; Phenomenex, 10mm $\times$ 50mm ($\text{MeOH}/\text{H}_2\text{O}/\text{AcOH}$ 85 : 15 : 0.1 以及 Wakosil-[[5C18 RS]; Wako Pure Chemical Ind, Ltd, 10mm $\times$ 250mm [$\text{CH}_3\text{CN}/5\text{mmol/L}$ NH_4Cl (aq), 75 : 25], 得到化合物 Luffariolides H。

【生物活性与毒性】 体外试验显示对大鼠淋巴瘤 L1210 和上皮瘤 KB 细胞显示较强的细胞毒活性, 其 IC_{50} 值分别为 3.2 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 和 7.5 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 。

【参考文献】 1. Tsuda M, et al. J Nat Prod, 2002, 65: 1507

2. Tsuda M, et al. J Org Chem, 1992, 57: 3503

3. Kobayashi J, et al. J Nat Prod, 1993, 56: 436

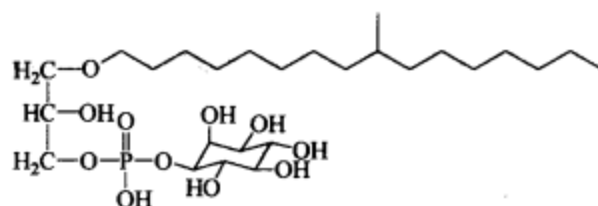
4. Hareau-Vittini G, et al. Synlett, 1995, 893

5. Hareau-Vittini G, et al. Synthesis, 1995, 1007

6. Tsuda M, et al. J Nat Prod, 2002, 65: 1507

A0134 Lysoplasmanylinositol 2

【结构式】



【分子式】 $C_{26}H_{53}O_{11}P$

【相对分子质量】 572

【理化常数及谱学数据】 无色固体; $[\alpha]_D^{20} - 8.9^\circ$ (c 0.035, MeOH); 1H NMR (600 MHz, CD_3OD /pyridine- d_5 , 1:1) δ : 4.58 (1H, dd, $J = 3.0$ Hz), 4.33 (1H, ddd, $J = 9.0, 5.6$ Hz), 4.21 (1H, t, $J = 9.0$ Hz), 4.19 (2H, m), 4.07 (1H, t, $J = 9.6$ Hz), 4.07 (1H, m), 3.66 (1H, dd, $J = 9.6, 3.0$ Hz), 3.55 (1H), 3.53 (1H), 3.48 (1H, dd, $J = 9.6, 6.6$ Hz), 3.32 (2H, t, $J = 6.6$ Hz), 1.43 (2H, m), 1.26-1.12 (25H), 0.76 (3H, t, $J = 6.6$ Hz), 0.75 (3H, d, $J = 7.2$ Hz); ^{13}C NMR (150 MHz, CD_3OD /pyridine- d_5 , 1:1) δ : 78.4 (C-1, dd), 76.8 (C-5, d), 74.3 (C-4, d), 73.7 (C-6, d), 73.4 (C-2, and 3, d), 73.3 (C-1, d), 72.4 (C-1, d), 71.1 (C-2, dd), 68.7 (C-3, dt), 38.0 (C-8, 10, t), 33.7 (C-9, d), 32.8 (C-14, t), 30.9 (C-2, t), 30.2-30.6 (C-4-7, 11-13), 27.1 (C-3, t), 23.5 (C-15, t), 20.2 (C-17, q), 14.6 (C-16, q); FABMS (negative) m/z 571 ($M - H$) $^-$; HRFABMS (negative) m/z 571.3276 (calcd for $C_{26}H_{52}O_{11}P$, 571.3248).

【来源】 海绵 *Theonella swinhoei*

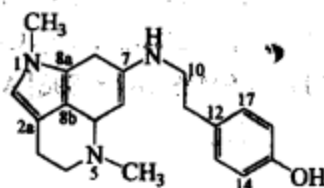
【分析方法】 用 70% *n*-PrOH 提取三次海绵, 提取物依次采用水/石油醚、水/氯仿萃取, 取氯仿层上硅胶柱, 以 $CHCl_3$ /MeOH/ H_2O 梯度洗脱, $CHCl_3$ /MeOH/ H_2O (80:20:1) 洗脱部分上 RPHPLC (28%~80% MeCN 梯度洗脱), 得到化合物 Lysoplasmalinositol 2。

【生物活性与毒性】 浓度为 50 μg /disk 时即能抑制 *Escherichia coli* 的生长, 抑菌圈为 12 mm。

【参考文献】 1. Matsunaga S, et al. J Nat Prod, 2001, 64: 816

A0135 Makaluvamine P

【结构式】



【分子式】 $C_{20}H_{25}N_3O$

【相对分子质量】 323

【理化常数及谱学数据】 紫色粉末; UV (MeOH) λ_{max} (nm): 222 (7470), 248 (7750), 361 (5075); 1H NMR ($-MeOH-d_4$, 600 MHz) δ : 7.10 (1H, s, H-2), 7.07 (2H, d, $J = 8.2$ Hz, H-13, H-17), 6.71 (2H, d, $J = 8.2$ Hz, H-14, H-16), 5.31 (1H, s, H-9), 3.95 (3H, s, N_1 -Me), 3.89 (2H, t, $J = 7.7$ Hz, H-4), 3.65 (2H, t, $J = 6.7$ Hz, H-10), 3.32 (3H, s, N_5 -Me), 2.95 (2H, t, $J = 7.7$ Hz, H-3), 2.91 (2H, t, $J = 6.7$ Hz, H-11); ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 600 MHz) δ : 168.6 (C-8), 157.5 (C-15), 157.3 (C-5a), 155.1 (C-7), 132.0 (C-2), 131.1 (C-13, C-17), 130.2 (C-12), 124.8 (C-8b), 124.3 (C-8a), 119.1 (C-2a), 116.5 (C-14, C-16), 85.5 (C-6), 54.2 (C-4), 46.6 (C-10), 39.8 (N_5 -Me), 36.5 (N_1 -Me), 34.8 (C-11), 20.3 (C-3); ESIMS m/z 336 [M] $^+$ (77), 229 [$M - C_7H_7O$] $^+$ (100)。

【来源】 海绵 *Zyzzya* cf. *fuliginosa*

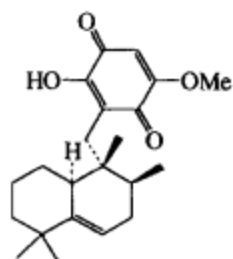
【分析方法】 海绵的 MeOH 提取物以正己烷/MeOH/ H_2O (9:1) 萃取, 含水层浓缩后用正丁醇抽提, 氯仿溶解部分分配于 DCCC 柱层析, 洗脱溶剂为 $CHCl_3$ /MeOH/ H_2O (7:13:8)。F 70-83 为活性部分, 上 RP-HPLC (MeOH/ H_2O , 45:55, with 0.1% TFA) 得到化合物 Makaluvamine P。

【生物活性与毒性】 强烈的黄嘌呤氧化酶抑制活性, 其 IC_{50} 值为 16.5 $\mu mol/L$ 。

- 【参考文献】 1. Casapullo A, et al. *J Nat Prod*, 2001, 64: 1354
 2. Radisky D C, et al. *J Am Chem Soc*, 1993, 115: 1632
 3. Barrows L R, et al. *Anti-Cancer Drug Des*, 1993, 8: 333
 4. Kraus G A, et al. *Synlett*, 1998, 845
 5. Casapullo A, et al. *J Nat Prod*, 2001, 64: 1354
 6. Tasdemir D, et al. *Z Naturforsch C Biosci*, 2002, 57: 914

A0136 Mamanuthaquinone

【结构式】



【分子式】 $C_{22}H_{30}O_4$

【相对分子质量】 358

【理化常数及谱学数据】 淡黄色固体; mp 108.5~109.5°C; $[\alpha] -31^\circ (c\ 0.058, CHCl_3)$; HRFABMS m/z : 358.2146(M^+), $C_{22}H_{30}O_4$; 1H NMR(500MHz, $CDCl_3$) δ : 0.73(s, H-14), 0.90(sh, H-1), 0.92(s, H-11), 0.96(d, $J = 7.0$ Hz, H-13), 0.99(s, H-12), 1.12(ddd, $J = 13.5, 13.5, 4.3$ Hz, H-2, 3, 8), 1.3-1.45(m), 1.73(m, H-7), 1.79(brd, H-1), 1.95(ddd, $J = 18.0, 17.5, 4.5$ Hz, H-7), 2.08(brd, $J = 13.0$ Hz, H-10), 2.45(d, $J = 13.0$ Hz, H-15), 2.58(d, $J = 13.0$ Hz, H-15), 3.84(s, H-22), 5.35(brs, H-6), 5.84(s, H-19), 7.45(s); ^{13}C NMR(500MHz, $CDCl_3$) δ : 16.0(q, C-14), 16.5(q, C-11), 22.7(t, C-2), 27.9(q, C-13), 29.7(q, C-12), 30.6(t, C-1), 31.5(t, C-7), 32.7(t, C-15), 36.3(s, C-4), 36.4(d, C-8), 40.9(s, C-9), 41.2(t, C-3), 41.7(s, C-10), 56.8(q, C-22), 102.0(d, C-19), 114.8(d, C-6), 118.3(s, C-16), 146.3(s, C-5), 152.8(s, C-17), 161.5(s, C-20), 182.0(s, C-21), 182.4(s, C-18)。

【来源】 海绵 *Fasciospongia*

【分析方法】 甲醇提取物经硅胶柱层析和高效液相色谱法 (39.5% ethyl acetate+60% hexane+0.5% acetic acid) 分离纯化获得活性成分 Mamanuthaquinone。

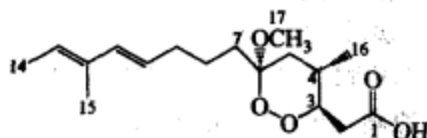
【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 HCT-116 的生长。

【参考文献】 1. Swersey J C, et al. *Tetrahedron Lett*, 1991, 32: 6687

2. Yoon T, et al. *Angew Chem Int Ed Eng*, 1994, 33: 853

A0137 Manadic acid A

【结构式】



【分子式】 $C_{17}H_{28}O_5$

【相对分子质量】 312

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha] +83.9^\circ (c\ 43.8, MeOH)$; HRFABMS m/z 295.1909 [$M + H - H_2O$] $^+$, HREIMS m/z 264.1738 [$M - O - MeOH$] $^+$; IR(CCl_4 , NaCl) ν_{max} (cm^{-1}): 3500~2400(br), 2950, 2930, 1710, 1430, 1300, 1270, 1070, 960, UV(MeOH) λ_{max} : 232nm; 1H NMR(300MHz, $CDCl_3$) δ : 2.51(H, dd, $J = 16.5, 8.9$ Hz, H-2a), 2.37(H, dd, 16.5, 4.8Hz, H-2b), 4.64(H, ddd, $J = 8.9, 4.8, 2.7$ Hz,

H-3), 1.90(H, m, H-4), 1.82(H, dd, $J = 13.8, 5.4$ Hz, H-5a), 1.74(H, dd, $J = 13.8, 3.0$ Hz, H-5b), 1.30, 1.62(2H, m, H-7), 1.41(2H, m, H-8), 2.07(2H, q, $J = 6.9$ Hz, H-9), 5.47(H, dt, $J = 15.6, 6.9$ Hz, H-10), 6.04(H, d, $J = 15.6$ Hz, H-11), 5.45(H, q, $J = 6.9$ Hz, H-13), 1.68(H, d, $J = 6.9$ Hz, H-14), 1.69(3H, s, H-15), 1.09(3H, d, $J = 7.2$ Hz, H-16), 3.21(3H, s, H-17); ^{13}C NMR(75MHz, CDCl_3): 176.3(C-1), 35.2(C-2), 78.9(C-3), 28.5(C-4), 36.9(C-5), 103.6(C-6), 32.4(C-7), 23.1(C-8), 32.7(C-9), 126.0(C-10), 135.5(C-11), 134.2(C-12), 124.9(C-13), 12.0(C-14), 13.7(C-15), 14.2(C-16), 48.7(C-17)。

【来源】 印度尼西亚海绵 *Plakortis* sp.

【分析方法】 海绵的乙醇提取物在二氯甲烷和乙醇-水间分配, 二氯甲烷层通过活性追踪的方法用高速逆流层析(HSCCC)(先用乙酸乙酯-庚烷-甲醇-水 7:4:4:3, 再用庚烷-乙腈-二氯甲烷 10:7:3)分离得到。结构通过(HR)MS、IR、UV和NMR(^1H NMR、 ^{13}C NMR和2D-NMR)等方法确定。

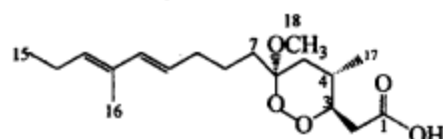
【生物活性与毒性】 1. 对肿瘤细胞的抑制(IC_{50} $\mu\text{g/mL}$): P-388(0.5), A-549(1), HT-29(2), MEL-28(5)。2. 免疫调节作用(IC_{50} $\mu\text{g/mL}$): MLK(0.015), LcV(0.5)。

【参考文献】 1. Ichiba T, et al. Tetrahedron, 1995, 51 (45): 12195

2. Varoglu M, et al. J Nat Prod, 1995, 58: 27

A0138 Manadic acid B

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{18}\text{H}_{30}\text{O}_5$

【相对分子质量】 326

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha] +130.3^\circ$ (c 4.0, MeOH); EIMS m/z 264, 248; IR(CCl_4 , NaCl) ν_{max} (cm^{-1}): 3500~2400(br), 2950, 2920, 1710, 1430, 1300, 1060, 960, UV(MeOH) λ_{max} : 234nm; ^1H NMR(300MHz, CDCl_3) δ : 2.51(H, dd, $J = 16.2, 8.7$ Hz, H-2a), 2.40(H, dd, 16.2, 4.8 Hz, H-2b), 4.65(H, ddd, $J = 8.7, 4.8, 2.7$ Hz, H-3), 1.92(H, m, H-4), 1.85(H, dd, $J = 13.5, 5.4$ Hz, H-5a), 1.76(H, dd, $J = 13.7, 2.7$ Hz, H-5b), 1.35, 1.62(2H, m, H-7), 1.43(2H, m, H-8), 2.08(2H, q, $J = 7.2$ Hz, H-9), 5.50(H, dt, $J = 15.6, 7.2$ Hz, H-10), 6.05(H, d, $J = 15.6$ Hz, H-11), 5.38(H, q, $J = 7.2$ Hz, H-13), 2.11(H, q, $J = 7.4$ Hz, H-14), 0.96(3H, t, $J = 7.4$ Hz, H-15), 1.70(3H, s, H-16), 1.11(3H, d, $J = 7.2$ Hz, H-17), 3.23(3H, s, H-18); ^{13}C NMR(75MHz, CDCl_3): 175.2(C-1), 35.0(C-2), 78.9(C-3), 28.7(C-4), 37.0(C-5), 130.6(C-6), 32.4(C-7), 23.1(C-8), 32.8(C-9), 126.3(C-10), 135.6(C-11), 132.8(C-12), 132.8(C-13), 21.4(C-14), 14.1(C-15), 12.3(C-16), 14.2(C-17), 48.2(C-18)。

【来源】 印度尼西亚海绵 *Plakortis* sp.

【分析方法】 海绵的乙醇提取物在二氯甲烷和乙醇-水间分配, 二氯甲烷层通过活性追踪的方法用高速逆流层析(HSCCC)(先用乙酸乙酯-庚烷-甲醇-水 7:4:4:3, 再用庚烷-乙腈-二氯甲烷 10:7:3)分离得到。结构通过(HR)MS、IR、UV和NMR(^1H NMR、 ^{13}C NMR和2D-NMR)等方法确定。

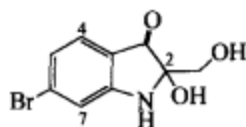
【生物活性与毒性】 对肿瘤细胞的抑制(IC_{50} $\mu\text{g/mL}$): P-388(0.5), A-549(1), HT-29(2), MEL-28(2.5)。

【参考文献】 1. Ichiba T, et al. Tetrahedron, 1995, 51 (45): 12195

2. Varoglu M, et al. J Nat Prod, 1995, 58: 27

A0139 Matemone

【结构式】



【分子式】 $C_{10}H_{10}BrNO_3$

【相对分子质量】 272

【理化常数及谱学数据】 黄绿色胶状物; $[\alpha]_D^{25} + 8.9^\circ$ (c 0.45, MeOH); UV(OH) λ_{max} (nm): 228(4.34), 245(4.33), 273(4.01), 399(3.50); IR(KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3334, 2951, 2920, 2851, 1702, 1608, 1573, 1450, 1083, 1088; 1H NMR(acetone- d_6) δ : 7.31(1H, d, $J = 8.1$ Hz, H-4), 7.15(1H, d, $J = 1.1$ Hz, H-7), 6.89(1H, dd, $J = 8.1, 1.1$ Hz, H-5), 5.07(NH, H-1), 3.65(1H, s, H-8b), 3.28(1H, s, H-8a), 3.06(3H, s, OCH₃); ^{13}C NMR(acetone- d_6) δ : 197.0(C-3), 163.0(C-7a), 133.1(C-1), 125.7(C-4), 122.4(C-5), 120.8(C-6), 116.0(C-7), 93.7(C-2), 65.3(C-8), 50.8(OCH₃); ESIMS m/z 270 and 272[(M-H)⁺, 1:1]。

【来源】 海绵 *Iotrochota purpurea*

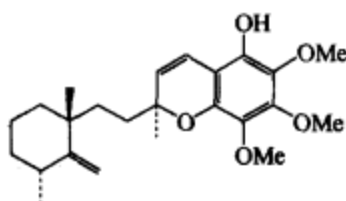
【分析方法】 海绵的乙醇提取物分配于水和正己烷之间, 含水层又以二氯甲烷萃取, 合并两个有机层。浸膏经过 C18 反相快速柱层析, 依次用甲醇/水梯度、EtOAc-MeOH(1:1) 和 EtOAc 洗脱。100% MeOH 洗脱部分经过硅胶柱层析, hexane-EtOAc 梯度洗脱。hexane-EtOAc(60:40) 洗脱部分依次经正相 HPLC、hexane-EtOAc(80:20) 洗脱以及 C18 柱, H₂O: MeOH(60:40) 洗脱得到化合物 Matemone。

【生物活性与毒性】 Matemone 抑制海刺猬蛋分裂的 IC₅₀ 值为 35 μ g/mL, 体外试验对 NSCLC-N6 L16 (肺癌)、Mia PaCa-2 (胰腺癌) 和 DU145 (前列腺癌) 细胞系显示中等细胞毒性, 其 IC₅₀ 值分别为 30 μ g/mL、24 μ g/mL 以及 27 μ g/mL。

【参考文献】 1. Carlett I, et al. J Nat Prod, 2000, 63: 981

A0140 Metachromin D

【结构式】



【分子式】 $C_{24}H_{34}O_5$

【相对分子质量】 402

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{22} + 15.0^\circ$ (c 0.7, CHCl₃); UV(MeOH) λ_{max} (nm): 226(25000), 280(10000), 320(3000); IR(neat) ν_{max} (cm^{-1}): 3400, 1460, 1420, 1380, 1280, 1120, 1040; EIMS m/z : 402 (M⁺, 20), 387(2), 279(15), 263(5), 251(100), 213(10), 149(25); HREIMS m/z : 402.2408 (M⁺, calcd for C₂₄H₃₄O₅, 402.2406); 1H NMR(CDCl₃) δ : 0.86(m, H-2'), 0.97(qd, $J = 12.2, 5.5$ Hz, H-3'), 1.01(s, H₃-14), 1.03(d, $J = 7.0$ Hz, H₃-12), 1.25(td, $J = 12.7, 4.9$ Hz, H-1'), 1.41(s, H₃-15), 1.46(m, H-1), 1.59(m, H-2), 1.63(m, H-7'), 1.66(m, H-8), 1.74(m, H-3), 1.86(ddd, $J = 12.0, 10.3, 5.9$ Hz, H-7), 2.32(m, H-4), 3.82(s, MeO-23), 3.85(s, MeO-22), 3.94(s, MeO-24), 4.69(s, H-13'), 4.76(s, H-13), 5.52(d, $J = 10.3$ Hz, H-10), 5.58(s, OH-17), 6.62(d, $J = 10.3$ Hz, H-11); ^{13}C NMR(CDCl₃) δ : 38.7(t, C-1), 21.9(t, C-2), 37.2(t, C-3), 34.0(d, C-4), 159.4(s, C-5), 39.5(s, C-6), 35.4(t, C-7), 35.4(t, C-8), 78.9(s, C-9), 127.3(d, C-10), 116.9(d, C-11), 19.6(q, C-12), 103.7(t, C-13), 25.0(q, C-14), 26.1(q, C-15), 105.0(s, C-16), 140.4(s, C-17), 132.9(s, C-18), 135.1(s, C-19), 146.2(s, C-20), 142.8(s, C-21), 61.3(q, C-22), 61.4(q, C-23), 61.5(q, C-24)。

【来源】 海绵 *Hippospogia metachromia*

【分析方法】 提取的乙酸乙酯部分用环己烷-乙酸乙酯梯度洗脱, 经硅胶柱层析法分离, 以 toluene-乙酸乙酯-乙腈 (8:1:1) 为展开剂通过硅胶薄层层析法进行纯化, 获得 Metachromin D。

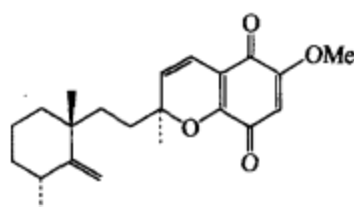
【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 L1210 和 KB 的生长。

【参考文献】 1. Kobayashi J, et al. J Org Chem, 1992, 57: 5773

2. Ishibashi M, et al. J Org Chem, 1988, 53: 2855
3. Kobayashi J, et al. J Nat Prod, 1989, 52: 1173
4. Almeida W P, et al. Tetrahedron Lett, 1994, 35: 1367
5. Kelecom A. J Brazil Chem Soc, 1998, 9: 101
6. Almeida W P, et al. 1999, 10: 401
7. Bruggemann M, et al. Eur J Org Chem, 2001, 647

A0141 Metachromin E

【结构式】



【分子式】 $C_{22}H_{28}O_4$

【相对分子质量】 356

【理化常数及谱学数据】 橙色油状物; $[\alpha]_D^{25} - 54.0^\circ (c\ 0.3, CHCl_3)$; UV (MeOH) λ_{max} (nm): 260 (6000), 290 (8700), 360 (500), 483 (300); IR (neat) ν_{max} (cm^{-1}): 1670, 1610, 1580, 1460, 1120, 1040; EIMS m/z : 356 (M^+ , 12), 341 (3), 237 (20), 205 (100), 160 (10); HREIMS m/z : 356.1996 (M^+ , calcd for $C_{22}H_{28}O_4$, 356.1987); 1H NMR ($CDCl_3$) δ : 0.86 (m, H-2'), 0.94 (m, H-3'), 1.01 (d, $J = 6.8$ Hz, H_3-12), 1.02 (s, H_3-14), 1.22 (m, H-1'), 1.43 (m, H-1), 1.50 (m, H_3-15), 1.54 (m, H-8), 1.56 (m, H-2), 1.60 (m, H-7'), 1.71 (m, H-3), 1.90 (m, H-7), 2.31 (m, H-4), 3.82 (s, MeO-22), 4.67 (s, H-13'), 4.69 (s, H-13), 5.57 (d, $J = 10.3$ Hz, H-10), 5.79 (s, H-19), 6.51 (d, $J = 10.3$ Hz, H-11); ^{13}C NMR ($CDCl_3$) δ : 38.7 (t, C-1), 22.7 (t, C-2), 37.1 (t, C-3), 33.9 (d, C-4), 159.0 (s, C-5), 39.1 (s, C-6), 36.0 (t, C-7), 34.9 (t, C-8), 84.3 (s, C-9), 128.0 (d, C-10), 115.2 (d, C-11), 19.6 (q, C-12), 104.0 (t, C-13), 25.0 (q, C-14), 27.5 (q, C-15), 115.1 (s, C-16), 178.6 (s, C-17), 158.9 (s, C-18), 105.4 (s, C-19), 181.5 (s, C-20), 151.9 (s, C-21), 56.5 (q, C-22)。

【来源】 海绵 *Hippospogia metachromia*

【分析方法】 提取的乙酸乙酯部分用环己烷-乙酸乙酯梯度洗脱, 经硅胶柱层析法分离, 以 toluene-乙酸乙酯-乙腈 (8:1:1) 为展开剂通过硅胶薄层层析法进行纯化, 获得 Metachromin E。

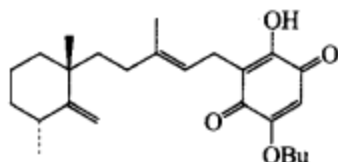
【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 L1210 和 KB 的生长。

【参考文献】 1. Kobayashi J, et al. J Org Chem, 1992, 57: 5773

2. Ishibashi M, et al. J Org Chem, 1988, 53: 2855
3. Kobayashi J, et al. J Nat Prod, 1989, 52: 1173
4. Almeida W P, et al. Tetrahedron Lett, 1994, 35: 1367
5. Kelecom A. J Brazil Chem Soc, 1998, 9: 101
6. Almeida W P, et al. 1999, 10: 401
7. Bruggemann M, et al. Eur J Org Chem, 2001, 647

A0142 Metachromin F

【结构式】



【分子式】 $C_{25}H_{36}O_4$

【相对分子质量】 400

【理化常数及谱学数据】 黄色油状物; $[\alpha]_D^{22} - 4.0^\circ$ (c 0.2, $CHCl_3$); UV (MeOH) λ_{max} : 290nm (16400), 455nm (250); IR (neat) ν_{max} (cm^{-1}): 3400, 1640, 1600, 1370, 1300, 1200; EIMS m/z : 400 (M^+ , 40), 385 (3), 372 (3), 358 (3), 344 (3), 210 (65), 166 (30), 123 (55), 109 (100), 57 (35); HREIMS m/z : 400.2622 (M^+ , calcd for $C_{25}H_{36}O_4$, 400.2614); 1H NMR ($CDCl_3$) δ : 0.83 (m, H-2'), 0.96 (m, H-3'), 0.97 (t, $J = 6.6$ Hz, H₃-25), 1.01 (s, H₃-14), 1.02 (t, $J = 6.6$ Hz, H₃-12), 1.21 (m, H-1'), 1.44 (m, H-24), 1.47 (m, H-1), 1.48 (m, H-7'), 1.57 (m, H-2, 7), 1.73 (m, H-3), 1.77 (m, H₃-15), 1.85 (m, H₂-23), 1.96 (m, H-8), 2.32 (m, H-4), 3.15 (d, $J = 7.3$ Hz, H₂-11), 3.94 (t, $J = 6.6$ Hz, H-22), 4.68 (s, H-13'), 4.70 (s, H-13), 5.16 (t, $J = 7.3$ Hz, H-10), 5.80 (s, H-19); ^{13}C NMR ($CDCl_3$) δ : 38.7 (t, C-1), 21.9 (t, C-2), 37.3 (t, C-3), 34.0 (d, C-4), 159.8 (s, C-5), 39.3 (s, C-6), 40.0 (t, C-7), 34.0 (t, C-8), 138.4 (s, C-9), 118.9 (d, C-10), 21.9 (t, C-11), 19.6 (q, C-12), 103.5 (t, C-13), 24.7 (q, C-14), 16.4 (q, C-15), 118.1 (s, C-16), 151.1 (s, C-17), 183.2 (s, C-18), 102.4 (s, C-19), 160.6 (s, C-20), 181.6 (s, C-21), 69.9 (t, C-22), 29.2 (t, C-23), 19.1 (t, C-24), 13.7 (q, C-25).

【来源】 海绵 *Hippospogia metachromia*

【分析方法】 提取的乙酸乙酯部分用环己烷-乙酸乙酯梯度洗脱, 经硅胶柱层析法分离, 以 toluene-乙酸乙酯 (9:1) 为展开剂通过硅胶薄层层析法进行纯化, 获得 Metachromin F。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 L1210 和 KB 的生长。

【参考文献】 1. Kobayashi J, et al. J Org Chem, 1992, 57: 5773

2. Ishibashi M, et al. J Org Chem, 1988, 53: 2855

3. Kobayashi J, et al. J Nat Prod, 1989, 52: 1173

4. Almeida W P, et al. Tetrahedron Lett, 1994, 35: 1367

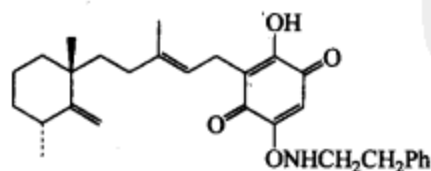
5. Kelecom A. J Brazil Chem Soc, 1998, 9: 101

6. Almeida W P, et al. 1999, 10: 401

7. Bruggemann M, et al. Eur J Org Chem, 2001, 647

A0143 Metachromin G

【结构式】



【分子式】 $C_{29}H_{37}NO_4$

【相对分子质量】 447

【理化常数及谱学数据】 粉色油状物; $[\alpha]_D^{20} - 18.0^\circ$ (c 0.2, C_6H_6); UV (MeOH) λ_{max} (nm): 211 (29700), 324 (14700), 508 (800); IR (neat) ν_{max} (cm^{-1}): 3300, 1590, 1510, 1380, 1210; EIMS m/z : 447 (M^+ , 90), 356 (60), 296 (20), 257 (60), 166 (90), 123 (30), 105 (100), 91 (45); HREIMS m/z : 447.2768 (M^+ , calcd for $C_{29}H_{37}NO_4$, 447.2673); 1H NMR ($CDCl_3$) δ : 0.83 (m, H-2'), 0.99 (m, H-3'), 1.01 (s, H₃-14), 1.02 (d, $J = 6.6$ Hz, H₃-12), 1.19 (m, H-1'), 1.46 (m, H-1), 1.50 (m, H-7'), 1.57 (m, H-7), 1.58 (m, H-2), 1.73 (m, H-3), 1.75 (m, H₃-15), 1.97 (m, H-8), 2.33 (m, H-4), 2.95 (t, $J = 7.0$ Hz, H₂-23), 3.09 (d, $J = 7.0$ Hz, H₂-11), 3.42 (q, $J = 7.0$ Hz, H-22), 4.68 (s, H-13'), 4.71 (s, H-13), 5.16 (t, $J = 7.0$ Hz, H-10), 5.39 (s, H-19), 6.45 (brt, NH),

7.20(d, $J = 8.0$ Hz, $H_2-25, 25'$), 7.27(t, $J = 8.0$ Hz, H-27), 7.34(t, $J = 8.0$ Hz, H-26, 26'); ^{13}C NMR(CDCl_3) δ : 38.7(t, C-1), 21.9(t, C-2), 37.2(t, C-3), 33.9(d, C-4), 159.8(s, C-5), 39.2(s, C-6), 40.0(t, C-7), 34.0(t, C-8), 137.4(s, C-9), 119.4(d, C-10), 21.9(t, C-11), 19.6(q, C-12), 103.4(t, C-13), 24.6(q, C-14), 16.3(q, C-15), 119.4(s, C-16), 154.0(s, C-17), 184.6(s, C-18), 91.8(d, C-19), 145.0(s, C-20), 182.3(s, C-21), 43.9(t, C-22), 34.3(t, C-23), 137.4(s, C-24), 128.6(d, C-25), 129.0(d, C-26), 127.1(d, C-27)。

【来源】 海绵 *Hippospogia metachromia*

【分析方法】 提取的乙酸乙酯部分用环己烷-乙酸乙酯梯度洗脱, 经硅胶柱层析法分离, 以环己烷-氯仿-丙酮(3:3:1)为洗脱剂进行纯化, 获得 Metachromin G。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 L1210 和 KB 的生长。

【参考文献】 1. Kobayashi J, et al. J Org Chem, 1992, 57: 5773

2. Ishibashi M, et al. J Org Chem, 1988, 53: 2855

3. Kobayashi J, et al. J Nat Prod, 1989, 52: 1173

4. Almeida W P, et al. Tetrahedron Lett, 1994, 35: 1367

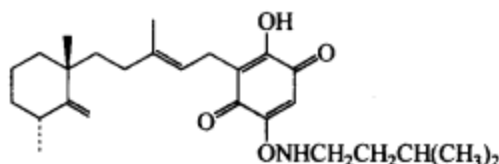
5. Kelecom A. J Brazil Chem Soc, 1998, 9: 101

6. Almeida W P, et al. 1999, 10: 401

7. Bruggemann M, et al. Eur J Org Chem, 2001, 647

A0144 Metachromin H

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{26}\text{H}_{39}\text{NO}_4$

【相对分子质量】 413

【理化常数及谱学数据】 粉色油状物; $[\alpha]_D^{20} - 9.0^\circ$ (c 0.2, C_6H_6); UV(MeOH) λ_{max} : 324nm(12800), 512nm(700); IR(neat) ν_{max} (cm^{-1}): 3300, 3250, 1570, 1520, 1380, 1200; EIMS m/z : 413(M^+ , 65), 356(8), 289(15), 275(12), 262(30), 223(100), 166(30), 152(30), 123(15); HREIMS m/z : 447.2768(M^+ , calcd for $\text{C}_{26}\text{H}_{37}\text{NO}_3$, 477.2673); ^1H NMR(CDCl_3) δ : 0.83(m, H-2'), 0.94(d, $J = 6.6$ Hz, H-25, 25'), 0.98(m, H-3'), 1.01(s, H₃-14), 1.02(d, $J = 6.6$ Hz, H₃-12), 1.21(m, H-1'), 1.40(m, H-24), 1.46(m, H-1), 1.52(m, H₂-7), 1.58(m, H-2), 1.56(m, H₂-23), 1.58(m, H-2), 1.73(m, H-3), 1.76(m, H₃-15), 2.31(m, H-4), 3.10(d, $J = 7.0$ Hz, H₂-11), 3.15(m, H₂-22), 4.68(s, H-13'), 4.71(s, H-13), 5.17(t, $J = 7.0$ Hz, H-10), 5.35(s, H-19), 6.40(brt, NH), 8.20(brs, OH); ^{13}C NMR(CDCl_3) δ : 38.8(t, C-1), 22.0(t, C-2), 37.3(t, C-3), 34.0(d, C-4), 159.8(s, C-5), 39.3(s, C-6), 40.1(t, C-7), 34.0(t, C-8), 137.9(s, C-9), 119.8(d, C-10), 22.0(t, C-11), 19.7(q, C-12), 103.5(t, C-13), 24.7(q, C-14), 16.4(q, C-15), 119.8(s, C-16), 156.0(s, C-17), 182.3(s, C-18), 91.5(d, C-19), 150.0(s, C-20), 178.9(s, C-21), 41.1(t, C-22), 37.3(t, C-23), 26.0(d, C-24), 22.4(q, C-25)。

【来源】 海绵 *Hippospogia metachromia*

【分析方法】 提取的乙酸乙酯部分用环己烷-乙酸乙酯梯度洗脱, 经硅胶柱层析法分离, 以环己烷-氯仿-丙酮(3:3:1)为洗脱剂进行纯化, 获得 Metachromin H。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 L1210 和 KB 的生长。

【参考文献】 1. Kobayashi J, et al. J Org Chem, 1992, 57: 5773

2. Ishibashi M, et al. J Org Chem, 1988, 53: 2855

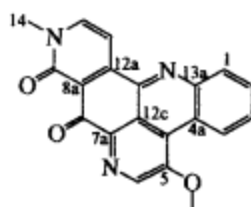
3. Kobayashi J, et al. J Nat Prod, 1989, 52: 1173

4. Almeida W P, et al. Tetrahedron Lett, 1994, 35: 1367

5. Kelecom A. J Brazil Chem Soc, 1998, 9: 101
6. Almeida W P, et al. 1999, 10: 401
7. Bruggemann M, et al. Eur J Org Chem, 2001, 647

A0145 5-Methoxyneoamphimedine

【结构式】



【分子式】 $C_{20}H_{13}N_3O_3$

【相对分子质量】 343

【理化常数及谱学数据】 黄色固体; HRESIMS m/z 344. 1044 (calcd for $C_{20}H_{14}N_3O_3 [M+H]^+$); 1H NMR (500MHz): 9. 07(s, H-6), 8. 04(t, H-2), 9. 42(d, H-4), 7. 95(t, H-3), 8. 37(d, H-1), 7. 53(bs, H-5), 7. 69(d, H-12); ^{13}C NMR (125MHz): 158. 5(C-9), 128. 4(C-6), 177. 9(C-8), 146. 9(C-7a), 139. 8(C-13a), 134. 1(C-4b), 131. 1(C-2), 145. 5(C-12b), 124. 4(C-4), 118. 5(C-12c), 130. 2(C-3), 131. 3(C-1), 121. 7(C-4a), 154. 4(C-5), 119. 0(C-8a), 149. 3(C-12a), 144. 8(C-11), 99. 7(C-12), 56. 3(C-15), 38. 0(C-14).

【来源】 海绵 *Xestospongia cf. carbonaria*

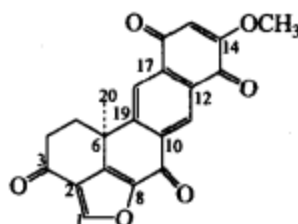
【分析方法】 海绵提取物分配于水/氯仿中, 取氯仿层浓缩, 浓缩物以正己烷/含水 10% 甲醇溶液进行分配, 去除大部分脂肪酸和甾体类杂质。浓缩甲醇层继续分配于 50% 甲醇/水和二氯甲烷之间, 二氯甲烷部分显示良好活性。该部分经硅胶柱分段后, 用 RP-HPLC 制备, 甲醇/水梯度洗脱得到化合物 5-Methoxyneoamphimedine。

【生物活性与毒性】 体外试验显示对几种大鼠和人实体瘤细胞株具有选择性细胞毒作用。

【参考文献】 1. Thale, Z et al. J Org Chem, 2002, 67: 9384

A0146 14-Methoxyhalenaquinone

【结构式】



【分子式】 $C_{21}H_{14}O_6$

【相对分子质量】 362

【理化常数及谱学数据】 微红黄色固体; HREIMS m/z 362. 0790 $[M]^+$; LREIMS m/z (rel. int.) 362 ($[M]^+$, 40), 347(100), 332(11), 263(30), 179(10), 151(10); UV($CHCl_3$) λ_{max} (nm): 351, 246, 237, 216; 1H NMR (300MHz, $CDCl_3$) δ : 8. 96(H, s, H-1), 2. 27, 1. 87(2H, m, H-4), 2. 80, 3. 12(2H, m, H-5), 8. 38(H, s, H-11), 6. 29(H, s, H-15), 8. 33(H, s, H-18), 1. 68(3H, s, H-20), 3. 91(3H, s, $-OCH_3$); ^{13}C NMR (125MHz, $CDCl_3$): 150. 2(C-1), 122. 8(C-2), 192. 1(C-3), 33. 4(C-4), 36. 6(C-5), 37. 2(C-6), 148. 3(C-7), 145. 1(C-8), 170. 9(C-9), 137. 0(C-10), 127. 7(C-11), 130. 2(C-12), 179. 2(C-13), 161. 6(C-14), 110. 5(C-15), 184. 5(C-16), 134. 5(C-17), 124. 0(C-18), 155. 1(C-19), 29. 9(C-20), 57. 0($-OCH_3$).

【来源】 海绵 *Xestospongia cf. carbonaria*

【分析方法】 海绵的甲醇提取物的二氯甲烷萃取层上 flash 硅胶柱, 正己烷-乙酸乙酯梯度洗脱, 馏分再

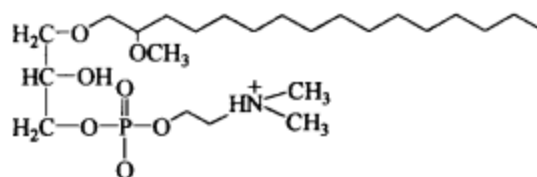
上正相 HPLC (正己烷-乙酸乙酯) 1:1 得到纯品。结构通过 (HR)MS、UV 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 对 PP60^{src} 蛋白酪氨酸激酶 (PTK) 的抑制作用, $\text{IC}_{50} = 5\mu\text{mol/L}$ 。

【参考文献】 1. Alvi K A, et al. J Org Chem, 1993, 58 (18): 4871

A0147 1-O-(2-Methoxyhexadecyl)-sn-glycero-3-phosphocholine

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{24}\text{H}_{52}\text{NO}_7\text{P}$

【相对分子质量】 497

【理化常数及谱学数据】 不定形固体; $[\alpha]_D^{25} + 5.6$ (c 0.27, MeOH); ^1H NMR (CD_3OD , 600MHz) δ : 4.29 (2H, m, H-1''), 3.94 (1H, ddd, $J = 10.0, 6.1\text{Hz}$, $J_{\text{HN}} = 3.8\text{Hz}$, H-3), 3.90 (1H, quint, $J = 4.7\text{Hz}$, H-2), 3.85 (1H, ddd, $J = 10.0, 5.6\text{Hz}$, $J_{\text{HN}} = 5.6\text{Hz}$, H-3), 3.64 (2H, m, H-2''), 3.56 (1H, dd, $J = 10.1, 4.7\text{Hz}$, H-1), 3.52 (1H, dd, $J = 10.5, 3.8\text{Hz}$, H-1'), 3.49 (1H, dd, $J = 10.1, 5.6\text{Hz}$, H-1), 3.47 (1H, dd, 10.5, 5.9Hz, H-1'), 3.40 (3H, s, OCH_3), 3.36 (1H, m, H-2'), 3.23 (9H, s, N- CH_3), 1.48 (2H, quint, $J = 7.0\text{Hz}$, H-3'), 1.35-1.25 (m, H-4'~H15'), 0.90 (3H, t, $J = 7.0\text{Hz}$, H-16'); ^{13}C NMR (CD_3OD , 150MHz): 81.6 (C-2'), 74.5 (C-1'), 73.6 (C-1), 71.0 (d, $J_{\text{CP}} = 7.6\text{Hz}$, C-2), 68.3 (d, $J_{\text{CP}} = 6.0\text{Hz}$, C-3), 67.5 (dt, $J_{\text{CP}} = 7.2\text{Hz}$, $J_{\text{CN}} = 3.0\text{Hz}$, C-2''), 60.4 (d, $J_{\text{CP}} = 5.1\text{Hz}$, C-1''), 57.8 (OCH_3), 54.7 (t, $J_{\text{CN}} = 3.8\text{Hz}$, N- CH_3), 33.1 (C-14'), 32.3 (C-3'), 30.9-30.5 (C-5'~C-13'), 26.5 (C-4'), 23.7 (C-15'), 14.4 (C-16'); MS/MS m/z 512 $[\text{M} + \text{H}]^+$ (100), 496 (1.0), 482 (1.0), 468 (1.0), 454 (0.9), 440 (0.9), 426 (1.0), 412 (1.0), 398 (1.0), 384 (1.0), 370 (0.9), 354 (1.1), 298 (1.0)。

【来源】 海绵 *Spirastrella abata*

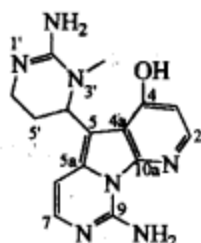
【分析方法】 海绵提取物经反相柱层析分成 7 个部分, 85% MeOH- H_2O 洗脱的 F3 部分显示良好活性, 该部分继续经 RP HPLC (YMC-Pack CN, 250mm $\times$ 10mm, S-5 μm , 12.0nm), 以 CH_3CN - H_2O (1:1) 洗脱, 得到化合物 1-O-(2-Methoxyhexadecyl)-sn-glycero-3-phosphocholine。

【生物活性与毒性】 抗人实体肿瘤细胞 A549、SK-OV-3、SK-MEL-2、XF498 和 HCT15 的 ED_{50} 值分别为 5.8 $\mu\text{g/mL}$ 、5.7 $\mu\text{g/mL}$ 、5.2 $\mu\text{g/mL}$ 、4.5 $\mu\text{g/mL}$ 和 5.0 $\mu\text{g/mL}$ 。

【参考文献】 1. Naseer Alam, et al. J Nat Prod, 2001, 64: 533~535

A0148 N(3')-Methyl tetrahydrovarion B

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{15}\text{H}_{17}\text{ON}_7$

【相对分子质量】 311

【理化常数及谱学数据】 亮黄色固体; mp 226 $^{\circ}\text{C}$ (分解); $[\alpha] - 22.4^{\circ}$ (c 3.5, MeOH); HRFABMS m/z 312.1579 $[\text{M} + \text{H}]^+$; UV (MeOH) λ_{max} (nm): 385, 367, 351, 324, 311, 256; IR (KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3600~

2500(br), 1633, 1572, 1490, 1300; ^1H NMR [500MHz, $(\text{CD}_3)_2\text{SO}/(\text{CD}_3)_2\text{CO}$ 1:1] δ : 8.11 (H, d, J = 6Hz, H-2), 7.09 (H, d, J = 5.5Hz, H-3), 6.58 (H, brs, H-6), 7.28 (H, d, J = 6.5Hz, H-7), 5.38 (H, brs, H-4'), 2.28, 2.49 (2H, brs, H-5'), 3.40 (H, m, H-6'a), 3.32 (H, brs, H-6'b), 11.77, 9.49 (2H, brs, 9-NH₂), 7.76 (H, brs, 2'-NH₂), 2.88 (3H, s, 3'-NMe); ^{13}C NMR (50MHz, CD_3OD): 143.9 (C-2), 106.8 (C-3), 159.4 (C-4), 112.6 (C-4a), 101.7 (C-5), 133.5 (C-5a), 99.8 (C-6), 137.6 (C-7), 146.7 (C-9), 151.2 (C-10a), 156.6 (C-2'), 55.6 (C-4'), 30.8 (C-5'), 37.7 (C-6'), 35.5 (3'-NMe)。

【来源】 海绵 *Kirkpatrickia varialosa*

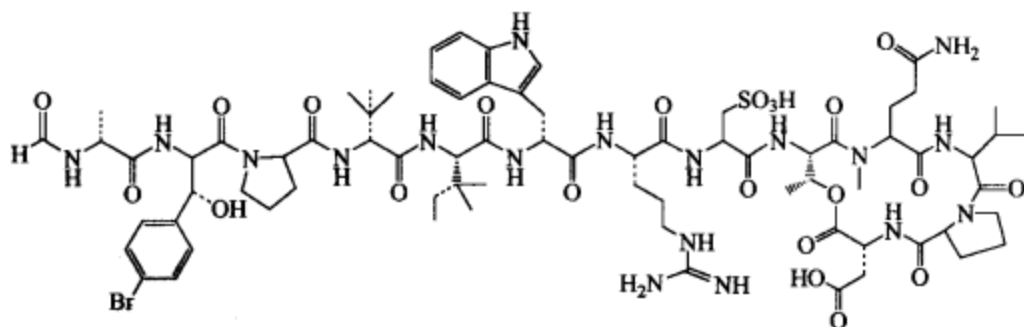
【分析方法】 海绵的提取物上 ODS flash 柱, 甲醇-水 (9:1) 洗脱的馏分再上硅胶柱, 二氯甲烷-甲醇 (95:5) 洗脱的馏分用 Sephadex LH-20 (二氯甲烷-甲醇 1:1) 分离, 最后用反相 HPLC (氨基柱) 分离得到纯品。结构通过 (HR)MS、UV、IR 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 1. 对肿瘤细胞的抑制作用 (IC_{50} , $\mu\text{g/mL}$): HCT116 (0.48)。2. 对 *Saccharomyces cerevisiae* 的抑制作用, 在 $2\mu\text{g/mL}$ 下能形成 36mm 的抑菌环。

【参考文献】 1. Trimurtulu G, et al. Tetrahedron, 1994, 50 (13): 3993

A0149 Microspinosamide

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{75}\text{H}_{109}\text{BrN}_{18}\text{O}_{22}\text{S}$

【相对分子质量】 1726

【来源】 海绵 *Sidonops microspinososa*

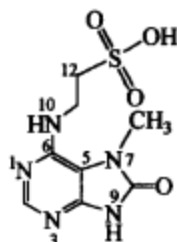
【分析方法】 海绵的水提取物, 一次用 CH_2Cl_2 -MeOH (1:1) 和 MeOH 分别抽提, 含水层和有机层均显示强烈活性, 经 C4 柱 (5cm $\times$ 8cm) 分段, 分别以 H_2O 、 H_2O -MeOH (2:1)、 H_2O -MeOH (1:2) 及 MeOH 洗脱, 最后经 RP HPLC 纯化 (20%~56% CH_3CN , 体积分数 0.5% TFA 洗脱), 得到化合物 Microspinosamide。

【生物活性与毒性】 在细胞水平的体外抗艾滋病试验中, 能抑制 HIV-1 感染 CEM-SS 靶细胞所引发的病变, 其 EC_{50} 值为 $0.2\mu\text{g/mL}$ 。

【参考文献】 1. Rashid M A, et al. J Nat Prod, 2001, 64: 117

A0150 Microxine

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_8\text{H}_{11}\text{N}_5\text{O}_4\text{S}$

【相对分子质量】 273

【理化常数及谱学数据】 白色不定形粉末; UV(MeOH) $\lambda_{\max}$: 210, 274 nm; IR(KBr) $\nu_{\max}$ (cm^{-1}): 3445 br, 1694, 1632, 1455, 1433, 1386, 1343, 1195, 1170, 1042, 736, 598; ^1H NMR(D_2O) δ : 2.95(2H, t, $J = 5.6\text{ Hz}$, H-12), 3.30(3H, s, 7-NMe), 3.70(2H, t, $J = 5.6\text{ Hz}$, H-11), 7.96(1H, s, H-2); ^{13}C NMR(D_2O) δ : 28.6(q, 7-NMe), 37.4(t, C-11), 49.0(t, C-12), 107.2(s, C-5), 143.9(s, C-4), 145.1(s, C-6), 147.0(d, C-2), 153.9(s, C-8); HRFABMS(3-nitrobenzyl alcohol) observed m/z 274.0666 [$\text{M} + \text{H}$] $^+$ (calcd for $\text{C}_8\text{H}_{12}\text{N}_5\text{O}_4\text{S}$ m/z 274.0610)。

【来源】 海绵 *Microxina* sp.

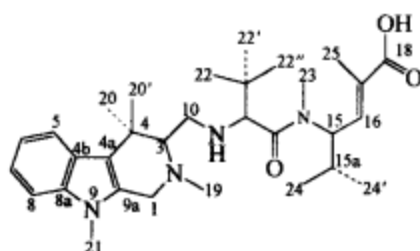
【分析方法】 海绵的乙醇提取物以正丁醇和水进行分配, 含水部分经 RPHPLC (Rainin Dynamax Macro C18, $\text{H}_2\text{O}/\text{CH}_3\text{CN}$ containing 0.1% TFA) 得到化合物 Microxine。

【生物活性与毒性】 作为 cdc2 激酶抑制剂的 IC_{50} 值为 $13\mu\text{mol/L}$ 。

【参考文献】 1. Killday KB, et al. J Nat Prod, 2001, 64: 525

A0151 Milnamide A

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{31}\text{H}_{48}\text{O}_3\text{N}_4$

【相对分子质量】 524

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha] + 28.8^\circ$ (c 0.50, CH_3Cl); HREIMS m/z 538.3511 [$\text{C}_{31}\text{H}_{46}\text{O}_4\text{N}_4$] $^+$; IR (film) $\nu_{\max}$ (cm^{-1}): 3319, 2964, 2864, 1680, 1634, 1470, 1368, 1244, 1085; UV(MeOH) $\lambda_{\max}$ (nm): 223, 285, 294, 304, 380; ^1H NMR(500MHz, CDCl_3) δ : 7.63(h, d, $J = 7.9\text{ Hz}$, H-5), 7.26(H, d, $J = 8.1\text{ Hz}$, H-8), 7.15(H, dd, $J = 6.8, 8.1\text{ Hz}$, H-7), 7.03(H, dd, $J = 6.8, 7.9\text{ Hz}$, H-6), 6.72(H, d, $J = 10\text{ Hz}$, H-15), 4.75(H, d, $J = 8.8\text{ Hz}$, H-12), 4.02(H, d, $J = 14.9\text{ Hz}$, H-1), 3.83(H, d, $J = 14.9\text{ Hz}$, H-1'), 3.59(3H, s, H-21), 3.04(H, s, H-3), 2.98(3H, s, H-23), 2.60(3H, s, H-19), 1.89(3H, s, H-25), 1.89(H, m, H-15a), 1.48(6H, s, H-20), 0.86(3H, d, $J = 6.9\text{ Hz}$, H-24'), 0.81(9H, s, H-22); ^{13}C NMR(75MHz, CDCl_3): 171.9(C-13), 171.5(C-10), 170.3(C-18), 140.3(C-16), 137.4(C-8a), 131.9(C-17), 131.7(C-9a), 125.1(C-4b), 120.6(C-7), 119.5(C-5), 118.7(C-6), 113.3(C-4a), 108.9(C-8), 75.6(C-3), 56.4(C-15), 54.7(C-12), 48.3(C-1), 35.4(C-4), 34.7(C-12a), 31.2(C-23), 30.1(C-20), 29.7(C-15a), 29.2(C-21), 26.4(C-22), 24.9(C-20'), 19.3(C-24), 19.1(C-24'), 13.7(C-25)。

【来源】 巴布亚新几内亚海绵 *Auletta* cf. *constricta*

【分析方法】 海绵的甲醇提取物用细胞毒活性追踪的方法得到纯品。结构通过 (HR) MS、IR、UV 和 NMR(^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 对各种肿瘤细胞的抑制作用 (体外实验) 如下: A549($\text{IC}_{50} = 4.1\mu\text{g/mL}$), HT-29($\text{IC}_{50} = 2.8\mu\text{g/mL}$), B16/F10($\text{IC}_{50} = 3.3\mu\text{g/mL}$), P-388($\text{IC}_{50} = 0.74\mu\text{g/mL}$)。

【参考文献】 1. Crews P, et al. J Org Chem, 1994, 59: 2932

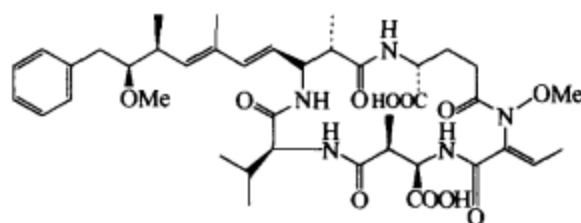
2. Farias J J, et al. Diss Abstr Int B, 1997, 57: 5067

3. Beker B J. carboline and isoquinoline alkaloids from marine organisms. From: Pelletier W. Alkaloids: Chemical and Biological Perspectives. Oxford: Pub. Pergamon, 1996. 357

4. Chevallier C, et al. Org Lett, 2003, 5: 3737

A0152 Motuporin

【结构式】



【分子式】 $C_{40}H_{57}N_5O_{11}$

【相对分子质量】 783

【理化常数及谱学数据】 1H NMR (500MHz, CD_3OD) δ : 3.02 (dd, $J = 10.5, 7.0$ Hz, H-2), 4.61 (dd, $J = 10.5, 9.0$ Hz, H-3), 5.61 (dd, $J = 15.5, 9.0$ Hz, H-4), 6.22 (d, $J = 15.5$ Hz, H-5), 5.39 (d, $J = 9.5$ Hz, H-7), 2.57 (m, H-8), 3.21-3.25 (H-9), 2.65 (dd, $J = 14.0, 7.0$ Hz, H-10), 2.81 (dd, $J = 14.0, 4.5$ Hz, H-10'), 7.13-7.20 (m, H-12), 7.23 (m, H-13), 7.13-7.20 (m, H-14), 7.23 (m, H-15), 7.13-7.20 (m, H-16), 1.02 (d, $J = 7.0$ Hz, H-17), 1.62 (s, H-18), 0.99 (d, $J = 6.5$ Hz, H-19), 3.23 (s, H-20), 4.40 (bd, $J = 3.5$ Hz, H-22), 2.49 (m, H-23), 0.76 (d, $J = 6.5$ Hz, H-24), 0.84 (d, $J = 7.0$ Hz, H-25), 3.21-3.25 (m, H-27), 4.20 (bd, $J = 3.0$ Hz, H-28), 1.20 (d, $J = 7.0$ Hz, H-30), 6.94 (q, $J = 7.5$ Hz, H-33), 1.74 (d, $J = 7.5$ Hz, H-34), 3.07 (s, H-35), 2.04 (ddd, $J = 16.4, 12.2, 4.5$ Hz, H-37), 2.73 (ddd, $J = 16.4, 12.8, 4.0$ Hz, H-37'), 1.81 (m, H-38), 2.27 (m, H-38'), 4.45 (bt, $J = 4.3$ Hz, H-39); ^{13}C NMR (500MHz, CD_3OD) δ : 176.4 (C-1), 44.8 (C-2), 56.0 (C-3), 127.3 (C-4), 138.4 (C-5), 134.2 (C-6), 136.4 (C-7), 37.7 (C-8), 88.5 (C-9), 39.0 (C-10), 140.6 (C-11), 130.5 (C-12), 129.2 (C-13), 127.0 (C-14), 129.2 (C-15), 130.5 (C-16), 16.4 (C-17), 13.0 (C-18), 16.5 (C-19), 58.7 (C-20), 171.8 (C-21), 57.7 (C-22), 30.1 (C-23), 16.5 (C-24), 19.8 (C-25), 177.9 (C-26), 40.8 (C-27), 60.4 (C-28), 177.1 (C-29), 16.6 (C-30), 165.7 (C-31), 137.9 (C-32), 136.6 (C-33), 13.2 (C-34), 35.0 (C-35), 175.7 (C-36), 29.7 (C-37), 28.8 (C-38), 54.4 (C-39), 178.3 (C-40).

【来源】 海绵 *Theonella swinhoei*

【分析方法】 甲醇粗提物分配于氯仿和甲醇/水 (4:7) 中, 水溶部分通过 Sephadex LH-20 (MeOH) 和反相制备薄层 (MeOH/ H_2O 6:4) 获得活性成分 Motuporin.

【生物活性与毒性】 对一系列的肿瘤细胞 P388、A549、HEY、LoVo、MCF7 和 U373MG 均有抑制作用.

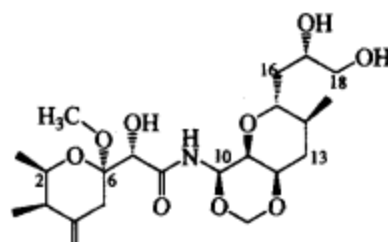
【参考文献】 1. Dilip de Silva, et al. Tetrahedron Lett, 1992, 33: 1561

2. Valentekovich R J, et al. J Am Chem Soc, 1995, 117: 9069

3. Panek J S, et al. J Org Chem, 1997, 62: 4914

A0153 Mycalamide D

【结构式】



【分子式】 $C_{22}H_{37}NO_9$

【相对分子质量】 459

【理化常数及谱学数据】 1H NMR ($CDCl_3$) δ : 3.99 (dq, $J = 6.7, 2.7$, H-2), 1.18 (d, $J = 6.3$, 2-Me), 2.24 (dq, $J = 6.9, 2.7$, H-3), 0.99 (d, $J = 6.9$, 3-Me), 4.80 (m, 4=CH₂), 4.80 (m, 4=CH₂), 2.37 (s, H-5), 3.29 (s, 6-OMe), 4.31 (s, H-7), 7.50 (d, $J = 10.2$, H-9), 5.87 (dd, $J = 10.2, 9.9$, H-10), 5.08 (d, $J = 6.8$, 10-OCH₂), 4.82 (d, $J = 7.0$, 10-OCH₂), 3.89 (dd, $J = 9.6, 6.9$, H-11), 4.14 (dd, $J = 10.8, 6.9$, H-12), 4.00 (d, $J = 10.2$, H-13), 1.01 (s, 14-Me_{eq}), 0.92 (s, 14-Me_{ax}); ^{13}C NMR ($CDCl_3$) δ : 70.0 (C-2), 17.5 (2-Me), 41.0 (C-3), 11.5 (3-Me), 144.0 (C-4), 110.5 (4=CH₂), 33.0 (C-5), 99.5 (C-6), 49.0 (6-OMe), 73 (C-7), 171.5 (C-8), 73.5 (C-10), 86.5 (10-OCH₂), 72.0 (C-11), 74.0 (C-12), 69.0 (C-13), 40.1 (C-14), 22.5 (14-Me),

12. 2(14-Me), 78. 5(C-15), 31. 0(C-16), 71. 8(C-17), 66. 0(C-18), HRFABMS m/z 512. 2484, calc for $C_{23}H_{39}NO_{10}Na^+$ 512. 2472.

【来源】 海绵 *Stylinosn* sp.

【分析方法】 海绵以 DCM-MeOH(1:1) 提取数次, 含水提取物依次以正己烷、DCM 萃取。DCM 萃取物经过反相快速柱层析, 由 30% MeOH-H₂O 梯度到 DCM 洗脱得到一系列洗脱组分。活性组分经 DIOL 快速柱层析, 洗脱溶剂为 DCM 到乙酸乙酯。洗脱部分上反相 HPLC 纯化, 以 30% 乙腈/水洗脱得到化合物 Mycalamide D。

【生物活性与毒性】 体外抑制 P-388 大鼠白血病细胞系的 IC₅₀ 值为 35. 0 ng/mL。

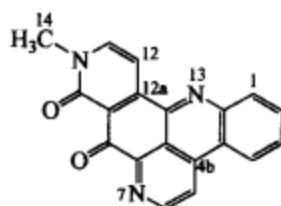
【参考文献】 1. Simpson J S, et al. J Nat Prod, 2000, 63: 704

2. Hood K A, et al. Apoptosis, 2001, 62: 4914

3. Takemura T, et al. 2002, 58: 6359

A0154 Neoamphimedine

【结构式】



【分子式】 $C_{19}H_{11}N_3O_2$

【相对分子质量】 313

【理化常数及谱学数据】 黄色固体; mp > 300℃; UV(OH) λ_{max} (nm): 205, 226, 278, 371; IR(KBr) ν_{max} (cm⁻¹): 3100~3000, 1688, 1621, 1606, 1593, 1528, 1340, 1071, 1001, 928, 840, 799, 775, 758, 728; ¹H NMR(CDCl₃) δ : 8. 36(d, H-1), 7. 96(t, H-2), 7. 86(t, H-3), 8. 62(d, H-4), 8. 56(d, H-5), 9. 30(d, H-6), 7. 83(d, H-11), 7. 81(d, H-12), 3. 70(s, H-14), ¹³C NMR(CDCl₃): 131. 9(C-1), 131. 6(C-2), 130. 2(C-3), 123. 0(C-4), 121. 9(C-4a), 137. 5(C-4b), 119. 0(C-5), 149. 4(C-6), 146. 5(C-7a), 179. 8(C-8), 118. 9(C-8a), 159. 9(C-9), 145. 2(C-11), 101. 7(C-12), 149. 5(C-12a), 146. 2(C-12b), 117. 5(C-12c), 145. 2(C-13a), 38. 0(C-14); HRFABMS m/z 314. 0948, calcd for $C_{19}H_{12}N_3O_2(M+H)^+$.

【来源】 海绵 *Xestospongia* cf. *carbonaria*

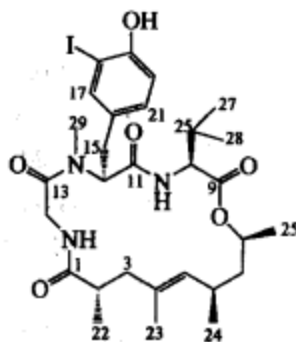
【分析方法】 海绵的甲醇提取物悬浮于水中, 依次用正己烷和氯仿萃取。氯仿层经 Sephadex LH-20 柱层析, 甲醇洗脱, 接下的黄色色带经硅胶柱纯化得到化合物 Neoamphimedine。

【生物活性与毒性】 化合物对正常的 CHO AA8 细胞的细胞毒作用 IC₅₀ 值为 2μg/mL。定量 DNA 裂解试验显示, 与抗肿瘤药物鬼臼亚乙基苷对照, 其促进拓扑异构酶 II 依赖性裂解的能力高出 3%。在相同浓度下, 该化合物能诱导 38% 的细胞裂解。裂解试验展示可能具有新型的刺激拓扑异构酶 II 机理。

【参考文献】 1. de Guzman F S, et al. J Org Chem, 999, 64: 1400

A0155 Neosiphoniamolide A

【结构式】



【分子式】 $C_{29}H_{46}O_6N_3I$

【相对分子质量】 655

【理化常数及谱学数据】 无色无定形固体; $[\alpha] + 5.2^\circ$; FABMS m/z 656 $[M+H]^+$; UV(MeOH) $\lambda_{\max}$ (nm): 219, 284, 292; 1H NMR(500MHz, $CDCl_3$) δ : 7.53(H, d, $J = 2.0$ Hz, H-17), 7.10(H, dd, $J = 8.5$, 2.0Hz, H-21), 6.90(H, d, $J = 8.5$ Hz, H-20), 1.46(H, t, $J = 3.4$ Hz, NH-gly), 6.42(H, d, $J = 8.8$ Hz, NH-val), 5.13(H, dd, $J = 9.8$, 6.4Hz, H-12), 4.99(H, d, $J = 8.5$ Hz, H-5), 4.84(H, sextet, $J = 6.4$ Hz, H-8), 4.33(H, dd, $J = 8.8$, 7.0Hz, H-10), 4.15(H, dd, $J = 18.3$, 4.1Hz, H-14), 3.79(H, dd, $J = 18.3$, 3.4Hz, H-14), 3.25(H, dd, $J = 13.2$, 9.0Hz, H-15), 2.96(3H, s, H-19), 2.80(H, dd, $J = 13.2$, 6.1Hz, H-15), 2.47(H, Mh-2), 2.21(H, m, H-2), 2.10(H, m, H-3), 1.99(H, m, H-26), 1.68(H, m, H-7), 1.56(3H, s, H-23), 1.40(H, m, H-7), 1.25(3H, d, $J = 6.5$ Hz, H-25), 1.17(3H, d, $J = 6.8$ Hz, H-22), 0.90(3H, d, $J = 6.8$ Hz, H-24), 0.79(3H, d, $J = 6.5$ Hz, H-27), 0.75(3H, d, $J = 6.5$ Hz, H-28); ^{13}C NMR(125MHz, $CDCl_3$): 175.9(C-11), 169.7(C-1), 169.5(C-13), 168.5(C-9), 154.0(C-19), 138.6(C-17), 133.2(C-16), 131.6(C-5), 130.9(C-21), 130.5(C-4), 115.2(C-20), 85.5(C-18), 71.5(C-8), 58.4(C-10), 57.8(C-12), 43.3(C-3), 43.3(C-7), 42.0(C-2), 41.9(C-14), 32.7(C-15), 31.5(C-16), 29.7(C-19), 29.1(C-6), 20.8(C-25), 20.5(C-24), 18.8(C-22), 18.1(C-27), 18.1(C-28), 17.8(C-23)。

【来源】 海绵 *Neusiphonia superstes*

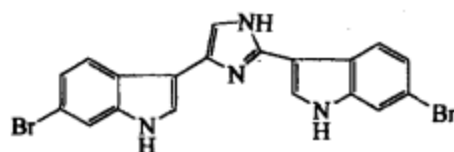
【分析方法】 海绵的二氯甲烷-甲醇提取物上 SiO_2 柱(氯仿-甲醇), 梯度洗脱, 氯仿-甲醇(995:5)的馏分进一步用反相 HPLC(甲醇-水 73:27)纯化得到。结构通过(HR) MS、UV 和 NMR(1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 抑制真菌 *Pericaria oryzae* 和 *Helminthosporium gramineum* 的生长, IC_{90} 都为 5mg/kg。

【参考文献】 1. M. Valeria D'Auria et al. J Nat Prod, 1995, 58 (21): 121

A0156 Nortopsentin A

【结构式】



【分子式】 $C_{19}H_{12}N_4^{79}Br_2$

【相对分子质量】 453

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; UV(MeOH) $\lambda_{\max}$ (nm): 207(50300), 236(42300), 277(26400), 310(sh); IR(KBr) $\nu_{\max}$ (cm^{-1}): 3420, 1615, 1591, 1510, 1448, 1430, 1328, 1248, 1100, 1023, 919, 892, 800, 781, 757; HREIMS m/z : 453.9426(calcd for $C_{19}H_{12}N_4^{79}Br_2$); 1H NMR[360MHz, $(CD_3)_2CO$] δ : 7.53(s, H-5), 11.06(brs, 1'-NH), 7.90(d, $J = 2.1$ Hz, H-2'), 8.47(d, $J = 8.5$ Hz, H-4'), 7.32(dd, $J = 8.5$, 1.8Hz, H-5'), 7.62(d, $J = 1.8$ Hz, H-7'), 10.85(brs, 1''-NH), 7.80(d, $J = 2.3$ Hz, H-2''), 8.00(d, $J = 8.5$ Hz, H-4''), 7.20(dd, $J = 8.5$, 1.8Hz, H-6''), 7.61(d, $J = 1.8$ Hz, H-7''); ^{13}C NMR(90MHz, CD_3CN) δ : 143.8(C-2), 133.3(C-4), 116.1(C-5), 125.0(C-2'), 108.7(C-3'), 125.1(3'a), 123.3(C-5'), 123.8(C-5'), 116.1(C-6'), 115.2(C-7'), 138.3(C-7'a), 123.5(C-2''), 110.7(C-3''), 125.1(C-3''a), 122.3(C-4''), 123.2(C-5''), 115.5(C-6''), 115.2(C-7''), 138.5(C-7''a)。

【来源】 海绵 *Spongosorites ruetzleri*

【分析方法】 甲醇提粗提物用乙酸乙酯萃取得到的活性部位, 经硅胶柱层析分离, 高效液相色谱法(a NH_2 column with $CHCl_3$ -MeOH 5:1) 纯化获得活性成分 Nortopsentin A。

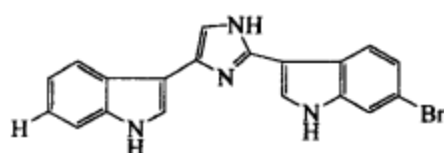
【生物活性与毒性】 抗菌。

【参考文献】 1. Sakemi S, et al. J Org Chem, 1991, 56: 4304

2. Kaswasaki I, et al. J Chem Soc Chem Commun, 1994, 2085
3. Kawaski I, et al. Chem Pharm Bull, 1996, 44: 1831
4. Gu X H, et al. Bioorg Med Chem Lett, 1999, 9: 569
5. Nakamura S, et al. J Chem Soc Perkin Trans 1, 2001, 429
6. Fresneda P M, et al. Synlett, 2001, 2: 218

A0157 Nortopsentin B

【结构式】



【分子式】 $C_{19}H_{13}N_4^{79}Br$

【相对分子质量】 376

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; UV(MeOH) λ_{max} (nm): 206(50700), 232(45200), 278(25600), 310(sh); IR(KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3400, 1620, 1603, 1587, 1562, 1448, 1422, 1364, 1328, 1249, 1238, 1104, 1092, 1024, 927, 920, 894, 811, 762, 743; HREIMS m/z : 376. 0320 (calcd for $C_{19}H_{13}N_4^{79}Br$); 1H NMR [360MHz, $(CD_3)_2CO$] δ : 7.43 (s, H-5), 10.71 (brs, 1'-NH), 7.92 (d, $J = 2.7$ Hz, H-2'), 8.54 (d, $J = 8.5$ Hz, H-4'), 7.29 (dd, $J = 8.5, 1.8$ Hz, H-5'), 7.65 (d, $J = 1.8$ Hz, H-7'), 10.83 (brs, 1''-NH), 7.75 (d, $J = 2.3$ Hz, H-2''), 8.03 (brd, $J = 7.4$ Hz, H-4''), 7.11 (m, H-5''), 7.15 (m, H-6''), 7.44 (dd, $J = 8.7, 1.3$ Hz, H-7''), ^{13}C NMR [90MHz, $(CD_3)_2CO-CD_3OD$] δ : 143.8 (C-2), 132.9 (C-4), 118.0 (C-5), 125.5 (C-2'), 108.9 (C-3'), 125.3 (C-3'a), 123.2 (C-4'), 124.1 (C-5'), 116.4 (C-6'), 115.5 (C-7'), 138.6 (C-7'a), 122.9 (C-2''), 109.8 (C-3''), 126.4 (C-3''a), 120.8 (C-4''), 120.6 (C-5''), 122.8 (C-6''), 112.6 (C-7''), 138.0 (C-7'a).

【来源】 海绵 *Spongisorites ruetzleri*

【分析方法】 甲醇提粗提物用乙酸乙酯萃取得到的活性部位, 经硅胶柱层析分离, 硅胶制备薄层层析 (EtOAc) 纯化, 并用 EtOAc- $CHCl_3$ 重结晶获得活性成分 Nortopsentin B。

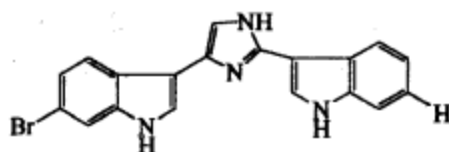
【生物活性与毒性】 抗菌。

【参考文献】 1. Sakemi S, et al. J Org Chem, 1991, 56: 4304

2. Kaswasaki I, et al. J Chem Soc Chem Commun, 1994, 2085
3. Kawaski I, et al. Chem Pharm Bull, 1996, 44: 1831
4. Gu XH, et al. Bioorg Med Chem Lett, 1999, 9: 569
5. Nakamura S, et al. J Chem Soc Perkin Trans 1, 2001, 429
6. Fresneda P.M, et al. Synlett, 2001, 2: 218

A0158 Nortopsentin C

【结构式】



【分子式】 $C_{19}H_{13}N_4^{79}Br$

【相对分子质量】 376

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; UV(MeOH) λ_{max} (nm): 207(50 300), 230(sh), 280(sh), 310(sh); IR(KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3410, 1620, 1598, 1450, 1431, 1411, 1332, 1245, 1128, 1100, 1023, 920, 896, 800,

745; HREIMS m/z : 376.0316 (calcd for $C_{19}H_{13}N_4^+Br$); 1H NMR [360MHz, $(CD_3)_2CO$] δ : 7.43 (s, H-5), 10.60 (brs, $1'-NH$), 7.89 (d, $J = 2.1$ Hz, H-2'), 8.55 (brd, $J = 8.7$ Hz, H-4'), 7.18 (m, H-5'), 7.16 (m, H-6'), 7.45 (d, $J = 8.5, 2.5$ Hz, H-7'), 10.06 (brs, $1''-NH$), 7.76 (d, $J = 2.1$ Hz, H-2''), 8.04 (d, $J = 8.5$ Hz, H-4''), 7.24 (dd, $J = 8.5, 1.7$ Hz, H-5''), 7.62 (d, $J = 1.7$ Hz, H-7''); ^{13}C NMR (90MHz, CD_3OD) δ : 145.0 (C-2), 132.7 (C-4), 117.3 (C-5), 125.0 (C-2'), 108.1 (C-3'), 126.2 (3'a), 121.1 (5'), 123.3 (C-6'), 121.2 (C-6''), 112.5 (C-7'), 137.9 (C-7'a), 123.6 (C-2''), 110.2 (C-3''), 125.4 (C-3'a), 122.0 (C-4''), 123.6 (C-5''), 116.2 (C-6''), 115.3 (C-7''), 138.9 (C-7'a).

【来源】 海绵 *Spongosorites ruetzleri*

【分析方法】 甲醇提粗提物用乙酸乙酯萃取得到的活性部位, 经硅胶柱层析分离, 硅胶制备薄层层析 (EtOAc) 纯化获得活性成分 Nortopsentin C。

【生物活性与毒性】 抗菌。

【参考文献】 1. Sakemi S, et al. J Org Chem, 1991, 56: 4304

2. Kasuwaki I, et al. J Chem Soc Chem Commun, 1994, 2085

3. Kawaski I, et al. Chem Pharm Bull, 1996, 44: 1831

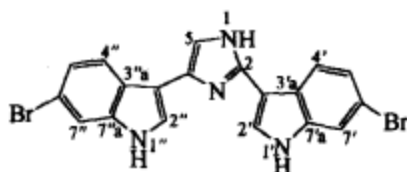
4. Gu XH, et al. Bioorg Med Chem Lett, 1999, 9: 569

5. Nakamura S, et al. J Chem Soc Perkin Trans 1, 2001, 429

6. Fresneda P M, et al. Synlett, 2001, 2: 218

A0159 Nortopsentins A

【结构式】



【分子式】 $C_{17}H_{12}Br_2N_4$

【相对分子质量】 456 ($C_{17}H_{12}Br_2N_4$)

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; HREIMS m/z 453.9426 [$C_{17}H_{12}Br_2N_4$] $^+$; EIMS m/z (rel. int.) 458/456/454 (32/58/29), 377/375 (9/9), 350 (2), 348 (2), 296 (5), 268 (3), 236 (5), 234 (6), 222 (5), 220 (5), 209 (7), 207 (7), 197 (7), 195 (7), 189 (7), 155 (16), 148 (7), 141 (7), 128 (26), 116 (11), 114 (10), 101 (13), 89 (7), 82 (23), 80 (24), 44 (62), 32 (53), 28 (100); IR (KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3420, 1615, 1591, 1510, 1448, 1430, 1328, 1248, 1100, 1023, 919, 892, 800, 781, 757; UV (MeOH) λ_{max} (nm): 207, 236, 277, 310; 1H NMR [360MHz, $(CD_3)_2CO$] δ : 7.53 (H, s, H-5), 11.06 (H, brs, $1'-NH$), 7.90 (H, d, $J = 2.1$ Hz, H-2'), 8.47 (H, d, $J = 8.5$ Hz, H-4'), 7.32 (H, dd, $J = 8.5, 1.8$ Hz, H-5'), 7.62 (H, d, $J = 1.8$ Hz, H-7'), 10.85 (H, brs, $1''-NH$), 7.80 (H, d, $J = 2.3$ Hz, H-2''), 8.00 (H, d, $J = 8.5$ Hz, H-4''), 7.20 (H, dd, $J = 8.5, 1.8$ Hz, H-5''), 7.61 (H, d, $J = 1.8$ Hz, H-7''); ^{13}C NMR [90MHz, $(CD_3)_2CO$]: 143.8 (C-2), 133.3 (C-4), 116.1 (C-5), 125.0 (C-2'), 108.7 (C-3'), 125.1 (C-3'a), 123.3 (C-4'), 123.8 (C-5'), 116.1 (C-6'), 115.2 (C-7'), 138.3 (C-7'a), 123.5 (C-2''), 110.7 (C-3''), 125.1 (C-3'a), 122.3 (C-4''), 123.2 (C-5''), 115.5 (C-6''), 115.2 (C-7''), 138.5 (C-7'a).

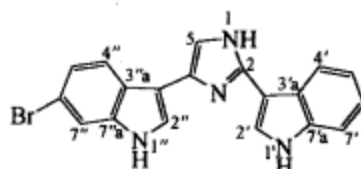
【来源】 加勒比深海海绵 *Spongosorites ruetzleri*

【分析方法】 海绵的甲醇提取物用乙酸乙酯溶解, 乙酸乙酯溶解部分通过反复的硅胶柱层析 (庚烷-乙酸乙酯-甲醇-水), 最后用正相 HPLC (甲醇-氯仿 1:1) 纯化得到纯品。结构通过 (HR) MS、IR、UV 和 NMR (1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 对 P-388 肿瘤细胞抑制作用, $IC_{50} = 7.6 \mu g/mL$, 对真菌 *C. albicans* 的 MIC = $3.1 \mu g/mL$ 。

【参考文献】 1. Sakemi S, et al. J Org Chem, 1991, 56: 4304

2. Kaswasaki I, et al. J Chem Soc Chem Commun, 1994, 2085

A0160 Nortopsentins C**【结构式】****【分子式】** $C_{17}H_{12}BrN_4$ **【相对分子质量】** 376($C_{17}H_{12}BrN_4$)

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; HREIMS m/z 376.0316 [$C_{17}H_{12}BrN_4$]⁺; EIMS m/z (rel. int.) 378/376(96/100), 350(5), 348(5), 297(20), 270(7), 268(7), 242(6), 235(6), 233(5), 209(9), 207(9), 197(7), 195(7), 188(10), 155(45), 148(38), 142(15), 135(15), 128(51), 116(19), 101(35), 89(15), 82(30), 80(31), 58(29), 53(24); FABMS m/z 379/377 [$C_{17}H_{12}BrN_4 + H$]⁺; IR (KBr) ν_{max} (cm⁻¹): 3410, 1620, 1598, 1450, 1431, 1411, 1332, 1245, 1128, 1100, 1028, 920, 896, 800, 745; UV (MeOH) λ_{max} (nm): 207, 230 (sh), 280, 310; ¹H NMR (360MHz, (CD₃)₂CO) δ : 7.43 (H, s, H-5), 10.60 (H, brs, 1'-NH), 7.89 (H, d, J = 2.1Hz, H-2'), 8.55 (H, d, J = 8.7Hz, H-4'), 7.18 (H, m, H-5'), 7.16 (H, m, H-6'), 7.45 (H, dd, J = 8.5, 2.5Hz, H-7'), 10.60 (H, brs, 1''-NH), 7.76 (H, d, J = 2.1Hz, H-2''), 8.04 (H, dd, J = 8.5, 1.7Hz, H-4''), 7.24 (H, dd, J = 8.5, 1.7Hz, H-5''), 7.62 (H, d, J = 1.7Hz, H-7''); ¹³C NMR (90MHz, CD₃OD): 145.0 (C-2), 132.7 (C-4), 117.3 (C-5), 125.0 (C-2'), 108.1 (C-3'), 126.2 (C-3'a), 121.1 (C-4'), 123.3 (C-5'), 121.2 (C-6'), 112.5 (C-7'), 137.9 (C-7'a), 123.6 (C-2''), 110.0 (C-3''), 125.4 (C-3''a), 122.0 (C-4''), 123.6 (C-5''), 116.2 (C-6''), 115.3 (C-7''), 138.9 (C-7''a).

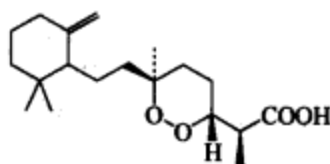
【来源】 加勒比深海海绵 *Spongosorites ruetzleri*

【分析方法】 海绵的甲醇提取物用乙酸乙酯溶解, 乙酸乙酯溶解部分通过反复的硅胶柱层析 (庚烷-乙酸乙酯-甲醇-水), 最后用正相 HPLC (甲醇-氯仿 1:1) 纯化得到纯品。结构通过 (HR) MS、IR、UV 和 NMR (¹H NMR、¹³C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 1. 对 P-388 肿瘤细胞抑制作用, IC_{50} = 1.7 μ g/mL。2. 对真菌 *C. albicans* 的 MIC = 12.5 μ g/mL。

【参考文献】 1. Sakemi S, et al. J Org Chem, 1991, 56: 4304

2. Kaswasaki I, et al. J Chem Soc Chem Commun, 1994, 2085

A0161 Nuapapu B**【结构式】****【分子式】** $C_{20}H_{34}O_4$ **【相对分子质量】** 338

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} + 45.0^\circ$ (c 0.46, CHCl₃); IR (neat) ν_{max} (cm⁻¹): 2934, 1714, 1455, 1374, 1251, 1213, 1010, 886; ¹H NMR (500MHz, CD₃OD) δ : 2.39 (1H, m, H-2), 4.13 (1H, dt, 3.5, 8.5, H-3), 1.19~1.80 (H-4~H-13), 2.02 (2H, m, H-11), 1.09 (3H, d, H-15), 1.04 (3H, s, H-16), 4.76 (1H, d, 2.5, H-17), 4.57 (1H, d, 2.5, H-17), 0.91 (3H, s, H-18), 0.83 (3H, s, H-19); ¹³C NMR (125MHz, CD₃OD) δ : 178.0 (C-1), 44.0 (C-2), 82.8 (C-3), 33.9 (C-4), 33.2 (C-5), 81.2 (C-6), 24.6 (C-7), 20.8 (C-

8), 55.6 (C-9), 150.7 (C-10), 33.5 (C-11), 23.5 (C-12), 37.5 (C-13), 35.7 (C-14), 13.3 (C-15), 24.0 (C-16), 109.5 (C-17), 28.8 (C-18), 27.4 (C-19); LRESIMS, positive ion, m/z $[M + Na]^+$ 307 (100), 213 (53), 167 (55), 139 (97); HRCIMS in methane gas, m/z 313.2372 $[M + C_2H_5]^+$ (calcd for $C_{18}H_{33}O_4$, 313.2379)^[1].

【来源】 海绵 *Diacarnus* cf. *spinopoculum*^[1]

【分析方法】 样品二氯甲烷提取, Sephadex LH-20 (CH_2Cl_2 -MeOH 2:3), HPLC (MeOH- H_2O 8:2) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 细胞毒活性, 抗 NCI-60 细胞 GI_{50} ($\mu\text{mol/L}$) 值分别为: HL-60 (TB) 1.63, MOLT-4 2.16, A549/ATCC 3.05, KM12 4.82, LOX IMVI 0.25, IGROV10.63, 786-0 0.94, BT-549 1.05^[1]。

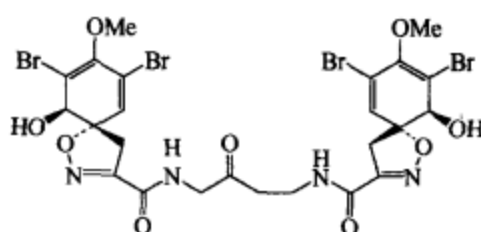
【参考文献】 1. Sperry S, et al. J Nat Prod, 1998, 61: 241

2. Ovenden S P B, et al. J Nat Prod, 1999, 62: 214

3. Sperry S. Diss Abstr Int B, 1999, 4821

A0162 11-Oxoerothionin

【结构式】



【分子式】 $C_{24}H_{24}Br_2^{81}Br_2N_4O_9$

【相对分子质量】 831

【理化常数及谱学数据】 白色粉末; mp 174.6~176.6°C; $[\alpha]_D^{25} + 181.2'$ (c 2.17, DMSO); UV (DMSO) λ_{max} (nm): 284 (11500), 262 (11600); IR (neat) ν_{max} (cm^{-1}): 3600~3000, 1713, 1665, 1558, 1552, 1435, 1293, 1271, 1131, 1100, 1025; HRFABMS m/z : 831.8235, for $C_{24}H_{24}Br_2^{81}Br_2N_4O_9$; ^1H NMR (300MHz, CD_3OD) δ : 3.94 (d, $J = 8.5\text{Hz}$, H-1, 1'), 3.88 (d, $J = 8.5\text{Hz}$, H-1, 1'), 6.60 (s, H-5, 5'), 6.57 (s, H-5, 5'), 3.60 (ABq, $J = 18.2\text{Hz}$, H-7, 7'), 3.19 (ABq, $J = 18.2\text{Hz}$, H-7, 7'), 4.02 (d, $J = 5.7\text{Hz}$, H-10), 2.70 (t, $J = 6.8\text{Hz}$, H-12), 3.34 (m, H-13), 3.63 (s, OMe), 3.60 (s, OMe), 8.66 (t, $J = 5.7\text{Hz}$, 9-NH), 8.48 (t, $J = 5.5\text{Hz}$, 9'-NH), 6.41 (d, $J = 8.5\text{Hz}$, 1, 1'-OH), 6.35 (d, $J = 8.5\text{Hz}$, 1, 1'-OH); ^{13}C NMR (75MHz, DMSO- d_6) δ : 73.6 (d), 120.9 (s), 120.8 (s), 147.1 (s), 147.1 (s), 113.2 (d), 90.5 (s), 90.2 (s), 39.7 (t), 39.5 (t), 154.4 (s), 154.1 (s), 159.1 (s), 158.9 (s), 48.5 (t), 204.4 (s), 38.6 (t), 33.8 (t), 59.63 (q)。

【来源】 海绵 *Aplysina lacunosa*

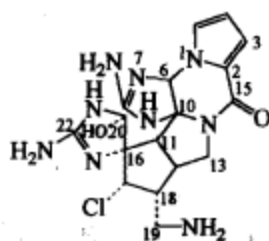
【分析方法】 氯仿-甲醇 (1:1) 粗提物的氯仿可溶部分, 通过硅胶柱层析法分离, 以氨水饱和的氯仿-甲醇梯度洗脱, 在 95:5 的系统中获得活性成分 11-Oxoerothionin。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 HCT-116 的生长。

【参考文献】 1. Acosta A L, et al. J Nat Prod, 1992, 55: 1007

A0163 Palau'amine

【结构式】



【分子式】 $C_{17}H_{22}ClN_9O_2$

【相对分子质量】 419

【理化常数及谱学数据】 无色无定形粉末; $[\alpha] -45.2^\circ (c\ 3.0, \text{MeOH})$; CD 谱: 270nm(正峰, 弱), 230nm(负峰, 肩峰), 208nm(负峰, 强); HRFABMS $m/z\ 420.1669 [M+H]^+$; UV(MeOH) $\lambda_{\max}$: 224nm, 272nm; $^1\text{H NMR}$ (500MHz, D_2O) δ : 6.85(H, dd, $J = 3.9, 1.5\text{Hz}$, H-3), 6.35(H, dd, $J = 3.9, 2.8\text{Hz}$, H-4), 6.99(H, dd, $J = 2.8, 1.5\text{Hz}$, H-5), 6.33(H, s, H-6), 3.08(H, d, $J = 14.1\text{Hz}$, H-11), 2.52(H, m, H-12), 3.96(H, dd, $J = 7.3, 10.4\text{Hz}$, H-13a), 3.28(H, dd, $J = 10.3, 10.4\text{Hz}$, H-13b), 4.35(H, d, $J = 7.9\text{Hz}$, H-17), 2.47(H, m, H-18), 3.32, 3.24(H, dd, $J = 13.2, 7.0\text{Hz}$, H-19), 5.96(H, s, H-20); $^{13}\text{C NMR}$ (125MHz, D_2O): 122.5(C-2), 115.6(C-3), 113.8(C-4), 125.2(C-5), 69.0(C-6), 159.5(C-8), 80.8(C-10), 56.3(C-11), 41.8(C-12), 46.1(C-13), 157.8(C-15), 72.1(C-16), 74.0(C-17), 48.6(C-18), 41.9(C-19), 83.7(C-20), 157.9(C-22)。

【来源】 西卡洛里岛海绵 *Stylotella agminata*

【分析方法】 海绵的甲醇提取物上离子交换树脂柱(氯化钠-水溶液梯度洗脱), 再经 Sephadex LH-20(甲醇)和反相 HPLC(乙腈-水 1:9, 0.1%TFA)纯化得到。结构通过(HR)MS、UV、CD和NMR($^1\text{H NMR}$ 、 $^{13}\text{C NMR}$ 和2D-NMR)等方法确定。

【生物活性与毒性】 1. 对各种肿瘤细胞的毒性(LC_{50}): P-388(0.1 $\mu\text{g/mL}$), A549(0.2 $\mu\text{g/mL}$), HT-29(2 $\mu\text{g/mL}$), KB(10 $\mu\text{g/mL}$)。可见对 P-388 和 A549 有选择性。2. 抗菌活性: 对 *Staphylococcus aureus* 和 *Bacillus subtilis* 在 10 $\mu\text{g/mL}$ 时有活性。3. 抗真菌活性: 50 $\mu\text{g/disk}$ 时能形成 24mm 的抗真菌 *Penicillium notatum* 环。4. 免疫抑制作用: MLR 实验中, $\text{LC}_{50} < 18\text{ng/mL}$ 。

【参考文献】 1. Kinnel R B, et al. J Am Chem Soc, 1993, 115: 3376

2. Overman L E, et al. J Am Chem Soc, 1997, 119: 7159

3. Gribble G W. Acc Chem Res, 1998, 31: 141

4. Kinnel R B, et al. J Org Chem, 1998, 63: 3281

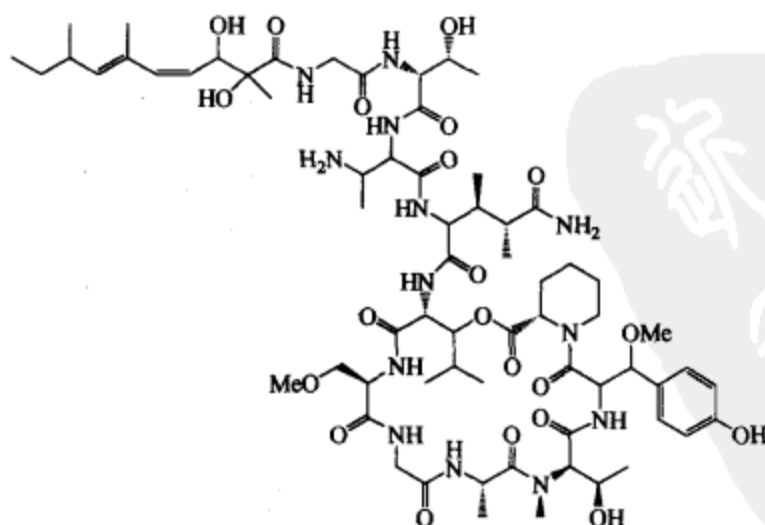
5. Kig G, et al. Pharm Ztg, 1998, 143: 4153

6. Mourabit A, et al. Eur J Org Chem, 2001, 237

7. Hoffmann H, et al. Synthesis, 2003, 1753

A0164 Papuamide A

【结构式】



【分子式】 $C_{66}H_{105}N_{13}O_{21}$

【相对分子质量】 1415

【理化常数及谱学数据】 不定形粉末; $[\alpha]^{25} + 12.0^\circ (c\ 3.47, \text{MeOH})$; UV(OH) $\nu_{\max}$ (nm): 227, 274; IR (KBr) $\lambda_{\max}$ (cm^{-1}): 3360, 2930, 1748, 1652, 1456, 1203; HRFABMS $m/z\ 1548.6549 (M+Cs)^+$, calculated

1548.6602 for $C_{66}H_{105}N_{13}O_{21}Cs$.

【来源】 海绵 *Theonella mirabilis*

【分析方法】 海绵样品以水提取, 冷冻干燥, 然后再以甲醇: 二氯甲烷 (1:1) 提取。含水提取物经快速 C4 柱层析, 含水甲醇梯度洗脱。H₂O-MeOH (2:1) 洗脱部分经 Sephadex LH-20 柱, MeOH-H₂O (7:3) 洗脱得到含肽丰富的部分。最后使用 C18 HPLC 纯化, 乙腈/水洗脱 (0.05% 三氟醋酸) 得到化合物 Papuamide A。

【生物活性与毒性】 化合物能在体外抑制 HIV-1_{RF} 引起的人 T-lymphoblastoid 细胞感染, 其 EC₅₀ 值为 4ng/mL。此外, 对一系列的人肿瘤细胞系细胞毒作用的平均 IC₅₀ 值为 75ng/mL。

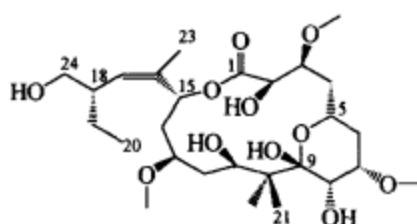
【参考文献】 1. Ford P W, et al. J Am Chem Soc, 1999, 121: 5899

2. Okamoto N, et al. Tetrahedron: Asymmetry, 2001, 12: 1353

3. Matsunaga S, et al. Curr Org Chem, 2003, 7: 945

A0165 Peloruside A

【结构式】



【分子式】 $C_{27}H_{48}O_{11}$

【相对分子质量】 548

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]^{25}_D + 16^\circ$ (c 0.30 CH₂Cl₂); IR (KBr) $\lambda_{\max}$ (cm⁻¹): 3336, 2919, 2849, 1738, 1667, 1462, 1385, 1225, 1155, 1082; ¹H NMR (CDCl₃) δ : 4.53 (s, H-2), 4.22 (dd, J = 10.5, 5.5, H-3), 4.25 (tdd, J = 11, 4.5, 2.5, H-5), 1.53 (q, J = 12, H-6a), 1.78 (ddd, J = 12.5, 5.5, 2.5, H-6b), 3.82 (ddd, J = 11.5, 5.5, 3, H-7), 4.02 (d, J = 3, H-8), 4.89 (br d, J = 10, H-11), 1.40 (d, J = 14.5, H-12a), 2.07 (ddd, J = 15, 11.5, 4.5, H-12b), 3.99 (br d, J = 9.5, H-13), 2.02 (ddd, J = 15.5, 11.5, 1, H-14a), 2.15 (ddd, J = 15.5, 10, 1.5, H-14b), 5.68 (d, J = 10.5, H-15), 5.05 (d, J = 10, H-17), 0.85 (t, J = 7.5, H-20), 1.08 (s, H-21), 1.12 (s, H-22), 1.67 (d, J = 1, H-23), 3.36 (t, J = 10.5, H-24a), 3.64 (dd, J = 10.5, 4, H-24b), 3.31 (s, 3-OCH₃), 3.38 (s, 7-OCH₃), 3.48 (s, 13-OCH₃), 6.75 (s, 2-OH); ¹³C NMR (CDCl₃) δ : 174.0 (C-1), 70.3 (C-2), 78.3 (C-3), 32.6 (C-4), 63.5 (C-5), 31.7 (C-6), 75.9 (C-7), 66.8 (C-8), 101.9 (C-9), 43.6 (C-10), 73.9 (C-11), 33.9 (C-12), 77.9 (C-13), 35.7 (C-14), 70.9 (C-15), 136.1 (C-16), 131.1 (C-17), 43.3 (C-18), 24.6 (C-19), 12.2 (C-20), 15.8 (C-21), 20.8 (C-22), 17.5 (C-23), 66.9 (C-24), 56.1 (3-OCH₃), 55.7 (7-OCH₃), 59.1 (13-OCH₃); HRFABMS m/z 571.30826 (calcd for $C_{27}H_{48}O_{11}$ (M+Na)⁺, 571.30946).

【来源】 海绵 *Mycale* sp.

【分析方法】 海绵的甲醇提取物首先经过填充有聚苯乙烯-二乙烯苯 Diaion HP20 颗粒的玻璃柱, 用甲醇预平衡。洗脱组分再经过同样的柱子, 用水冲洗。柱子依次由 20% acetone/water、55% acetone/water、55% acetone/0.2mol/L NH₄OH、55% acetone/0.2mol/L NH₄OH 洗脱。第二部分用水稀释, 加入到预先用水平衡的 HP20 柱上, 丙酮洗脱。洗脱组分经 TosoHass Amberchrom 柱分离, 32%~34% acetone/water 洗脱部分得到化合物 Peloruside A。

【生物活性与毒性】 体外抗 P388 大鼠白血病细胞系的 IC₅₀ 值为 10ng/mL。

【参考文献】 1. West L M, et al. J Org Chem, 2000, 65: 445

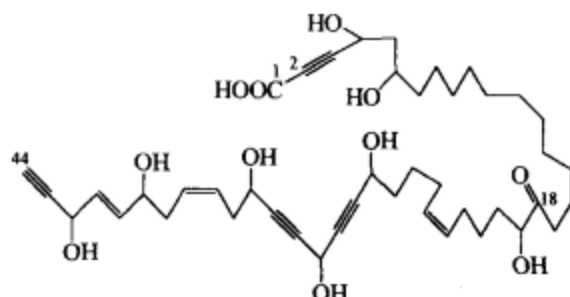
2. West L M, et al. PCT Int Appl, 2000, 1

3. Hood K A, et al. Anti-Cancer Drug Des, 2001, 16: 155

4. Hood K A, et al. Cancer Res, 2002, 62: 3356

5. Ghosh A K, et al. Tetrahedron Lett, 2003, 44: 3967

6. Liao X, et al. Angew Chem Int Ed Eng, 2003, 42: 1648

A0166 Petrosolic acid**【结构式】****【分子式】** $C_{44}H_{64}O_{11}$ **【相对分子质量】** 768

【理化常数及谱学数据】 无定形粉末; $[\alpha] + 7^\circ (c\ 2.9, \text{MeOH})$; IR(neat) $\nu_{\max} (\text{cm}^{-1})$: 3450, 3300, 2250, 2100, 1705; 元素分析: C 68.9%, H 8.65%, $C_{44}H_{64}O_{11}$ (C 68.71%, H 8.39%) DCIMS, m/z (%) 751.6 $[M - H_2O]^+$ (46), 733.6 $[M - 2H_2O]^+$ (46), 639.5 (30), 621.6 (31), 457.4 (54), 413.3 (100); ^1H NMR (500MHz, CDCl_3 -MeOD 1:4) δ : 4.50 (H, dd, $J = 3.5, 9.1\text{Hz}$, H-4), 1.73, 1.61 (2H, m, H-5), 3.72 (H, m, H-6), 3.97 (H, dd, $J = 4.1, 8.0\text{Hz}$, H-19), 5.28 (H, m, H-23), 5.28 (H, m, H-24), 4.24 (H, dt, $J = 5.1, 1.5\text{Hz}$, H-28), 5.08 (H, t, $J = 1.5\text{Hz}$, H-31), 4.26 (H, dt, $J = 5.3, 5.3\text{Hz}$, H-34), 5.50 (H, m, H-36), 5.50 (H, m, H-37), 4.06 (H, m, H-39), 5.82 (H, ddd, $J = 5.8, 15.3, 1.1\text{Hz}$, H-40), 5.68 (H, ddd, $J = 5.7, 15.3, 1.1\text{Hz}$, H-41), 4.74 (H, m, H-42), 2.82 (H, d, $J = 2.2\text{Hz}$, H-44); ^{13}C NMR (125MHz, CDCl_3 -MeOD 1:4): 158.6 (C-1), 79.3 (C-2), 80.9 (C-3), 57.1 (C-4), 43.4 (C-5), 65.9 (C-6), 213.0 (C-18), 75.5 (C-19), 128.2 (C-23), 128.2 (C-24), 60.1 (C-28), 83.1 (C-29), 80.6 (C-30), 49.9 (C-31), 83.5 (C-32), 80.5 (C-33), 60.1 (C-34), 126.8 (C-36), 125.1 (C-37), 69.8 (C-39), 133.6 (C-40), 128.6 (C-41), 60.1 (C-42), 80.2 (C-43), 72.4 (C-44).

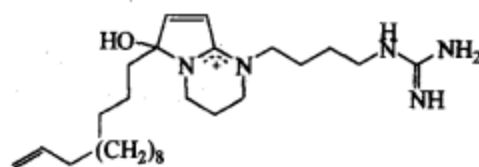
【来源】 红海海绵 *Petrosia* sp.

【分析方法】 海绵的氯仿-甲醇 (4:1) 提取物的氯仿萃取层经过 Sephadex LH-20 (甲醇:氯仿 1:1) 纯化得到。结构通过 MS、IR、元素分析和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 对 HIV-1 逆转录酶的 RDDP、DDDP 和 RNase H 的 IC_{50} 分别为 $(1.2 \pm 0.3) \mu\text{mol/L}$ 、 $(6.2 \pm 0.2) \mu\text{mol/L}$ 、 $(39.5 \pm 4.5) \mu\text{mol/L}$ 。

【参考文献】 1. Isaacs S, et al. Tetrahedron, 1993, 49 (45): 10435

2. Matthee G, et al. Planta Med, 1999, 65: 1648

A0167 Phloeodictine A**【结构式】****【分子式】** $C_{26}H_{48}N_5O$ **【相对分子质量】** 446

【理化常数及谱学数据】 无色无定形固体; CD (MeOH) λ : 215 (nm); UV (MeOH) $\lambda_{\max}$ (nm): 224 (6700), 274 (2200); FTIR (film) $\nu_{\max} (\text{cm}^{-1})$: 3440~3080, 2930, 2850, 1665, 1590; FABMS m/z : 446 (M^+ , 45.6), 333 ($M^+ - C_5H_{11}N_3$, 14.2), 114 (100); HRFABMS m/z : 446.3891 ($C_{26}H_{48}N_5O$ requires 446.3858),

333.1965 ($C_{22}H_{25}N_2O$ requires 333.1966), 114.1038 ($C_5H_{12}N_3$ requires 114.1031); 1H NMR (400MHz, CD_3OH) δ : 3.52(m, H-2a), 3.50(H-2b), 2.17(m, H-3a), 2.00(m, H-3b), 3.50(m, H-4a), 3.34(H-3b), 7.30(d, $J = 6.5$ Hz, H-7), 7.05(d, $J = 6.5$ Hz, H-8), 3.57(m, H-9a), 3.48(m, H-9b), 1.76(m, H-10), 1.65(m, H-11), 3.25(m, H-12), 2.00(m, H-14a), 1.76(m, H-14b), 1.14(m, H-15), 1.25-1.35(brs, H-16~24), 2.00(m, H-25), 5.80(ddt, $J = 10.0, 17.0, 7.0$ Hz, H-26), 5.01(dd, $J = 2.0, 17.0$ Hz, H-27a), 4.92(dd, $J = 2.0, 10.0$ Hz, H-27b), 6.95(s, OH), 6.90-7.70(brs, NH_2), 8.20(brs, NH); ^{13}C NMR (62.5MHz, CD_3OH) δ : 46.7(t, C-2), 20.1(t, C-3), 37.0(t, C-4), 98.5(s, C-6), 153.1(d, C-7), 121.0(d, C-8), 53.3(t, C-9), 26.2(t, C-10), 26.1(t, C-11), 42.0(t, C-12), 158.0(s, C-13), 36.0(s, C-14), 24.8(t, C-15), 30.1-30.9(t, C-16~24), 34.9(t, C-25), 139.9(d, C-26), 115.4(t, C-27)。

【来源】 海绵 *Phloeodictyon* sp.

【分析方法】 提取物用水-甲醇系统经 Amberlite XAD-7 洗脱, 得到的活性部位通过反相中压柱层析和制备型反相高压液相色谱法 (水-甲醇系统) 获得 Phloeodictine A。

【生物活性与毒性】 抗菌, 抑制肿瘤细胞 KB 的生长。

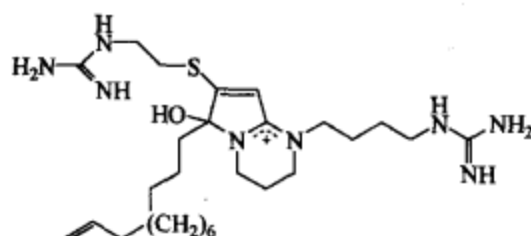
【参考文献】 1. Kourany-Lefoll E, et al. J Org Chem, 1992, 57: 3832

2. Kourany-Lefoll E, et al. Tetrahedron, 1994, 50: 3415

3. Neubert B J, et al. Org Lett, 2003, 5: 765

A0168 Phloeodictine B

【结构式】



【分子式】 $C_{27}H_{51}N_8OS$

【相对分子质量】 535

【理化常数及谱学数据】 无色无定形固体; CD(MeOH) λ : 220nm; UV(MeOH) λ_{max} (nm): 279(7100), 202(5500); FTIR(film) ν_{max} (cm^{-1}): 3440~3080, 3020, 2930, 1665; FABMS m/z : 535 (M^+ , 9), 114 (70); HRFABMS m/z : 535.3900 ($C_{27}H_{51}N_8OS$ requires 535.3906), 114.1060 ($C_5H_{12}N_3$ requires 114.1031); 1H NMR (400MHz, CD_3OH) δ : 3.60(m, H-2), 2.20(m, H-3a), 2.05(m, H-3b), 3.58(m, H-4a), 3.34(H-3b), 6.95(s, H-8), 3.75(m, H-9), 1.83(m, H-10), 1.68(m, H-11), 3.25(m, H-12), 2.05(m, H-14a), 1.83(m, H-14b), 1.14(m, H-15), 1.25-1.35(brs, H-16~22), 2.05(m, H-23), 5.80(ddt, $J = 10.0, 17.0, 7.0$ Hz, H-24), 5.01(dd, $J = 2.0, 17.0$ Hz, H-25a), 4.92(dd, $J = 2.0, 10.0$ Hz, H-25b), 3.40(m, H-26), 3.60(m, H-27), 7.13(s, OH), 6.70~7.70(brs, NH_2), 8.25(brs, NH); ^{13}C NMR (62.5MHz, CD_3OH) δ : 46.6(t, C-2), 20.6(t, C-3), 37.3(t, C-4), 98.8(s, C-6), 169.8(d, C-7), 108.6(d, C-8), 159.8(s, C-8a), 53.1(t, C-9), 26.6(t, C-10), 26.2(t, C-11), 42.2(t, C-12), 158.6(s, C-13), 36.4(t, C-14), 23.6(t, C-15), 30.1-30.6(t, C-16~22), 34.8(t, C-23), 140.1(d, C-26), 114.7(t, C-25), 31.7(t, C-26), 40.9(t, C-27), 158.6(s, C-28)。

【来源】 海绵 *Phloeodictyon* sp.

【分析方法】 提取物用水-甲醇系统经 Amberlite XAD-7 洗脱, 得到的活性部位通过反相中压柱层析和制备型反相高压液相色谱法 (水-甲醇系统) 获得 Phloeodictine B。

【生物活性与毒性】 抗菌, 抑制肿瘤细胞 KB 的生长。

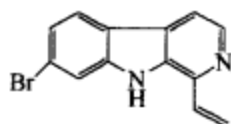
【参考文献】 1. Kourany-Lefoll E, et al. J Org Chem, 1992, 57: 3832

2. Kourany-Lefoll E, et al. Tetrahedron, 1994, 50: 3415

3. Neubert B J, et al. Org Lett, 2003, 5: 765

A0169 Plakortamine B

【结构式】



【分子式】 $C_{13}H_9BrN_2$

【相对分子质量】 273

【理化常数及谱学数据】 黄色油状液体; UV (MeOH) 214nm; IR (film) (cm^{-1}): 3200 (br), 1620, 1560, 1235; 1H NMR: ($CDCl_3$, 300MHz) δ : 8.61 (brs, 1H, —NH), 8.48 (d, 1H, $J = 5.5$ Hz, H-3), 7.97 (d, 1H, $J = 8$ Hz, H-5), 7.84 (d, 1H, $J = 5.5$ Hz, H-4), 7.69 (d, 1H, $J = 1.5$ Hz, H-8), 7.41 (dd, 1H, $J = 8, 1.5$ Hz, H-6), 7.18 (dd, 1H, $J = 17, 11$ Hz, H-10), 6.40 (d, 1H, $J = 17$ Hz, H-11), 5.72 (d, 1H, $J = 11$ Hz, H-11); ^{13}C NMR: (MeOH- d_4 , 400MHz) δ : 143.2 (C-8a), 141.0 (C-1), 139.0 (C-3), 135.1 (C-9a), 132.8 (C-10), 130.6 (C-4a), 124.1 (C-5), 123.9 (C-6), 123.0 (C-7), 121.3 (C-4b), 119.9 (C-11), 115.7 (C-8), 115.1 (C-4); HRE-IMS $[M+H]^+$ m/z 275.0008 (calcd for $C_{13}H_{10}^{81}BrN_2$, 275.0007)。

【来源】 海绵 *Plakortis nigra*

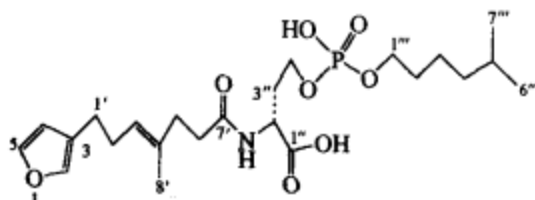
【分析方法】 甲醇提取液用乙酸乙酯和水分配, 含水层用稀 NaOH 溶液稀释至 pH 等于 10, 然后用乙酸乙酯萃取, 萃取物上 Sephadex LH-20, 以甲醇为洗脱液, 得到化合物 Plakortamine B。

【生物活性与毒性】 抗人结肠肿瘤细胞系 HCT-116 的 IC_{50} 值为 $0.62 \mu mol/L$ 。

【参考文献】 1. Sandler J S, et al. J Nat Prod, 2002, 65: 1258

A0170 Pokepola ester

【结构式】



【分子式】 $C_{23}H_{38}NO_8P$

【相对分子质量】 487

【理化常数及谱学数据】 HRFABMS m/z 510.2120 $[M+Na]^+$; 1H NMR (500MHz, CD_3OD) δ : 7.24 (H, s, H-2), 6.29 (H, s, H-4), 7.35 (H, s, H-5), 2.43 (2H, brt, $J = 7.0$ Hz, H-1'), 2.23 (2H, brt, $J = 7.4$ Hz, H-2'), 5.23 (H, dt, $J = 6.8, 1.1$ Hz, H-3'), 2.29 (2H, m, H-5'), 2.33 (2H, m, H-6'), 1.61 (3H, s, H-8'), 4.35 (H, t, $J = 6.2$ Hz, H-2''), 2.01 (2H, m, H-3''), 4.02, 3.90 (2H, m, H-4''), 3.85 (2H, m, H-1'''), 1.55 (2H, m, H-2'''), 1.38 (2H, m, H-3'''), 1.19 (2H, m, H-4'''), 1.52 (H, m, H-5'''), 0.87 (6H, d, $J = 6.8$ Hz, H-6''', H-7'''); ^{13}C NMR (125MHz, CD_3OD): 140.1 (C-2), 126.1 (C-3), 112.0 (C-4), 143.8 (C-5), 25.8 (C-1'), 29.6 (C-2'), 125.7 (C-3'), 135.6 (C-4'), 36.6 (C-5'), 36.0 (C-6'), 175.6 (C-7'), 16.1 (C-8'), 179.0 (C-1''), 53.5 (C-2''), 34.5 (C-3''), 63.0 (C-4''), 66.7 (C-1'''), 32.0 (C-2'''), 24.7 (C-3'''), 39.8 (C-4'''), 29.1 (C-5'''), 23.0 (C-6'''), 23.0 (C-7''')。

【来源】 海绵 *Spongia oceania*

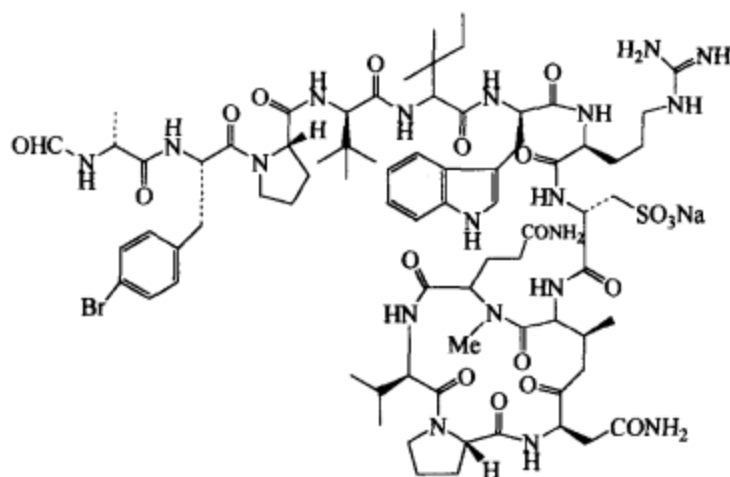
【分析方法】 海绵的乙醇提取物在水和正丁醇间分配, 正丁醇层再溶于甲醇-水中, 用正己烷萃取, 甲醇-水层上 HSCCC (氯仿-甲醇-水) 分段, 馏分经过 Sephadex LH-20 (甲醇) 和反相 HPLC (乙腈-水 35:65) 分离得到纯品。结构通过 (HR) MS 和 NMR (1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 在 $0.2\mu\text{g/mL}$ 浓度下显示抗 HIV 的活性, 未见任何的细胞毒活性。

【参考文献】 1. Raju S Kalidindi, et al. Tetrahedron Lett, 1994, 35 (31): 5579

A0171 Polydiscamide A

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{75}\text{H}_{109}\text{BrN}_{19}\text{O}_{19}\text{SNa}$

【相对分子质量】 1731

【理化常数及谱学数据】 白色粉末; mp $212\sim 216^\circ\text{C}$; $[\alpha]_{\text{D}}^{24} -1.1^\circ$ (c 1.89, MeOH); UV λ_{max} (nm): 214 (11900), 272 (5300), 280 (5400), 288 (4600); IR (KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3300 (br), 1754 (sh), 1704 (sh), 1614 (br); LRFABMS m/z : 1733 (17.1), 1731 (16.7), 1071 (6.7), 1047 (4.8); ^1H NMR (DMSO- d_6) δ : Ala 4.31 (m, H- α), 0.94 (d, $J = 7.0\text{Hz}$, H- β), 7.90 (s, NCHO), 8.12 (d, $J = 7.8\text{Hz}$, NH), BrPhe 4.70 (ddd, $J = 10.5, 8.5, 2.3\text{Hz}$, H- α), 2.70 (dd, $J = 13.8, 10.5\text{Hz}$, H- β), 2.97 (dd, $J = 13.8, 2.3\text{Hz}$, H- β), 7.21 (d, $J = 8.3\text{Hz}$, 2H-5,9), 7.39 (d, $J = 8.3\text{Hz}$, 2H-6,8), 8.33 (d, $J = 8.5\text{Hz}$, NH), Pro I 4.54 (H- α), 2.12 (m, H- β), 1.89 (m, H- β), 1.88 (m, H- γ), 3.62 (m, 2H- δ), t-Leu 4.51 (d, $J = 10.0\text{Hz}$), 0.89 (s, 9H- γ), 7.70 (d, $J = 10.0\text{Hz}$, NH), 3-Melle 4.13 (d, $J = 7.5\text{Hz}$, H- α), 1.06 (m, H- γ), 0.62 (t, $J = 7.2\text{Hz}$, H- δ), 0.62 (s, H- γ'), 0.73 (s, H- γ''), 7.81 (d, $J = 7.5\text{Hz}$, NH), Trp 4.61 (m, H- α), 3.16 (dd, $J = 5.0, 14.0\text{Hz}$, H- β), 2.92 (m, H- β), 7.31 (s, H-5), 7.56 (d, $J = 7.8\text{Hz}$, H-8), 6.94 (t, $J = 7.4\text{Hz}$, H-9), 7.02 (t, $J = 7.4\text{Hz}$, H-10), 7.31 (d, $J = 8.1\text{Hz}$, H-11), 8.17 (d, $J = 7.3\text{Hz}$, NH), 10.63 (brs, NH-aromatic), Arg 4.31 (m, H- α), 1.61 (brm, H- β), 1.32 (brm, H- γ), 2.99 (m, H- δ), 8.00 (d, $J = 7.3\text{Hz}$, NH), cysteic acid 4.63 (m, H- α), 2.95 (m, H- β), 8.21 (d, $J = 7.4\text{Hz}$, NH), Thr 4.91 (brd, $J = 10.5\text{Hz}$, H- α), 5.10 (m, H- β), 1.17 (d, $J = 6.3\text{Hz}$), 7.91 (d, $J = 8.2\text{Hz}$, NH), NmeGln 5.10 (m, H- α), 1.99 (m, H- β), 1.89 (m, H- β), 1.8-2.2 (H- γ), 3.02 (s, NMe), Val 4.38 (t, $J = 7.8\text{Hz}$, H- α), 1.94 (m, H- β), 0.85 (d, $J = 6.8\text{Hz}$, H- γ), 0.82 (d, $J = 6.6\text{Hz}$, H- δ), 7.67 (d, $J = 7.5\text{Hz}$, NH), Pro II 4.20 (brd, $J = 7.2\text{Hz}$, H- α), 2.00 (m, H- β), 1.92 (m, H- β), 2.00 (m, H- γ), 1.92 (m, H- γ), 3.88 (m, H- δ), 3.52 (m, H- δ), Asn 4.55 (m, H- α), 2.46 (brd, $J = 16.1\text{Hz}$, H- β), 2.83 (dd, $J = 7.6, 16.1\text{Hz}$, H- β), 7.28 (d, $J = 7.6\text{Hz}$, NH); ^{13}C NMR (DMSO- d_6) δ : Ala 46.5 (d, C- α), 18.5 (q, C- β), 160.6 (d, NCHO), BrPhe 51.5 (d, C- α), 36.3 (t, C- β), 136.2 (s, C-4), 131.7 (d, C-5,9), 130.8 (d, C-6,8), 119.5 (C-7), Pro I 60.6 (d, C- α), 29.5 (t, C- β), 24.2 (t, C- γ), 47.0 (t, C- δ), t-Leu 59.5 (d, C- α), 35.1 (s, C- β), 26.7 (q, C- γ), 3-Melle 59.8 (d, C- α), 35.9 (s, C- β), 31.1 (t, C- γ), 7.9 (q, C- δ), 22.7 (q, C- γ'), 23.0 (q, C- γ''), Trp 53.7 (d, C- α), 27.6 (t, C- β), 109.9 (s, C-4), 124.0 (d, C-5), 137.0 (s, C-6), 127.1 (s, C-7), 118.3 (d, C-9), 118.1 (d, C-9), 120.8 (d, C-10), 111.2 (d, C-11), Arg 52.2 (d, C- α), 28.8 (t, C- β), 23.6 (t, γ), 40.3 (t, C- δ), 156.8 (s, guan), cysteic acid 50.8 (d, C- α), 52.2 (t, C- β), Thr 51.9 (d, C- α), 69.9 (d, C- β), 15.9 (q, C- γ), NmeGln 54.9 (d, C- α), 23.6 (t, C- β), 31.7 (t, C- γ), 30.4 (q, NMe), Val 55.2 (d, C- α), 30.0 (d, C- β), 19.2 (q, C- γ), 17.9 (q, C- δ), Pro II 59.9 (d, C- α), 29.7 (t, C- β), 24.2 (t, C- γ), 46.8 (t, C- δ), Asn

48.3(d, C- α), 35.1(t, C- β)。

【来源】 海绵 *Discodermia* sp.

【分析方法】 粗提物经反相柱色谱法和反相高效液相色谱法 (80% MeOH-H₂O) 分离, 纯化获得活性成分 Polydiscamide A。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 A549 的生长。

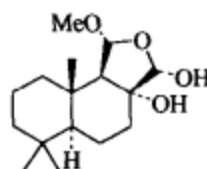
【参考文献】 1. Gulavita N K, et al. *J Org Chem*, 1992, 57: 1767

2. Gulavita N K, et al. US Pat Appl, 1994. CA121: 187289 US 5336757 A 940809

3. Gulavita N K, et al. *J Nat Toxins*, 1996, 5: 225

A0172 Polygodial 8

【结构式】



【分子式】 C₁₆H₂₈O₄

【相对分子质量】 284

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} + 2.8^\circ$ (c 0.2, MeOH); IR (KBr) $\nu_{\max}$ (cm⁻¹): 3450 (broad, —OH), 2930, 2870, 1455, 1380, 1100, 1020; ¹H NMR (500MHz, CDCl₃) δ : 5.12 (1H, brs, H-12), 4.66 (1H, brs, H-11), 3.36 (3H, s, MeO), 2.00 (1H, ddd, 13.7, 2.4, 3.9, H-7e), 1.80 (1H, brs, H-9), 1.51 (1H, ddd, 13.7, 13.7, 5.9, H-7a), 1.42 (1H, m, H-3e), 1.42 (1H, m, H-2e), 1.21 (1H, m, H-6a), 1.17 (1H, m, H-3a), 1.09 (1H, ddd, 13.2, 13.2, 3.4, H-1a), 0.96 (1H, dd, 12.2, 2.0, H-5), 0.89 (3H, s, H-15), 0.87 (3H, s, H-13), 0.80 (3H, s, H-14); ¹³C NMR (125.5MHz, CDCl₃) δ : 41.3 (C-1), 18.4 (C-2), 41.7 (C-3), 32.9 (C-4), 52.2 (C-5), 18.7 (C-6), 30.9 (C-7), 76.9 (C-8), 65.1 (C-9), 35.0 (C-10), 105.4 (C-11), 102.2 (C-12), 15.3 (C-13), 21.9 (C-14), 33.5 (C-15), 54.3 (MeO); HRCIMS (M + NH₄ - H₂O)⁺ m/z 284.2217 (calcd for C₁₆H₃₀NO₃, 284.2225)^[1]。

【来源】 海绵 *Dysidea* sp.^[1]

【分析方法】 样品 CH₂Cl₂、MeOH 提取, 提取物合并, 硅胶柱层析 (梯度 hexane-EtOAc), 正相 HPLC (hexane-EtOAc), 反相 HPLC (CH₃CN) 得纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 具有中等强度的抗菌和酶抑制活性 (Na⁺/K⁺-ATPase and PLA2)^[1]。

【参考文献】 1. Paul V J, et al. *J Nat Prod*, 1997, 60: 1115

2. Schulte G R, et al. *Tetrahedron*, 1982, 38: 1857

3. McCallion R F, et al. *Planta Med*, 1982, 44: 134

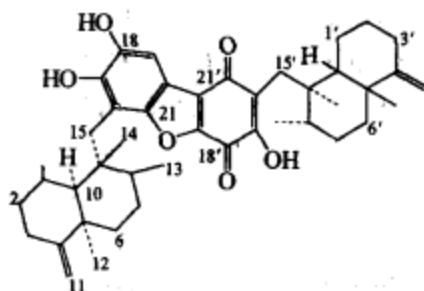
4. Cimino G, et al. *Chemoecology*, 1998, 8: 51

5. Ban T, et al. *Biosci Biotechnol Biochem*, 2000, 64: 2699

6. Gavagnin M, et al. *Tetrahedron*, 2001, 57: 8913

A0173 Popolohuanone E

【结构式】



【分子式】 $C_{42}H_{54}O_6$

【相对分子质量】 654

【理化常数及谱学数据】 紫黑色固体; HRFABMS m/z 655. 4008 $[M+H]^+$; IR(neat) $\nu_{\max}$ (cm^{-1}): 3520, 3360, 2940, 1665, 1660, 1635, 1605, 1570, 1460, 1330, 1280, 1070, 995, 760; UV(MeOH) $\lambda_{\max}$ (nm): 220, 254, 284, 364, 530; 1H NMR (500MHz, CD_2Cl_2) δ : 2. 31, 2. 02 (2H, m, H-1), 1. 60~1. 90 (2H, m, H-2), 2. 44, 2. 12 (2H, m, H-3), 1. 13, 2. 00 (2H, m, H-6), 1. 51, 1. 21 (2H, m, H-7), 1. 33 (H, m, H-3), 1. 40 (H, brd, $J=6.5$ Hz, H-10), 4. 70, 4. 68 (2H, s, H-11), 1. 06 (3H, s, H-12), 1. 07 (3H, brd, $J=5.4$ Hz, H-13), 1. 00 (3H, s, H-14), 2. 92, 3. 04 (2H, m, H-1'), 1. 60~1. 90 (2H, m, H-2'), 2. 47, 2. 12 (2H, m, H-3'), 2. 00, 0. 94 (2H, m, H-6'), 1. 53, 1. 21 (2H, m, H-7'), 1. 33 (H, m, H-8'), 1. 37 (H, brd, $J=6.5$ Hz, H-10'), 4. 72, 4. 68 (2H, brs, H-11'), 0. 99 (3H, s, H-12'), 0. 95 (3H, d, $J=6.5$ Hz, H-13'), 0. 92 (3H, s, H-14'), 2. 62, 2. 54 (2H, d, $J=14.1$ Hz, H-15'); ^{13}C NMR (CD_2Cl_2): 23. 1 (C-1, C-1'), 25. 4 和 25. 5 (C-2, C-2'), 32. 3 (C-3, C-3'), 154. 0 (C-4, C-4'), 39. 8 和 39. 9 (C-5, C-5'), 38. 0 (C-6), 38. 1 (C-6'), 28. 4 (C-7), 28. 3 (C-7'), 39. 2 (C-8), 40. 3 (C-8'), 44. 9 (C-9), 45. 7 (C-9'), 48. 2 (C-10), 49. 2 (C-10'), 105. 9 (C-11, C-11'), 33. 2 (C-12), 33. 3 (C-12'), 18. 9 (C-13), 18. 6 (C-13'), 18. 8 (C-14), 18. 6 (C-14'), 34. 5 (C-15), 33. 6 (C-15'), 111. 6 (C-16), 119. 2 (C-16'), 155. 0 (C-17), 154. 1 (C-17'), 143. 9 (C-18), 170. 8 (C-18'), 104. 5 (C-19), 147. 6 (C-19'), 125. 8 (C-20), 115. 1 (C-20'), 148. 7 (C-21), 185. 4 (C-21').

【来源】 海绵 *Dysidea* sp.

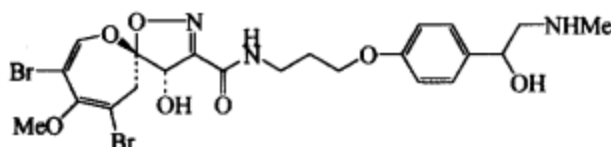
【分析方法】 海绵的异丙醇-二氯甲烷 (1:1) 提取物在甲醇和正己烷中分配, 正己烷层上 C-18 flash 柱, 100% 甲醇洗脱的馏分上 Sephadex LH-20 (甲醇-水 1:1) 纯化得到。结构通过 (HR) MS、UV、IR 和 NMR (1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 1. 拓扑异构酶-II 抑制剂, $IC_{50}=400nmol/L$ 。2. 对肺癌细胞 A549 有选择性细胞毒 $IC_{50}=2.5\mu g/mL$ 。

【参考文献】 1. Carney J R, et al. Tetrahedron Lett, 1993, 34 (23): 3727

A0174 Psammaphysin C

【结构式】



【分子式】 $C_{22}H_{26}Br_3N_3O_7$

【相对分子质量】 762

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D^{25} -57.1^\circ$ (c 0. 014, MeOH); UV(MeOH) $\lambda_{\max}$ (nm): 218(17600), 255(6700 sh), 279(3000 sh); IR(KBr) $\nu_{\max}$ (cm^{-1}): 3362, 2925, 2851, 1668, 1652, 1558, 1540, 1456, 1258, 1197, 1146, 1118, 1044, 1024; HRFABMS m/z : $[MH]^+$ 763. 8499 ($C_{22}H_{26}Br_3N_3O_7$ requires 763. 8466); 1H NMR (500MHz, CD_3OD) δ : 7. 67 (s, H-15, 17), 7. 13 (s, H-1), 4. 98 (s, H-7), 4. 92 (dd, $J=3.0, 10.0$ Hz, H-19), 4. 08 (t, $J=6.0$ Hz, H-12), 3. 64 (s, OMe), 3. 61 (t, $J=6.0$ Hz, H-10), 3. 38 (ABq, $J=16.0$ Hz, H-5), 3. 06 (ABq, $J=16.0$ Hz, H-5), 3. 21 (dd, $J=3.0, 13.0$ Hz, H-20), 2. 73 (s, NMe), 2. 14 (t, $J=6.0, 6.5$ Hz, H-11); ^{13}C NMR (125MHz, CD_3OD) δ : 160. 7 (s, C-9), 158. 7 (s, C-8), 154. 2 (s, C-13), 149. 87 (s, C-3), 146. 7 (d, C-1), 141. 5 (s, C-16), 131. 6 (d, C-15, 17), 120. 9 (s, C-6), 119. 4 (s, C-14, 18), 104. 5 (s, C-2), 104. 4 (s, C-4), 80. 4 (d, C-7), 72. 2 (t, C-12), 68. 6 (d, C-19), 59. 3 (q, OMe), 56. 4 (t, C-20), 38. 3 (t, C-5), 38. 0 (t, C-10), 33. 9 (q, NMe), 30. 5 (t, C-11).

【来源】 海绵 *Psammaphysilla purpurea*

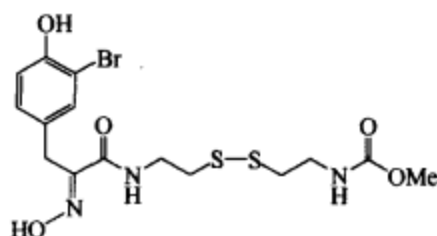
【分析方法】 氯仿/甲醇粗提物通过 Sephadex LH-20, 甲醇洗脱分离和正相高效液相色谱, 80% 氯仿-20% 甲醇-1% 氢氧化铵纯化获得活性成分 Psammaphysin C。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 HCT-116 的生长。

【参考文献】 1. Copp B R, et al. J Nat Prod, 1992, 55: 822

A0175 Psammaphlin D

【结构式】



【分子式】 $C_{15}H_{20}N_3O_5BrS_2$

【相对分子质量】 465

【理化常数及谱学数据】 油状物; UV (MeOH) λ_{max} : 280nm (17733); IR (neat) ν_{max} (cm^{-1}): 3521, 3372, 1723, 1674, 1634, 1525, 1420, 1256, 984; HREIMS m/z : 465. 0030 $C_{15}H_{20}N_3O_5BrS_2$; 1H NMR (CD_3CN) δ : 2.79 (t, $J = 6.6$ Hz, H-2), 2.76 (t, $J = 6.3$ Hz, H-2'), 3.50 (q, $J = 6.6$ Hz, H-3), 3.33 (q, $J = 6.3$ Hz, H-3'), 7.29 (t, $J = 5.4$ Hz, NH-4), 5.82 (brs, NH-4'), 3.76 (s, H-7), 7.35 (d, $J = 2.1$ Hz, H-9), 6.82 (d, $J = 8.4$ Hz, H-12), 7.07 (dd, $J = 2.1, 8.4$ Hz, H-13), 3.56 (s, OMe); ^{13}C NMR (CD_3CN) δ : 39.0 (C-2), 38.2 (C-2'), 39.1 (C-3), 40.6 (C-3'), 164.1 (C-5), 158.2 (C-5'), 153.4 (C-6), 28.5 (C-7), 130.9 (C-8), 134.1 (C-9), 109.9 (C-10), 152.8 (C-11), 117.1 (C-12), 130.4 (C-13), 52.4 (OMe).

【来源】 海绵 *Psammaphysilla purpurea*

【分析方法】 甲醇提粗提物用氯仿萃取得到的活性部位, 经硅胶柱层析分离, 反相高效液相色谱法 (MeOH/ H_2O 2:3) 纯化获得活性成分 Psammaphlin D。

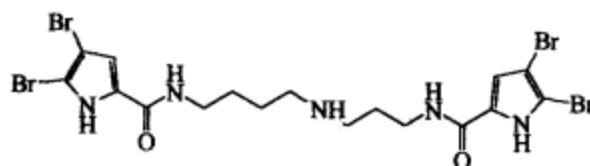
【生物活性与毒性】 抗微生物, mild tyrosine kinase inhibition activity。

【参考文献】 1. Jimenez C, et al. Tetrahedron, 1991, 47: 2097

2. Jung J H, et al. J Nat Prod, 1995, 58: 1722
3. Kim D Y, et al. Arch Pharmacol Res, 1999, 22: 25
4. Pham N B, et al. J Nat Prod, 2000, 63: 393
5. Shin J, et al. Tetrahedron, 2000, 56: 9071
6. Nicolaou K C, et al. Chem Eur J, 2001, 7: 4280
7. Tabudravu J N, et al. Bioorg Med Chem, 2002, 10: 1123
8. Pin I C, et al. J Org Chem, 2003, 68: 3866

A0176 Pseudoceratidine

【结构式】



【分子式】 $C_{17}H_{21}Br_4N_5O_2$

【相对分子质量】 647

【理化常数及谱学数据】 无色固体; UV (EtOH) λ_{max} (ϵ) (nm): 208 (13300), 275 (18400); IR (film) ν_{max} (cm^{-1}): 3250, 1620; 1H NMR (500MHz, DMSO- d_6) δ : 12.65 (2H, brs, H-1, H-22), 8.36 (1H, brs, H-12), 8.25 (1H, t, 5.5, H-16), 8.15 (1H, t, 5.5, H-7), 6.91 (2H, s, H-4, 19), 3.26 (2H, dt, 5.5, 6.2, H-15), 3.21 (2H, dt, 5.5, 6.5, H-8), 2.90 (4H, t, 7.5, H-11, 13), 1.78 (2H, tt, 7.5, 6.2, H-14), 1.58 (2H, tt, 7.5, 6.5, H-

10), 1.52(2H, tt, 7.5, 6.5, H-9); ^{13}C NMR(125MHz, DMSO- d_6) δ : 104.4(C-2), 97.7(C-3), 112.5(C-4), 127.9(C-5), 158.9(C-6), 37.8(C-8), 26.1(C-9), 23.1(C-10), 44.8(C-11), 46.6(C-13), 26.2(C-14), 35.7(C-15), 159.1(C-17), 128.2(C-18), 112.7(C-19), 97.8(C-20), 104.7(C-21); FABMS(positive, glycerol matrix) m/z 666/668/670/672/674 [$\text{M} + \text{Na}$] $^+$, 644/646/648/650/652 [$\text{M} + \text{H}$] $^+$, 566/568/570/572 [$\text{M} + \text{H-Br}$] $^+$; HRFABMS(positive, glycerol matrix) m/z 647.8467 (calcd for $\text{C}_{17}\text{H}_{22}^{79}\text{Br}_2^{81}\text{Br}_2\text{N}_5\text{O}_2$, $\Delta + 0.1\text{mmu}$)^[1].

【来源】 海绵 *Pseudoceratina purpurea*^[1]

【分析方法】 样品用 MeOH 提取, 硅胶柱层析 (MeOH- CHCl_3), Toyopearl HW-40 凝胶柱层析 (MeOH), HPLC (MeCN- H_2O -TFA) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 抑制幼虫的变形, 对 *Balanus amphitrite* ED₅₀ 8.0 $\mu\text{g}/\text{mL}$ ^[1]。

【参考文献】 1. Tsukamoto S, et al. Tetrahedron Lett, 1996, 37: 1439

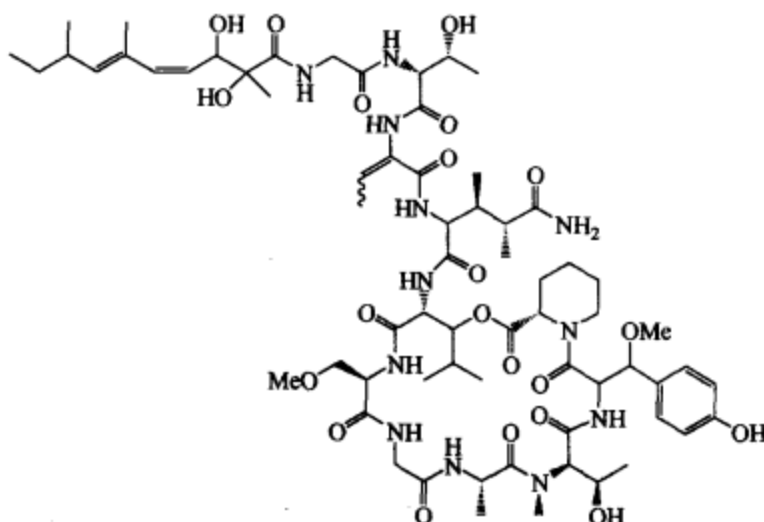
2. Ponasik J A, et al. Tetrahedron Lett, 1996, 37: 6041

3. Behrens C, et al. Bioorg Med Chem Lett, 1997, 7: 321

4. Ponasik J A, et al. Tetrahedron, 1998, 54: 6977

A0177 Puamide D

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{66}\text{H}_{102}\text{N}_{12}\text{O}_{21}$

【相对分子质量】 1398

【理化常数及谱学数据】 无色玻璃状粉末; $[\alpha]^{25} + 4.4^\circ$ (c 1.14, MeOH); UV(OH) λ_{max} (nm): 229, 276; ^1H NMR($\text{CD}_3\text{CN-H}_2\text{O}$) δ : Hpr H-2, 5.0(1H), H-3, 1.61(1H) and 2.07(1H), H-4, 1.65(2H), H-5, 1.30(1H) and 1.65(1H), H-6, 3.06(1H) and 4.03(1H), β -OMeTyr H-R, 5.25(1H), H- β , 4.22, (1H), OMe on C- β , 2.99(3H), H-2 and H-6, 7.17(2H), H-3 and H-5, 6.74(2H), NH, 7.67(1H), NmeThr H-2, 4.30(1H), H-3, 3.82(1H), H-4, 0.39(3H), N-Me, 3.01(3H), Ala H-2, 4.44(1H), H-3, 1.39(3H), NH, 7.02(1H), Gly 1H-2, 3.44(1H) and 4.08(1H), NH, 8.32(1H), 3-OMeAla H-2, 4.11(1H), H-3, 3.62(1H) and 3.78(1H), OMe on C-3, 3.29(3H), NH, 7.96(1H), 3-OHLeu H-2, 5.00(1H), H-3, 5.25(1H), H-4, 1.90(1H), H-5, 0.84(3H), H-6, 0.77(3H), NH 8.65(1H), 3,4-DiMeGln H-2, 4.28(1H), H-3, 2.07(1H), Me on C-3, 0.95(3H), H-4, 2.56(1H), Me on C-4, 1.08(3H), NH on C-2, 8.07(1H), Aba H-3, 6.72(1H), H-4, 1.65(3H), NH, 9.05(1H), Thr H-2, 4.47(1H), H-3, 4.29(1H), H-4, 1.16(3H), NH, 7.82(1H), Gly 2H-2, 3.78(1H) and 3.98(1H), NH, 8.32(1H), Dhtda Me on C-2, 1.19(3H), H-3, 4.79(1H), H-4, 5.46(1H), H-5, 6.10(1H), Me on C-6, 1.73(3H), H-7, 5.20(1H), H-8, 2.31(1H), Me on C-8, 0.89(3H), H-9, 1.16(1H) and 1.32(1H), H-10, 0.77(3H); ^{13}C NMR($\text{CD}_3\text{CN-H}_2\text{O}$) δ : Hpr CO, 170.8, C-2, 54.0, C-3, 26.6, C-4, 21.1, C-5, 25.3, C-6, 44.6, β -OMeTyr CO,

171.8-172.8, C-R, 52.3, C- β , 84.8, OMe on C- β , 57.1, C-1, 129.1, C-2 and C-6, 130.8, C-3 and C-5, 116.2, C-4, 158.1, NMeThr C-1, 169.3, C-2, 64.2, C-3, 64.0, C-4, 19.7, N Me, 31.3, Ala C-1, 174.5, C-2, 48.4, C-3, 15.6, Gly 1 C-1, 171.8~172.8, C-2, 42.8, 3-OMeAla C-1, 171.8~172.8, C-2, 57.6, C-3, 71.2, OMe on C-3, 59.4, 3-OHLeu C-1, 171.8~172.8, C-2, 55.9, C-3, 80.1, C-4, 28.8, C-5, 19.7, C-6, 18.7, 3,4-DiMeGln C-1, 175.3, C-2, 58.9, C-3, 37.6, Me on C-3, 13.1, C-4, 41.1, Me on C-4, 15.4, C-5, 179.6, Aba C-1, 166.8, C-2, 129.5, C-3, 135.2, C-4, 13.6, Thr C-1, 171.8~172.8, C-2, 59.9, C-3, 69.0, C-4, 19.9, Gly 2 C-1, 171.8~172.8, C-2, 43.8, Dhtda C-1, 178.6, C-2, 78.9, Me on C-2, 22.4, C-3, 73.0, C-4, 125.0, C-5, 139.1, C-6, 131.8, Me on C-6, 16.9, C-7, 139.8, C-8, 35.0, Me on C-8, 20.9, C-9, 40.0, C-10, 12.5; HRFABMS m/z 1399.7361 ($M + H$)⁺, calculated 1399.7361 for C₆₆H₁₀₃N₁₂O₂₁.

【来源】 海绵 *Theonella mirabilis*

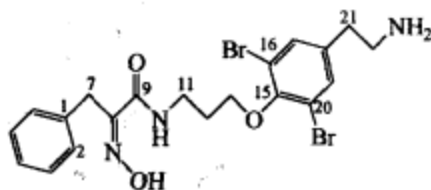
【分析方法】 海绵样品以水提取, 冷冻干燥, 然后再以甲醇: 二氯甲烷 (1:1) 提取。含水提取物经快速 C4 柱层析, 含水甲醇梯度洗脱。H₂O-MeOH (2:1) 洗脱部分经 Sephadex LH-20 柱, MeOH-H₂O (7:3) 洗脱得到含肽丰富的部分。最后使用 C18 HPLC 纯化, 乙腈: 水 (42.5:57.5) 洗脱 (0.05% 三氟醋酸) 得到化合物 Puamide D。

【生物活性与毒性】 化合物在体外试验中能轻微抑制 HIV-1_{RF} 引起的人 T-lymphoblastoid 细胞感染。

【参考文献】 1. Ford P W, et al. J Am Chem Soc, 1999, 121: 5899

A0178 Purpuramine A

【结构式】



【分子式】 C₂₀H₂₃Br₂N₃O₃

【相对分子质量】 511/513/515

【理化常数及谱学数据】 HRFABMS m/z 514.0178 [$M + H$]⁺, cal. for C₂₀H₂₃Br⁷⁹Br⁸¹N₃O₃; IR (film) $\nu_{\max}$ (cm⁻¹): 1658, 1540, 1458, 1420, 1258, 1200, 1010; UV (MeOH) $\lambda_{\max}$: 280nm; ¹H NMR (CD₃OD) δ : 7.25 (H, d, J = 7.5 Hz, H-2), 7.20 (H, dd, J = 7.3, 7.5 Hz, H-3), 7.12 (H, t, J = 7.3 Hz, H-4), 7.20 (H, dd, J = 7.3, 7.5 Hz, H-5), 7.25 (H, d, J = 7.5 Hz, H-6), 3.91 (2H, s, H-7), 3.60 (2H, t, J = 6.7 Hz, H-11), 2.05 (2H, tt, J = 6.2, 6.7 Hz, H-12), 4.01 (2H, t, J = 6.2 Hz, H-13), 7.51 (H, s, H-17), 7.51 (H, s, H-19), 2.88 (2H, t, J = 7.5 Hz, H-21), 3.13 (H, t, J = 7.5 Hz, H-22); ¹³C NMR (CD₃OD): 138.2 (C-1), 130.1 (C-2), 129.3 (C-3), 127.2 (C-4), 129.3 (C-5), 130.1 (C-6), 29.7 (C-7), 153.2 (C-8), 166.0 (C-9), 37.7 (C-11), 30.7 (C-12), 72.2 (C-13), 153.6 (C-15), 119.5 (C-16), 134.4 (C-17), 137.3 (C-18), 134.4 (C-19), 119.5 (C-20), 33.3 (C-21), 41.5 (C-22).

【来源】 海绵 *Psammaphysilla purpurea* (日本)

【分析方法】 海绵的乙醇提取物的乙醚萃取层, 在正己烷和甲醇间分配, 甲醇层经 ODS 和反相 HPLC (甲醇-水, 0.1% TFA) 纯化得到。结构通过 (HR) MS、UV、IR 和 NMR (¹H NMR、¹³C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 显示对 *Staphylococcus aureus* 的抗菌活性。

【参考文献】 1. Yagi H, et al. Tetrahedron, 1993, 49: 3749

2. Venkateswarlu Y, et al. J Nat Prod, 1998, 61: 1388

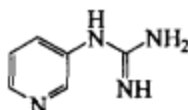
3. Tsuda M, et al. J Nat Prod, 2001, 64: 980

4. Tabudravu J N, et al. J Nat Prod, 2002, 65: 1798

5. Venkateswarlu Y, et al. Chem Pharm Bull, 2003, 51: 990

A0179 Pyraxinine

【结构式】



【分子式】 $C_6H_9N_4$

【相对分子质量】 136

【理化常数及谱学数据】 无色无定形粉末; mp 222~225°C; UV(EtOH) λ_{max} (ϵ) (nm): 203(2300), 231(1900), 260(sh, 1100); UV(EtOH + NaOH 10%) (nm) 215(2800), 243(2000), 277(900); IR(KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3600~2800, 1689, 1629, 1576, 1390, 1350; 1H NMR(300MHz, D_2O) δ : 8.55(1H, brd, 5, H-6), 8.55(1H, brd, H-2), 7.86(1H, dd, 8, 2, H-4), 7.58(1H, dd, 8, 5, H-5); ^{13}C NMR(75MHz, D_2O) δ : 148.7(C-2), 132.7(C-3), 157.5(C-3a), 135.6(C-4), 125.3(C-5), 146.9(C-6); HRFABMS(thioglycerol) m/z $[M+H]^+$ 137.0824(0.3, $C_6H_9N_4$, req. 137.0827)[1]。

【来源】 海绵 *Cymbastela cantharella*[1]

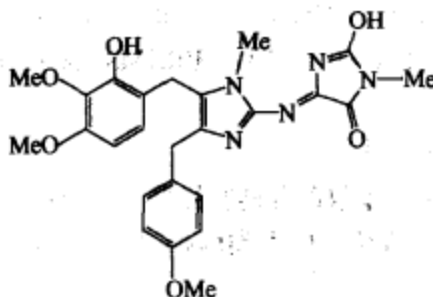
【分析方法】 样品 MeOH 提取, 硅胶柱层析 [EtOAc-butanone- H_2O -HCOOH(5.5:3.2:0.5:0.5)~(2:3:2:2)], 制备 TLC(EtOAc-butanone- H_2O -HCOOH 5.5:3.2:2:2) 得到纯化合物[1]。

【生物活性与毒性】 在 100 μ mol/L 浓度下, 对脂多糖 (LPS) 诱导的巨噬细胞 NO 合成酶有抑制作用[1]。

【参考文献】 1. Mourabit A A, et al, J Nat Prod, 1997, 60: 290

A0180 Pyronaamidine

【结构式】



【分子式】 $C_{25}H_{27}N_5O_6$

【相对分子质量】 493

【理化常数及谱学数据】 黄色羽状晶体; mp 185~187°C; UV(MeOH) λ_{max} (nm): 208(lg ϵ 4.69), 224(4.54), 276(3.78), 388(4.22); IR($CHCl_3$) ν_{max} (cm^{-1}): 3403(brs), 1790(sh), 1732(sh), 1664(sh), 1613(sh), 1567(sh), 1510(sh), 1444, 1392, 1302, 1246, 1178, 1148, 1096, 1034, 968, 752, 606; HREIMS m/z : 493.2043($C_{25}H_{27}N_5O_6$, requires 493.5182); 1H NMR(300MHz, $CDCl_3$) δ : 3.09(s, H_3 -13), 3.54(s, H_3 -12), 3.75(s, H_3 -30), 3.80(s, H_3 -29), 3.87(H_3 -28), 3.88(H_2 -21), 3.90(s, H_2 -14), 6.34(d, H-19), 6.44(d, H-20), 6.78(d, H-24, 26), 7.15(d, H-23, 27), 8.14(brs, 9-OH, 16-OH); ^{13}C NMR(75MHz, $CDCl_3$) δ : 23.2(t, C-14), 24.7(q, C-13), 29.9(q, C-12), 32.1(t, C-21), 55.5(q, C-30), 56.0(q, C-29), 61.1(q, C-28), 104.0(d, C-19), 114.1(d, C-24, 26), 116.4(C-15), 123.7(d, C-20), 126.9(C-5), 129.7(d, C-23, 27), 131.9(C-22), 135.1(C-4), 135.8(C-17), 146.5(C-7), 146.7(C-2), 147.5(C-16), 151.2(C-18), 156.4(C-9), 158.5(C-25), 162.7(C-11)。

【来源】 海绵 *Leucetta* sp.

【分析方法】 乙醇提取物的四氯化碳可溶部分经硅胶柱层析色谱 (CH_2Cl_2 -MeOH 95:5) 分离, 正相高效液相色谱 (EtOAc: hexane 65:35) 纯化, 获得活性成分 Pyronaamidine。

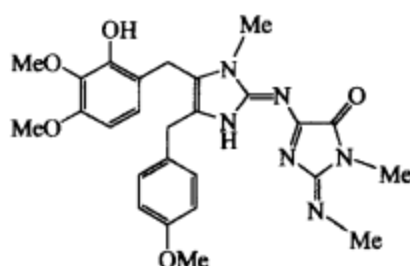
【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 KB 的生长。

【参考文献】 1. Akee R K, et al. J Org Chem, 1990, 55: 1944

2. Nakamura S, et al. Nakamura S, 2002. 1061

A0181 (2E;9E)-Pyronaamidine 9-(N-methylimine)

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{26}\text{H}_{30}\text{N}_6\text{O}_5$

【相对分子质量】 506

【理化常数及谱学数据】 黄色结晶 (CH_2Cl_2 -MeOH); mp 222~225°C; UV (MeOH) λ_{max} (lg ϵ) (nm): 211 (5.14), 274 (4.78), 388 (4.96); IR (dry film) ν_{max} (cm^{-1}): 3500 (—OH), 1669 (CdO, amide), 1558 (imine); ^1H NMR (500MHz, CD_2Cl_2) δ : 7.16 (2H, d, 8.7, H-2'', H-6''), 6.82 (2H, d, 8.7, H-3'', H-5''), 6.57 (1H, d, 8.7, H-6'), 6.41 (1H, d, 8.7, H-5'), 3.94 (2H, s, H-14), 3.88 (3H, s, MeO-3'), 3.87 (2H, s, H-13), 3.82 (3H, s, MeO-4'), 3.76 (3H, s, MeO-4''), 3.50 (3H, s, Me-12), 3.07 (3H, s, Me-17), 3.06 (3H, s, Me-16); ^{13}C NMR (125MHz, CD_2Cl_2) δ : 148.5 (C-2), 128.8 (C-4), 123.8 (C-5), 155.0 (C-7), 151.9 (C-9), 163.9 (C-11), 29.6 (C-12), 31.2 (C-13), 23.1 (C-14), 35.3 (C-16), 25.4 (C-17), 116.3 (C-1'), 147.6 (C-2'), 135.9 (C-3'), 151.8 (C-4'), 104.0 (C-5'), 123.7 (C-6'), 130.7 (C-1''), 130.2 (C-2'', 6''), 114.4 (C-3'', 5''), 158.8 (C-4''), 61.2 (CH₃O-3''), 56.1 (CH₃O-4''), 55.5 (CH₃O-4''); EIMS (70 eV) m/z [M^+]: 506 (100), 502 (15), 486 (32), 340 (31), 167 (8), 121 (43), 69 (12); HREIMS obsd m/z [M^+]: 506.2295, calcd for $\text{C}_{26}\text{H}_{30}\text{N}_6\text{O}_5$, 506.2278^[1].

【来源】 海绵 *Leucetta* sp. cf. *chagosensis*^[1]

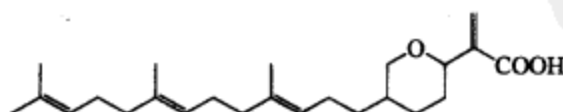
【分析方法】 样品 MeOH 提取, CHCl_3 萃取部分硅胶柱层析 (CH_2Cl_2 -MeOH 9:1) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 具有弱的细胞毒活性, 抗人类肺癌 A-549、乳腺癌 MCF-7、结肠癌 HT-29 细胞 GI_{50} 值分别为 6 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 、3 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 和 6 $\mu\text{g}/\text{mL}$ ^[1]。

【参考文献】 1. Plurukarn A, et al. J Nat Prod, 1997, 60: 712

A0182 Rhopaloic acid A

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{24}\text{H}_{38}\text{O}_3$

【相对分子质量】 374

【理化常数及谱学数据】 黏性的无色油状物; $[\alpha]_{\text{D}}^{25} + 40^\circ$ (c 0.47, CHCl_3); IR (KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3300, 1700, 1630; ^1H NMR (500MHz, CDCl_3) δ : 10.0 (1H, brs, COOH), 6.31 (1H, brs, H-8), 5.88 (1H, brs, H-8), 5.10 (3H, m, H-3', H-7', H-11'), 4.11 (1H, d, 10.1, H-3), 4.04 (1H, ddd, 11.0, 3.8, 1.6, H-7), 3.15 (1H, t, 11.0, H-7), 2.06 (4H, m, H-6', H-10'), 2.00 (2H, m, H-2'), 1.99 (4H, m, H-5', H-9'), 1.94 (1H, m,

H-4), 1.91(1H, m, H-5), 1.68(3H, s, H-13'), 1.60(1H, m, H-6), 1.60(9H, s, H-14', 15', 16'), 1.30(1H, m, H-4), 1.22(1H, m, H-5), 1.15(2H, m, H-1'); ^{13}C NMR(125MHz, CDCl_3) δ : 170.7(C-1), 141.9(C-2), 76.0(C-3), 32.1(C-4), 30.4(C-5), 35.3(C-6), 73.9(C-7), 125.8(C-8), 32.5(C-1'), 25.0(C-2'), 124.2(C-3'), 135.0(C-4'), 39.7(C-5'), 26.6(C-6'), 124.2(C-7'), 135.3(C-8'), 39.7(C-9'), 26.8(C-10'), 124.4(C-11'), 131.2(C-12'), 25.7(C-13'), 16.0(C-14'), 16.0(C-15'), 17.7(C-16'); ESIMS m/z 375 $[\text{M} + \text{H}]^+$, 397 $[\text{M} + \text{Na}]^+$; HREIMS m/z , 374.2836, M^+ , $\Delta + 1.5 \text{ mmu}^{[1]}$ 。

【来源】 海绵 *Rhopaloeides* sp.^[1]

【分析方法】 样品用 MeOH 提取, hexane 萃取物硅胶柱层析(hexane-EtOAc), 反相硅胶柱层析(MeOH- H_2O 8:2) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 细胞毒活性, 抗 K-562、MOLT-41、L1210 IC_{50} 值分别为 $0.04 \mu\text{mol/mL}$ 、 $0.05 \mu\text{mol/mL}$ 、 $0.10 \mu\text{mol/mL}^{[1]}$ 。

【参考文献】 1. Ohta S, et al. Tetrahedron Lett, 1996, 37: 2265

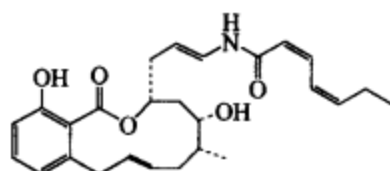
2. Snider B B, et al. Tetrahedron Lett, 1997, 38: 5453

3. Ota S, et al. Jpn Kokai Tokkyo Koho. 1997. CA127: 283378, JP 09235281 A2-970909

4. Yanai M, et al. Tetrahedron, 1998, 54: 15607

A0183 Salicylihalamide A

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{26}\text{H}_{33}\text{NO}_5$

【相对分子质量】 439

【理化常数及谱学数据】 无色无定形粉末状固体; $[\alpha]_D^{25} - 35^\circ$ (c 0.7, MeOH); $\text{UV} \lambda_{\text{max}}$ (MeOH): 280nm ($\epsilon 34000$); $\text{IR} \nu_{\text{max}}$ (film) (cm^{-1}): 3288, 2964, 1697, 1651, 1606, 1588, 1520, 1464, 1293, 1268, 1247, 1214, 1123, 1068, 972, 869, 735; ^1H NMR(500MHz, CD_3OD) δ : 7.30(1H, dt, 7.4, 1.5, H-22), 7.12(1H, t, 7.3, H-5), 6.87(1H, dt, 11.7, 1.0, H-21), 6.80(1H, d, 14.7, H-18), 6.72(1H, d, 7.3, H-4), 6.65(1H, d, 7.3, H-6), 5.82(1H, m, H-23), 5.68(1H, d, 11.7, H-20), 5.36(3H, m, H-10, H-15, H-17), 5.29(1H, dddd, 15.2, 8.3, 7.8, 1.5, H-9), 4.12(1H, dd, 9.3, 3.4, H-13), 3.56(1H, dd, 16.6, 8.3, H-8a), 3.34(1H, dd, 16.6, 7.8, H-8b), 2.42(1H, ddd, 14.2, 6.8, 6.3, H-16a), 2.39(1H, ddd, 14.2, 6.8, 6.3, H-16b), 2.28(2H, dq, 7.4, 1.5, H-24), 2.28(1H, m, H-11a), 1.87(1H, m, H-12), 1.75(1H, m, H-11b), 1.75(1H, m, H-14a), 1.37(1H, dd, 15.3, 9.3, H-14b), 1.02(3H, t, 7.4, H-25), 0.85(3H, d, 6.8, H-26); ^{13}C NMR(125MHz, CD_3OD) δ : 171.0(C-1), 123.0(C-2), 157.1(C-3), 115.3(C-4), 131.6(C-5), 122.5(C-6), 140.7(C-7), 38.8(C-8), 130.7(C-9), 131.7(C-10), 38.9(C-11), 38.6(C-12), 72.0(C-13), 36.6(C-14), 76.0(C-15), 37.6(C-16), 110.4(C-17), 126.2(C-18), 165.9(C-19), 120.3(C-20), 137.7(C-21), 125.3(C-22), 142.6(C-23), 21.5(C-24), 14.4(C-25), 13.6(C-26), EIMS m/z 439 $[\text{M}^+]$ (43), 421(1), 410(5), 409(2), 392(2), 330(7), 315(8), 313(3), 312(3), 296(10), 288(12), 278(4), 231(12), 191(40), 149(17), 125(18), 124(6), 109(100), 108(19), 107(16), 96(63), 91(10), 83(31), 82(50), 81(87), 79(35), 56(27), 55(24), 43(14), 18(19); HREIMS m/z 439.2354(M^+ , calcd for $\text{C}_{26}\text{H}_{33}\text{NO}_5$, 439.2350)^[1]。

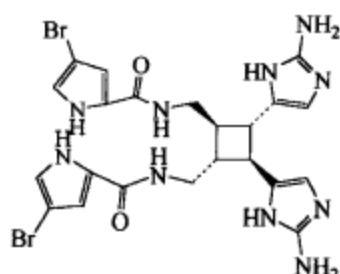
【来源】 海绵 *Haliclona* sp.^[1]

【分析方法】 样品 CH_2Cl_2 -MeOH(1:1, 体积比) 提取, SephadexLH-20(hexane-toluene-meoH 3:2:2, 体积比), HPLC(70%~100% MeOH) 得纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 具有细胞毒样活性, 抗人类 NCI 60-cell line 平均 GI_{50} 值为 $15 \text{ nmol/L}^{[1]}$ 。

【参考文献】 1. Erickson K L, et al. J Org Chem, 1997, 62: 8188

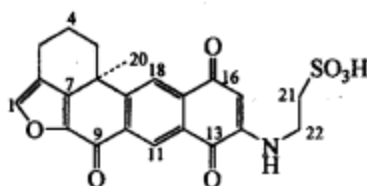
2. Kerr R G, et al. Expert Opin Ther Pat, 1999, 9: 1207
3. Erickson K L, et al. J Org Chem, 2001, 66: 1532
4. Francisco M E Y, et al. Diss Abstr Int B, 2000, 61: 1414

A0184 Sceptrin**【结构式】****【分子式】** $C_{22}H_{24}Br_2N_{10}O_2$ **【相对分子质量】** 620

【理化常数及谱学数据】 淡黄色固体; $[\alpha]_D^{25} - 59.3^\circ$ (c 0.13, MeOH); CD (MeOH) $\Delta\epsilon_{219} - 7.2$; $\Delta\epsilon_{246} + 6.6$; 1H NMR (500MHz, CD_3OD) δ : 6.92 (1H, d, 4.2, H-15), 6.33 (1H, d, 4.2, H-14), 4.60 (1H, m, H-7), 4.09 (1H, d, 5.4, H-8), 3.89 (1H, brs, H-4), 2.81 (3H, s, N-Me), 2.65 (1H, dd, 12.9, 6.6, H-6), 2.10 (1H, dd, 12.9, 12.3, H-6); ^{13}C NMR (100MHz, CD_3OD) δ : 160.6 (C-2), 157.1 (C-2), 144.6 (C-7), 132.0 (C-2), 138.7 (C-7a), 128.3 (C-7a), 126.3 (C-3a), 126.2 (C-3a), 126.1 (C-2), 125.3 (C-4), 124.7 (C-5), 123.9 (C-4), 123.0 (C-5), 116.8 (C-6), 115.2 (C-7), 113.8 (C-3), 108.2 (C-3), 108.2 (C-6), 72.1 (C-5), 56.3 (C-4), 51.1 (C-6), 19.7 (C-7), HRFABMS m/z 620.3959 $[MH]^+$, calcd for $C_{22}H_{25}Br_2N_{10}O_2$ 619.0528.

【来源】 海绵 *Agelas conifera*^[1]**【分析方法】** 样品 95%乙醇提取, 硅胶柱层析 (hexane-MeOH- H_2O), HPLC(H_2O) 得到纯化合物^[1]。**【生物活性与毒性】** 抗菌活性, 抗 *M. tuberculosis* MIC 12.5 $\mu g/mL$ ^[1]。**【参考文献】** 1. Shen, et al. J Nat Prod, 1998, 61: 1302

2. Walker R P, et al. J Am Chem Soc, 1981, 103: 6772
3. Faulkner D J, US Pat Appl, 1983. US 4370484 CA98: 155209
4. Mynderse J S, et al. J Chromatogr, 1989, 43: 377
5. Rosa R, et al. Experientia, 1992, 48: 885
6. Bernan V S, et al. J Antimicrob Chem Other, 1993, 32: 539
7. Rentas A L R, et al. Toxicon, 1995, 33: 491
8. Meijer L, et al. Chem Biol, 2000, 7: 51

A0185 Secoadociaquinone B**【结构式】****【分子式】** $C_{22}H_{18}O_7NS$ **【相对分子质量】** 441**【理化常数及谱学数据】** 橙色固体; $[\alpha] + 30.3^\circ$ (c 1.12, CH_3OH); HRFABMS(-) m/z 440.0769 $[M-$

$\text{H}]^-$; UV (MeOH) λ_{max} : 258nm; $\text{IR}\nu_{\text{max}}$ (cm^{-1}): 3330, 2954, 1672, 1595, 1202, 1131, 1043; ^1H NMR (500MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ : 7.96 (H, s, H-1), 2.81 (H, dd, $J = 17.0, 8.5\text{Hz}$, H-3a), 2.57 (H, m, H-3b), 2.20, 2.05 (2H, m, H-4), 2.57, 1.60 (2H, m, H-5), 8.64 (H, s, H-11), 5.73 (H, s, H-15), 8.18 (H, s, H-18), 1.47 (3H, s, H-20), 2.75 (2H, t, $J = 6.5\text{Hz}$, H-21), 3.41 (2H, m, H-22), 7.94 (H, t, $J = 5.5\text{Hz}$, NH); ^{13}C NMR (125MHz, $\text{DMSO}-d_6$): 146.2 (C-1), 121.6 (C-2), 16.3 (C-3), 17.9 (C-4), 30.4 (C-5), 37.1 (C-6), 147.7 (C-7), 143.0 (C-8), 169.5 (C-9), 135.5 (C-10), 125.0 (C-11), 128.9 (C-12), 180.3 (C-13), 148.6 (C-14), 100.0 (C-15), 180.4 (C-16), 135.2 (C-17), 122.5 (C-18), 156.8 (C-19), 31.8 (C-20), 39.0 (C-21), 48.1 (C-22)。

【来源】 海绵 *Xestospongia* sp.

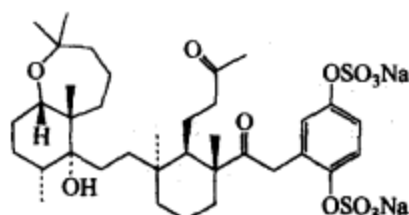
【分析方法】 海绵的甲醇提取物在水和氯仿间分配, 水层的甲醇可溶解部分上 Sephadex LH-20 (水-甲醇-TFA) 分离得到纯品。结构通过 (HR) MS、IR、UV 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 拓扑异构酶抑制剂, $\text{IC}_{50} = 113\mu\text{mol/L}$ 。

【参考文献】 1. Concepcion G P, et al. J Med Chem, 1995, 38: 4503

A0186 Shaagrokol B

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{36}\text{H}_{54}\text{O}_{12}\text{S}_2\text{Na}_2$

【相对分子质量】 788

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D + 4.0^\circ$ (c 0.5, MeOH); $\text{IR}\nu_{\text{max}}$ (cm^{-1}): 3500, 2958, 2929, 1714, 1263, 1234, 1043, 852; FABMS m/z : $[\text{M}(\text{Na})_2 + \text{Na}]^+ 811.3$; ^1H NMR (500MHz, CD_3OD) δ : 1.94 (m, H-2a), 1.55 (m, H-2b), 1.70 (m, H-3a), 1.50 (m, H-3b), 1.66 (m, H-4a), 1.45 (m, H-4b), 3.74 (d, H-7), 2.03 (m, H-8a), 1.28 (m, H-8b), 1.98 (m, H-9a), 1.15 (m, H-9b), 1.60 (m, H-10), 1.63 (m, H-12a), 1.16 (m, H-12b), 1.32 (m, H-13a), 1.12 (m, H-13b), 1.65 (m, H-15a), 1.02 (m, H-15b), 1.52 (m, H-16a), 1.26 (m, H-16b), 1.74 (m, H-17a), 1.02 (m, H-17b), 2.59 (m, H-21a), 2.44 (m, H-21b), 1.76 (m, H-22a), 1.36 (m, H-22b), 1.96 (H-23), 1.18 (s, H-24), 1.20 (s, H-25), 1.15 (s, H-26), 1.09 (d, H-27), 0.91 (s, H-28), 1.30 (s, H-29), 2.06 (s, H-30), 4.16 (d, H-31a), 4.06 (d, H-31b), 7.38 (d, H-34), 7.17 (dd, H-35), 7.12 (d, H-37); ^{13}C NMR (125MHz, CD_3OD) δ : 42.3 (s, C-1), 39.5 (t, C-2), 19.9 (t, C-3), 44.4 (t, C-4), 76.0 (s, C-5), 74.2 (s, C-7), 25.5 (t, C-8), 24.7 (t, C-9), 37.7 (d, C-10), 79.7 (s, C-11), 27.4 (t, C-12), 27.6 (t, C-13), 38.3 (s, C-14), 37.4 (t, C-15), 19.4 (t, C-16), 37.4 (t, C-17), 54.0 (s, C-18), 215.0 (s, C-19), 212.0 (s, C-20), 46.1 (t, C-21), 21.8 (t, C-22), 49.9 (d, C-23), 24.6 (q, C-24), 24.1 (q, C-25), 32.2 (q, C-26), 17.2 (q, C-27), 28.4 (q, C-28), 20.4 (q, C-29), 30.0 (q, C-30), 40.1 (t, C-31), 131.1 (s, C-32), 149.0 (s, C-33), 123.4 (d, C-34), 121.5 (d, C-35), 150.3 (s, C-36), 125.3 (d, C-37)。

【来源】 海绵 *Toxiclona toxius*

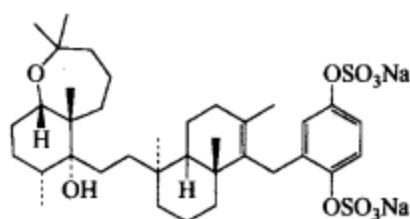
【分析方法】 从甲醇粗提物的二氯甲烷-甲醇可溶部分获得活性成分 Shaagrokol B。

【生物活性与毒性】 抗菌。

【参考文献】 1. Isaacs S, et al. Tetrahedron Lett, 1992, 33: 2227

A0187 Shaagrokol C

【结构式】



【分子式】 $C_{36}H_{54}O_{10}S_2Na_2$

【相对分子质量】 756

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D + 8.0^\circ (c\ 0.7, MeOH)$; IR $\nu_{max} (cm^{-1})$: 3500, 2966, 2948, 1264, 1239, 1039, 864; FABMS m/z : $[M(Na)_2 + Na]^+$ 8779.4; 1H NMR (500MHz, CD_3OD) δ : 1.97(m, H-2a), 1.54(m, H-2b), 1.78(m, H-3a), 1.52(m, H-3b), 1.62(m, H-4a), 1.49(m, H-4b), 3.71(d, H-7), 2.06(m, H-8a), 1.26(m, H-8b), 2.02(m, H-9a), 1.14(m, H-9b), 1.58(m, H-10), 1.61(m, H-12a), 1.14(m, H-12b), 1.50(m, H-13a), 1.12(m, H-13b), 1.65(m, H-15a), 1.02(m, H-15b), 1.52(m, H-16a), 1.28(m, H-16b), 1.74(m, H-17a), 0.91(m, H-17b), 2.21(m, H-21a), 2.08(m, H-21b), 1.76(m, H-22a), 1.62(m, H-22b), 1.36(dd, H-23), 1.18(s, H-24), 1.17(s, H-25), 1.14(s, H-26), 1.06(d, H-27), 0.91(s, H-28), 1.06(s, H-29), 1.49(s, H-30), 3.57(d, H-31a), 3.45(d, H-31b), 7.34(d, H-34), 7.09(dd, H-35), 7.03(d, H-37); ^{13}C NMR (125MHz, CD_3OD) δ : 42.1(s, C-1), 39.7(t, C-2), 20.0(t, C-3), 44.6(t, C-4), 76.1(s, C-5), 74.4(s, C-7), 25.5(t, C-8), 24.5(t, C-9), 37.6(d, C-10), 79.8(s, C-11), 28.0(t, C-12), 25.1(t, C-13), 37.9(s, C-14), 37.4(t, C-15), 20.0(t, C-16), 38.2(t, C-17), 40.2(s, C-18), 138.4(s, C-19), 130.5(s, C-20), 34.8(t, C-21), 20.1(t, C-22), 55.6(d, C-23), 24.3(q, C-24), 24.5(q, C-25), 32.2(q, C-26), 17.2(q, C-27), 29.4(q, C-28), 21.3(q, C-29), 20.4(q, C-30), 28.5(t, C-31), 136.5(s, C-32), 148.8(s, C-33), 123.0(d, C-34), 119.7(d, C-35), 150.9(s, C-36), 123.4(d, C-37).

【来源】 海绵 *Toxiclona toxius*

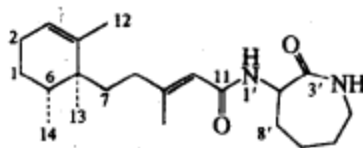
【分析方法】 从甲醇粗提物的二氯甲烷-甲醇可溶部分获得活性成分 Shaagrockol C.

【生物活性与毒性】 抗菌。

【参考文献】 1. Isaacs S, et al. Tetrahedron Lett, 1992, 33: 2227

A0188 Sollasin C

【结构式】



【分子式】 $C_{21}H_{34}N_2O_2$

【相对分子质量】 346

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha] + 10^\circ (c\ 1.26, CHCl_3)$; HREIMS m/z 346.2610 $[M]^+$; LRE-IMS m/z 346 $[M]^+$, 331 $[M - Me]^+$, 223 $[M - C_9H_5]^+$; IR (film) $\nu_{max} (cm^{-1})$: 3390(br), 2910, 1645(br), 1620, 1472, 1430, 1365, 1330, 1170; UV (EtOH) $\lambda_{max} (nm)$: 220; 1H NMR δ : 1.41(2H, m, H-1), 1.91(2H, m, H-2), 5.38(H, brs, H-3), 1.63(H, m, H-6), 1.47(2H, m, H-7), 1.82, 2.03(2H, m, H-8), 5.61(H, brs, H-10), 1.58(3H, brs, H-12), 0.86(3H, s, H-13), 0.85(3H, d, $J = 7.6$ Hz, H-14), 2.14(3H, brs, H-15), 6.78(H, d, $J = 5.9$ Hz, H-1'), 4.53(H, ddd, $J = 10.9, 5.9, 1.2$ Hz, H-2'), 6.61(H, t, $J = 6.1$ Hz, H-4'), 3.21(2H, m, H-5'), 1.33, 1.76(2H, m, H-6'), 1.95(2H, m, H-7'), 1.40, 1.80(2H, m, H-8'); ^{13}C NMR: 27.0 (C-1), 25.5 (C-2), 124.5 (C-3), 139.1 (C-4), 40.4 (C-5), 33.3 (C-6), 34.5 (C-7), 35.5 (C-8), 155.9 (C-9), 117.3 (C-10), 166.2 (C-11), 19.1 (C-12), 21.0 (C-13), 15.8 (C-14), 18.6 (C-15), 51.9 (C-2'), 176.0 (C-3'), 42.1 (C-5'), 28.9 (C-6'), 27.9 (C-7'), 31.8 (C-8').

【来源】 深水海绵 *Poecillastra sollasi*

【分析方法】 海绵的庚烷和乙酸乙酯提取物上 SiO_2 减压柱, 庚烷-乙酸乙酯梯度洗脱, 馏分再上正相 HPLC (SiO_2 柱, 庚烷-乙酸乙酯 79 : 1) 得到纯品。结构通过 (HR) MS、IR、UV 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 1. 阻断 [^{125}I] 血管紧张素 II 和大鼠主动脉平滑肌细胞黏膜的结合, $\text{IC}_{50} = 63\mu\text{mol/L} \pm 21\mu\text{mol/L}$ 。2. 抑制致病真菌 *Candida albicans* 的生长, $\text{MIC} = 31.2\mu\text{g/mL}$ 。3. 抑制致病真菌 *Cryptococcus neoformans* 的生长, $\text{MIC} = 31.2\mu\text{g/mL}$ 。4. 对 P-388 鼠科白血病肿瘤细胞和人 A-549 肺癌细胞的 IC_{50} 分别为 $8.4\mu\text{g/mL}$ 和 $11.0\mu\text{g/mL}$ 。

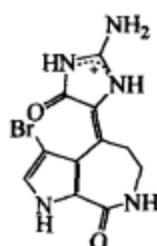
【参考文献】 1. Killday K B, et al. J Nat Prod, 1993, 56 (4): 500

2. Angers P, et al. Tetrahedron Lett, 1995, 36: 2397

3. Hatsui T, et al. Chem Lett, 1998, 113

A0189 Spongiacidin B

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{11}\text{H}_{12}\text{BrN}_5\text{O}_2$

【相对分子质量】 326

【理化常数及谱学数据】 无色无定形固体; UV (MeOH) λ_{max} (ϵ) (nm): 204 (10000), 272 (10000), 331 (9000); IR (film) ν_{max} (cm^{-1}): 3440 (br), 1680, 1470, 1210, and 1135; ^1H NMR (400MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ : 12.54 (1H, brs, H-1), 8.00 (1H, brs, H-4), 3.25 (2H, m, H-5), 3.25 (2H, m, H-6), 10.79 (1H, s, H-9), 8.39 (1H, s, H-12), 7.28 (1H, s, H-15), 9.31 (2H, s, NH_2); ^{13}C NMR (100MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ : 126.1 (C-2), 163.4 (C-3), 41.2 (C-5), 40.4 (C-6), 125.8 (C-7), 123.8 (C-8), 155.1 (C-10), 164.0 (C-12), 119.4 (C-13), 98.5 (C-14), 123.2 (C-15); ESIMS (pos., MeOH) m/z 324 and 326 [$(\text{M} + \text{H})^+$, ca. 1 : 1]; HRESIMS m/z 324.0087 ($\text{M} + \text{H})^+$ (calcd for $\text{C}_{11}\text{H}_{11}\text{N}_5\text{O}_2^{\text{Br}}$, 324.0096)^[1]。

【来源】 海绵 *Hymeniacidon* sp.^[1]

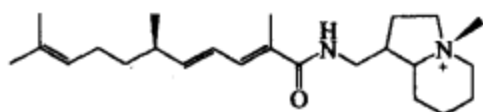
【分析方法】 样品甲醇提取, EtOAc、BuOH 萃取, BuOH 部分 Sephadex LH-20 柱层析 (MeOH), C_{18} 柱层析 ($\text{CH}_3\text{CN}-\text{H}_2\text{O}-\text{TFA}$ 20 : 80 : 0.1), HPLC ($\text{MeOH}-\text{H}_2\text{O}-\text{TFA}$ 46 : 54 : 0.1) 得到纯化化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 抑制蛋白激酶 *c-erbB-2* kinase IC_{50} $6.0\mu\text{g/mL}$ 周期蛋白依赖蛋白激酶 4 IC_{50} $12\mu\text{g/mL}$ ^[1]。

【参考文献】 1. Inaba K, et al. J Nat Prod, 1998, 61: 693

A0190 Stelletamide B

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{24}\text{H}_{41}\text{N}_2\text{O}$

【相对分子质量】 373

【理化常数及谱学数据】 黄色胶; $[\alpha]_D^{25} - 24.2'$ (c 0.5, CHCl_3); UV (MeOH) λ_{max} ($\lg \epsilon$): 262 (4.20) nm; IR

(KBr) $\nu_{\max}$ (cm^{-1}): 3440(br), 2930, 1650, 1535, 1450, 1380, 975; ^1H NMR (500MHz, CD_3OD) δ : 6.83(1H, brd, 11.2, H-13'), 6.35(1H, ddd, 15.1, 11.2, 1.0, H-14'), 5.90(1H, dd, 15.1, 8.3, H-15'), 5.09(1H, brt, 7.11, H-9'), 3.90(1H, ddd, 11.7, 11.7, 7.3, H-3a), 3.57(1H, m, H-8a), 3.58(1H, brd, 13.5, H-5a), 3.44(1H, dd, 13.2, 7.3, H-9a), 3.40(1H, ddd, 13.5, 13.2, 3.9, H-5b), 3.32(1H, dd, 13.2, 6.9, H-9b), 3.28(1H, m, H-3b), 3.16(1H, m, H-1), 3.14(3H, s, Me-4), 2.40(1H, m, H-2a), 2.28(1H, m, H-6'), 2.00(1H, m, H-2b), 2.00(1H, m, H-7a), 1.94(2H, m, H-8'), 1.94(1H, m, H-8a), 1.92(3H, d, 1.0, H-12'), 1.89(1H, m, H-6a), 1.85(1H, m, H-6b), 1.67(3H, brs, H-11'), 1.59(1H, m, H-8b), 1.58(3H, brs, H-14'), 1.53(1H, brd, 13.2, H-7b), 1.36(2H, m, H-7'), 1.03(3H, d, 6.4, H-13'); ^{13}C NMR (125MHz, CD_3OD) δ : 40.5 (C-1), 25.1 (C-2), 57.6 (C-3), 61.0 (C-5), 21.1 (C-6), 21.6 (C-7), 23.3 (C-8), 74.0 (C-8a), 40.1 (C-9), 172.4 (C-1'), 129.0 (C-2'), 135.6 (C-3'), 125.4 (C-4'), 148.5 (C-5'), 38.3 (C-6'), 38.0 (C-7'), 26.9 (C-8'), 125.4 (C-9'), 132.3 (C-10'), 25.9 (C-11'), 12.9 (C-12'), 20.8 (C-13'), 17.8 (C-14'), 54.3 (Me); HRFABMS $[\text{M} + \text{H}]^+ m/z$ 373.3210, calcd for $\text{C}_{24}\text{H}_{41}\text{N}_2\text{O}$ 373.3219^[1]。

【来源】 海绵 *Stelletta*^[1]

【分析方法】 样品分别用甲醇和二氯甲烷提取, 提取物合并, 水-正丁醇萃取, 正丁醇部分重新用正己烷和含 10% 水的甲醇萃取, 水甲醇层浓缩, RP-18 柱层析 (梯度 $\text{MeOH}-\text{H}_2\text{O}$), Sephadex LH-20 柱层析 (MeOH), 反相 HPLC ($\text{MeOH}-\text{H}_2\text{O}$ 75:25) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 中等强度抗真菌活性, 在浓度 25 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 抗 *Candida albicans* 抑制直径 4~9mm, 此外, 具有反转录酶抑制活性^[1]。

【参考文献】 1. Shin J, et al. *J Nat Prod*, 1997, 60: 611

2. Hirota H, et al. *Tetrahedron Lett*, 1990, 31: 4163

3. Li H, et al. *Experientia*, 1994, 50: 771

4. Abe Y, et al. *Br J Pharmacol*, 1997, 121: 1309

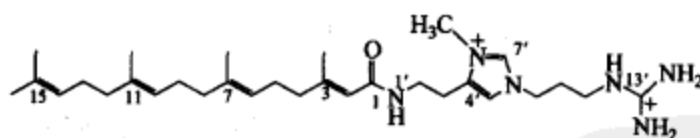
5. Whitlock G A, et al. *J Org Chem*, 1997, 62: 7916

6. Matsunaga S, et al. *J Nat Prod*, 1999, 62: 1202

7. Michael J P. *Nat Prod Rep*, 2002, 19: 719

A0191 Stelletazole B

【结构式】



【分析方法】 海绵的甲醇提取物分配于水和石油醚之间，含水层用正丁醇萃取。所得的正丁醇层加于 ODS 柱，MeOH-H₂O 梯度洗脱。MeOH-H₂O [(4:6)~(6:4)] 洗脱部分合并经 Sephadex LH-20 柱层析，甲醇洗脱。活性部位经过 ODS HPLC，MeCN-H₂O (含 300mmol/L NaClO₄，64:36) 洗脱得到化合物 Stelletazole B。

【生物活性与毒性】 浓度为 20μg/disk 时，即能抑制细菌 *Escherichia coli* 的生长，抑菌圈为 6.1mm。

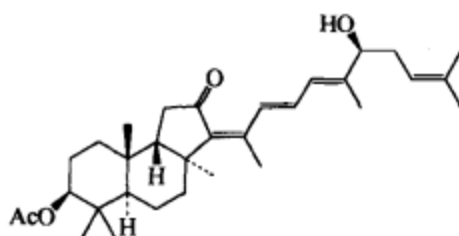
【参考文献】 1. Matsunaga S, et al. J Nat Prod, 1999, 62: 1202

2. Tsukamoto S, et al. Tetrahedron Lett, 1999, 40: 737

3. Fraga B M. Nat Prod Rep, 2000, 17: 483

A0192 Stelliferin A

【结构式】



【分子式】 C₃₂H₄₈O₄

【相对分子质量】 496

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{22} - 126.6^\circ$ (c 0.54, C₆H₆); UV(EtOH) $\lambda_{\max}$: 343nm(25000); IR(CHCl₃) $\nu_{\max}$ (cm⁻¹): 3500~3200 (br), 2880, 2830, 1720, 1690, 1575, 1450, 1380, 1260, 1175, 1030; EIMS m/z : 496 (M⁺), 478, 427, 409, 357, 189, 163, 149, 135; HREIMS m/z : 496.3527 (calcd for C₃₂H₄₈O₄, 496.3553); ¹H NMR(500MHz, C₆D₆) δ : 1.24(ddd, $J = 3.9, 13.2, 16.6$ Hz, H-1), 0.98(dt, $J = 2.9, 16.6$ Hz, H-1), 1.87(m, H-2), 1.62(m, H-2), 4.77(dd, $J = 5.0, 12.0$ Hz, H-3), 1.59(bd, $J = 11.7$ Hz, H-5), 1.45(bdd, $J = 8.8, 13.2$ Hz, H-6), 1.21(btt, $J = 3.9, 13.2$ Hz, H-6), 1.79(m, H-7), 1.71(dd, $J = 9.3, 13.2$ Hz, H-7), 1.49(dd, $J = 7.3, 15.1$ Hz, H-9), 2.09(dd, $J = 7.3, 15.1$ Hz, H-11), 2.02(t, $J = 15.1$ Hz, H-11), 8.82(d, $J = 15.6$ Hz, H-15), 7.00(dd, $J = 11.2, 15.6$ Hz, H-16), 6.43(dd, $J = 1.0, 11.2$ Hz, H-17), 1.83(d, $J = 1.0$ Hz, H-18), 0.74(s, H-19), 1.81(s, H-21), 3.95(bt, $J = 6.6$ Hz, H-22), 2.35(ddd, $J = 6.6, 7.3, 14.4$ Hz, H-23), 2.24(ddd, $J = 6.6, 7.3, 14.4$ Hz, H-23), 5.22(qt, $J = 1.5, 7.3$ Hz, H-24), 1.56(d, $J = 1.5$ Hz, H-26), 1.67(d, $J = 1.5$ Hz, H-27), 0.97(s, H-28), 0.93(s, H-29), 1.06(s, H-30), 1.84(s, AcO); ¹³C NMR(500MHz, C₆D₆) δ : 33.1(t, C-1), 25.5(t, C-2), 80.7(d, C-3), 38.4(s, C-4), 46.4(d, C-5), 18.4(C-6), 38.3(t, C-7), 44.5(s, C-8), 50.1(d, C-9), 35.5(s, C-10), 36.8(t, C-11), 205.0(s, C-12), 146.3(s, C-13), 141.5(s, C-14), 133.9(d, C-15), 130.2(d, C-16), 126.7(d, C-17), 15.8(q, C-18), 22.2(q, C-19), 143.6(s, C-20), 12.7(q, C-21), 77.0(d, C-22), 34.8(t, C-23), 120.9(d, C-24), 134.0(s, C-25), 17.9(q, C-26), 25.9(q, C-27), 29.2(q, C-28), 17.1(q, C-29), 24.8(q, C-30), 20.8(q, AcO), 170.0(s, AcO)。

【来源】 海绵 *Jaspis stellifera*

【分析方法】 甲醇粗提物分配于乙酸乙酯-水溶液中，乙酸乙酯可溶部分经硅胶柱层析 [CHCl₃-MeOH (100:0)~(95:5); hexane-acetate 8:1, 6:1] 分离，Sephadex LH-20(Benzene-MeOH 1:1) 和高效液相色谱 (MeOH-H₂O 95:5) 纯化，获得活性成分 Stelliferin A。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 L1210 和 KB 的生长。

【参考文献】 1. Tsuda M, et al. Tetrahedron, 1991, 47: 2181

2. Tsuda M, et al. Tennen Yuki Kagobutsu Toronkai Koen Yosh, 1991, 33: 441

3. Raepfel F, et al. Tetrahedron Lett, 1999, 40: 6377

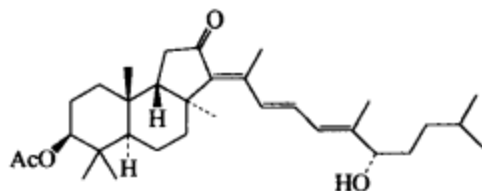
4. Oku N, et al. J Nat Prod, 2000, 63: 205

5. Meragelman K M, et al. J Nat Prod, 2001, 64: 389

6. Tabudravu J N, et al. J Nat Prod, 2001, 64: 813

A0193 Stelliferin B

【结构式】



【分子式】 $C_{32}H_{48}O_4$

【相对分子质量】 496

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} -166.0^\circ$ (c 0.56, C_6H_6); UV(EtOH) λ_{max} : 345nm(26000); IR(neat) ν_{max} (cm^{-1}): 3500(br), 3010, 2980, 2950, 2850, 1740, 1700, 1590, 1560, 1450, 1380, 1250, 1180, 1030; EIMS m/z : 496(M^+), 480, 427, 409, 357, 189, 163, 135, 43; HREIMS m/z : 496.3511(calcd for $C_{32}H_{48}O_4$, 496.3553); 1H NMR(500MHz, C_6D_6) δ : 1.27(bdd, $J = 3.9, 13.0$ Hz, H-1), 0.97(m, H-1), 1.83(m, H-2), 1.63(m, H-2), 4.78(dd, $J = 4.9, 11.7$ Hz, H-3), 1.62(bd, $J = 10.9$ Hz, H-5), 1.45(bdd, $J = 7.0, 13.8$ Hz, H-6), 1.20(m, H-6), 1.97(bdd, $J = 7.0, 10.0$ Hz, H-7), 1.87(bdd, $J = 4.2, 10.0$ Hz, H-7), 1.52(dd, $J = 5.7, 8.2$ Hz, H-9), 2.08(dd, $J = 8.2, 9.9$ Hz, H-11), 2.06(t, $J = 5.7, 9.9$ Hz, H-11), 6.76(d, $J = 15.1$ Hz, H-15), 7.02(dd, $J = 11.2, 15.1$ Hz, H-16), 6.54(bd, $J = 11.2$ Hz, H-17), 2.68(s, H-18), 0.73(s, H-19), 1.70(d, $J = 1.0$ Hz, H-21), 3.99(bt, $J = 6.5$ Hz, H-22), 2.29(bt, $J = 7.2$ Hz, H-23), 5.21(qt, $J = 1.5, 7.2$ Hz, H-24), 1.54(bs, H-26), 1.64(bs, H-27), 0.98(s, H-28), 0.92(s, H-29), 1.16(s, H-30), 1.81(s, AcO); ^{13}C NMR(500MHz, C_6D_6) δ : 33.1(t, C-1), 25.5(t, C-2), 86.8(d, C-3), 38.4(s, C-4), 46.8(d, C-5), 18.4(C-6), 39.6(t, C-7), 44.4(s, C-8), 50.2(d, C-9), 35.5(s, C-10), 36.7(t, C-11), 206.1(s, C-12), 146.9(s, C-13), 140.7(s, C-14), 132.8(d, C-15), 131.8(d, C-16), 126.6(d, C-17), 14.7(q, C-18), 22.2(q, C-19), 144.5(s, C-20), 11.8(q, C-21), 76.6(d, C-22), 35.0(t, C-23), 120.7(d, C-24), 134.5(s, C-25), 18.0(q, C-26), 26.0(q, C-27), 29.5(q, C-28), 17.6(q, C-29), 23.9(q, C-30), 20.7(q, AcO), 170.0(s, AcO).

【来源】 海绵 *Jaspis stellifera*

【分析方法】 甲醇粗提物分配于乙酸乙酯-水溶液中, 乙酸乙酯可溶部分经硅胶柱层析 [$CHCl_3$ -MeOH (100:0)~(95:5); hexane-acetate 8:1, 6:1] 分离, Sephadex LH-20(Benzene-MeOH 1:1) 和高效液相色谱 (MeOH- H_2O 95:5) 纯化, 获得活性成分 Stelliferin B.

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 L1210 和 KB 的生长。

【参考文献】 1. Tsuda M, et al. Tetrahedron, 1991, 47: 2181

2. Tsuda M, et al. Tennen Yuki Kagobutsu Toronkai Koen Yosh, 1991, 33: 441

3. Raepel F, et al. Tetrahedron Lett, 1999, 40: 6377

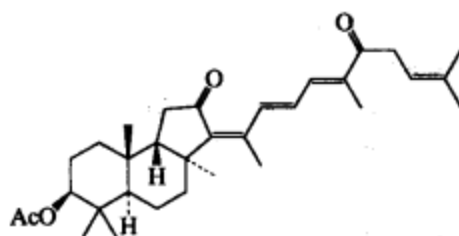
4. Oku N, et al. J Nat Prod, 2000, 63: 205

5. Meragelman K M, et al. J Nat Prod, 2001, 64: 389

6. Tabudravu J N, et al. J Nat Prod, 2001, 64: 813

A0194 Stelliferin C

【结构式】



【分子式】 $C_{30}H_{46}O_4$

【相对分子质量】 494

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{23} - 15.2^\circ$ (c 0.35, C_6H_6); UV(EtOH) λ_{max} : 360(sh), 357nm (22000); IR(neat) ν_{max} (cm^{-1}): 3000, 2960, 1850, 1740, 1710, 1670, 1620, 1590, 1480, 1380, 1250, 1175, 1030; EIMS m/z : 494 (M^+), 479, 425, 409, 398, 357, 43; HREIMS m/z : 494.3405 (calcd for $C_{32}H_{46}O_4$, 494.3396); 1H NMR(500MHz, C_6D_6) δ : 1.20(m, H-1), 0.96(m, H-1), 1.84(m, H-2), 1.61(m, H-2), 4.75(dd, $J = 5.0, 11.5$ Hz, H-3), 1.65(m, H-5), 1.44(m, H-6), 1.14(dd, $J = 4.4, 12.9$ Hz, H-6), 1.99(m, H-7), 1.88(m, H-7), 1.51(bd, $J = 7.7$ Hz, H-9), 2.12(bd, $J = 7.6$ Hz, H-11), 8.97(d, $J = 16.1$ Hz, H-15), 6.93(dd, $J = 11.2, 15.5$ Hz, H-16), 7.31(bd, $J = 11.2$ Hz, H-17), 1.76(s, H-18), 0.73(s, H-19), 2.06(d, $J = 1.0$ Hz, H-21), 3.26(bd, $J = 6.9$ Hz, H-23), 5.59(qt, $J = 1.4, 7.7$ Hz, H-24), 1.57(bs, H-26), 1.66(bs, H-27), 0.98(s, H-28), 0.93(s, H-29), 1.12(s, H-30), 1.82(s, AcO); ^{13}C NMR(500MHz, C_6D_6) δ : 205.6(s), 197.9(s), 178.0(s), 149.0(s), 142.8(s), 140.9(s), 139.0(d), 133.0(s), 131.4(d), 129.1(d), 127.2(d), 118.3(d), 80.6(d), 50.0(d), 46.8(d), 44.5(s), 38.3(t), 38.1(s), 37.8(t), 36.8(s), 35.5(t), 33.1(t), 29.2(q), 25.7(q), 25.5(t), 24.5(q), 22.2(q), 18.4(t), 18.1(q), 17.1(q), 15.6(q), 12.2(q)。

【来源】 海绵 *Jaspis stellifera*

【分析方法】 甲醇粗提物分配于乙酸乙酯-水溶液中, 乙酸乙酯可溶部分经硅胶柱层析 [$CHCl_3$ -MeOH (100:0)~(95:5); hexane-acetate 8:1, 6:1] 分离, Sephadex LH-20(Benzene-MeOH 1:1) 和高效液相色谱 (MeOH- H_2O 95:5) 纯化, 获得活性成分 Stelliferin C。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 L1210 和 KB 的生长。

【参考文献】 1. Tsuda M, et al. Tetrahedron, 1991, 47: 2181

2. Tsuda M, et al. Tennen Yuki Kagobutsu Toronkai Koen Yosh, 1991, 33: 441

3. Raeppl F, et al. Tetrahedron Lett, 1999, 40: 6377

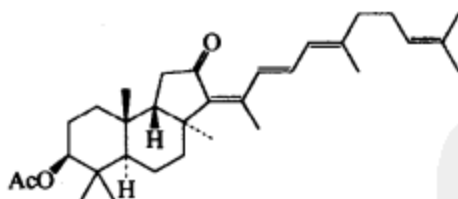
4. Oku N, et al. J Nat Prod, 2000, 63: 205

5. Meragelman K M, et al. J Nat Prod, 2001, 64: 389

6. Tabudravu J N, et al. J Nat Prod, 2001, 64: 813

A0195 Stelliferin D

【结构式】



【分子式】 $C_{32}H_{48}O_3$

【相对分子质量】 480

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{23} + 201^\circ$ (c 0.31, C_6H_6); UV(EtOH) λ_{max} : 350nm (20000); IR(neat) ν_{max} (cm^{-1}): 3450(br), 3000, 2980, 2940, 2860, 1690, 1630, 1580, 1550, 1450, 1380, 1200, 1060; EIMS m/z : 438 (M^+), 423, 395, 381, 369, 355, 315, 207, 189, 175, 147, 135; HREIMS m/z : 438.3517 (calcd for $C_{30}H_{46}O_2$, 438.3498); 1H NMR(500MHz, C_6D_6) δ : 8.81(d, $J = 15.4$ Hz, H-15), 7.03(dd, $J = 11.0, 15.4$ Hz, H-16), 6.31(brd, $J = 11.0$ Hz, H-17), 5.20(dt, $J = 1.5, 7.0$ Hz, H-24), 3.02(dd, $J = 5.5, 10.6$ Hz, H-3), 2.19~2.07(m, H-7 β , 11, 22, 23), 1.90(s, H-21), 1.77(brd, H-19), 1.72(m, H-7 α), 1.69(s, H-27), 1.60(m, H-5), 1.57(s, H-26), 1.45(m, H-9), 1.40(m, H-6), 1.39(m, H-2), 1.19(m, H-1), 1.16(m, H-6), 1.12(s, H-30), 1.04(s, H-28), 0.99(m, H-1), 0.80(s, H-29), 0.72(s, H-18), ^{13}C NMR(500MHz, C_6D_6) δ : 204.9(s), 146.4(s), 144.0(s), 141.4(s), 137.8(d), 132.5(d), 131.0(d), 125.9(d), 117.8(d), 78.8(d), 50.2(d), 46.8(d), 44.4(s), 40.5(t), 39.2(t), 38.2(s), 36.8(t), 35.7(s), 33.4(t), 29.4(q), 29.2(q), 27.0(t), 25.8(q), 24.8(q), 22.2(q), 17.7(t), 17.0(q), 16.1(q), 15.8(q), 12.0(q)。

【来源】 海绵 *Jaspis stellifera*

【分析方法】 甲醇粗提物分配于乙酸乙酯-水溶液中, 乙酸乙酯可溶部分经硅胶柱层析 [CHCl_3 -MeOH (100:0)~(95:5); hexane-acetate 8:1, 6:1] 分离, Sephadex LH-20 (Benzene-MeOH 1:1) 和高效液相色谱 (MeOH- H_2O 95:5) 纯化, 获得活性成分 Stelliferin D。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 L1210 和 KB 的生长。

【参考文献】 1. Tsuda M, et al. *Tetrahedron*, 1991, 47: 2181

2. Tsuda M, et al. *Tennen Yuki Kagobutsu Toronkai Koen Yosh*, 1991, 33: 441

3. Raepel F, et al. *Tetrahedron Lett*, 1999, 40: 6377

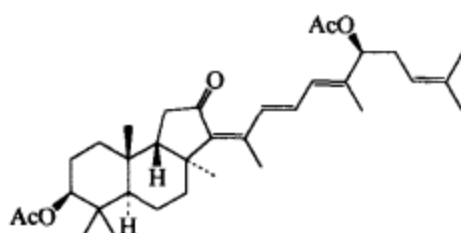
4. Oku N, et al. *J Nat Prod*, 2000, 63: 205

5. Meragelman K M, et al. *J Nat Prod*, 2001, 64: 389

6. Tabudravu J N, et al. *J Nat Prod*, 2001, 64: 813

A0196 Stelliferin E

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{34}\text{H}_{50}\text{O}_5$

【相对分子质量】 538

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} - 409^\circ$ (c 0.13, C_6H_6); UV (EtOH) λ_{max} : 338nm (24000); IR (neat) ν_{max} (cm^{-1}): 3000, 2980, 2880, 1740, 1690, 1590, 1560, 1450 (br), 1370, 1250, 1170, 760; EIMS m/z : 538 (M^+), 479, 470, 427, 409, 398, 357, 189, 43; HREIMS m/z : 538.3602 (calcd for $\text{C}_{34}\text{H}_{50}\text{O}_5$, 538.3659); ^1H NMR (500MHz, C_6D_6) δ : 8.80 (d, $J = 15.4\text{Hz}$, H-15), 6.94 (dd, $J = 11.0, 15.4\text{Hz}$, H-16), 6.53 (brd, $J = 11.0\text{Hz}$, H-17), 5.43 (t, $J = 6.6\text{Hz}$, H-22), 5.19 (tt, $J = 1.5, 7.0\text{Hz}$, H-24), 4.77 (dd, $J = 5.3, 11.7$, H-3), 2.50 (dd, $J = 5.1, 8.4\text{Hz}$, H-11), 2.02 (dd, $J = 5.1, 11.4\text{Hz}$, H-11), 1.82 (s, AcO), 1.74 (s, H-21), 1.70 (s, H-18), 1.64 (brs, H-27), 1.55 (brs, H-26), 1.03 (s, H-30), 0.97 (s, H-18), 0.93 (s, H-28), 0.73 (s, H-29)。

【来源】 海绵 *Jaspis stellifera*

【分析方法】 甲醇粗提物分配于乙酸乙酯-水溶液中, 乙酸乙酯可溶部分经硅胶柱层析 [CHCl_3 -MeOH (100:0)~(95:5); hexane-acetate 8:1, 6:1] 分离, Sephadex LH-20 (Benzene-MeOH 1:1) 和高效液相色谱 (MeOH- H_2O 95:5) 纯化, 获得活性成分 Stelliferin E。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 L1210 和 KB 的生长。

【参考文献】 1. Tsuda M, et al. *Tetrahedron*, 1991, 47: 2181

2. Tsuda M, et al. *Tennen Yuki Kagobutsu Toronkai Koen Yosh*, 1991, 33: 441

3. Raepel F, et al. *Tetrahedron Lett*, 1999, 40: 6377

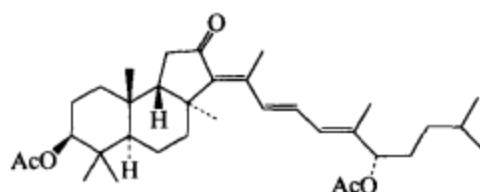
4. Oku N, et al. *J Nat Prod*, 2000, 63: 205

5. Meragelman K M, et al. *J Nat Prod*, 2001, 64: 389

6. Tabudravu J N, et al. *J Nat Prod*, 2001, 64: 813

A0197 Stelliferin F

【结构式】



【分子式】 $C_{34}H_{50}O_5$

【相对分子质量】 538

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} - 377^\circ (c\ 0.005, C_6H_6)$; UV(EtOH) λ_{max} : 338nm(24000); IR(neat) $\nu_{max}(cm^{-1})$: 3000, 2980, 2880, 1740, 1690, 1590, 1560, 1450(br), 1370, 1250, 1170, 760; EIMS m/z : 538(M^+), 479, 470, 427, 409, 398, 357, 189, 43; 1H NMR(500MHz, C_6D_6) δ : 6.94(dd, $J = 11.0, 15.4$ Hz, H-16), 6.72(dd, $J = 15.4$ Hz, H-15), 6.57(brd, $J = 11.0$ Hz, H-17), 5.43(t, $J = 6.6$ Hz, H-22), 5.19(tt, $J = 1.5, 7.0$ Hz, H-24), 4.77(dd, $J = 5.3, 11.7$, H-3), 2.63(s, H-18), 1.83(s, AcO), 1.83(s, H-21), 1.81(s, AcO), 1.64(brs, H-27), 1.55(brs, H-26), 1.12(s, H-30), 0.99(s, H-18), 0.91(s, H-28), 0.71(s, H-29)。

【来源】 海绵 *Jaspis stellifera*

【分析方法】 甲醇粗提物分配于乙酸乙酯-水溶液中, 乙酸乙酯可溶部分经硅胶柱层析 [$CHCl_3$ -MeOH (100:0)~(95:5); hexane-acetate 8:1, 6:1] 分离, Sephadex LH-20 (Benzene-MeOH 1:1) 和高效液相色谱 (MeOH- H_2O 95:5) 纯化, 获得活性成分 Stelliferin F。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 L1210 和 KB 的生长。

【参考文献】 1. Tsuda M, et al. Tetrahedron, 1991, 47: 2181

2. Tsuda M, et al. Tennen Yuki Kagobutsu Toronkai Koen Yosh, 1991, 33: 441

3. Raeppl F, et al. Tetrahedron Lett, 1999, 40: 6377

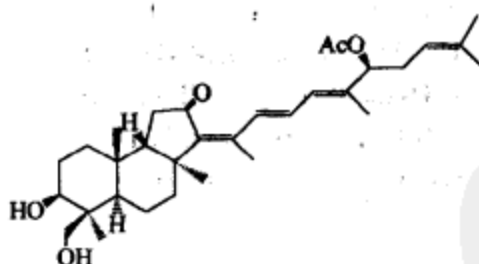
4. Oku N, et al. J Nat Prod, 2000, 63: 205

5. Meragelman K M, et al. J Nat Prod, 2001, 64: 389

6. Tabudravu J N, et al. J Nat Prod, 2001, 64: 813

A0198 Stelliferin G

【结构式】



【分子式】 $C_{32}H_{48}O_5$

【相对分子质量】 512

【理化常数及谱学数据】 亮黄色固体; $[\alpha]_D^{25} - 37^\circ (c\ 0.10, MeOH)$; UV(OH) λ_{max} : 348(4.04)nm, 232(3.77)nm; IR(KBr) $\nu_{max}(cm^{-1})$: 3398, 2925, 2856, 1727, 1679, 1566; 1H NMR(benzene- d_6) δ : 0.77(dt, $J = 12.5, 4.5$, H-1), 3.65(brd, $J = 4.5$, H-3), 1.39(dd, $J = 14.5, 8.5$, H-9), 2.03(dd, $J = 17.0, 8.5$, H-11), 2.04(dd, $J = 17.0, 14.5$, H-11), 8.73(d, $J = 15.0$, H-15), 6.84(dd, $J = 15.0, 11.0$, H-16), 6.49(d, $J = 11.0$, H-17), 1.75(s, H-18), 0.64(s, H-19), 1.75(s, H-21), 5.36(t, $J = 7.0$, H-22), 2.43(ddd, $J = 14.5, 7.0, 6.5$, H-23), 5.12(brt, $J = 6.5$, H-24), 1.58(s, H-26), 1.49(brs, H-27), 0.99(s, H-28), 3.18(d, $J = 10.7$, H-29), 3.31(brd, $J = 10.7$, H-29), 1.13(s, H-30), 1.64(s, H-Ac); ^{13}C NMR(benzene- d_6) δ : 28.8(t, C-1), 26.8(t, C-2), 71.1(d, C-3), 43.4(s, C-4), 41.6(d, C-5), 19.3(t, C-6), 38.7(t, C-7), 44.4(s, C-8), 49.9(d, C-9), 34.9(s, C-10), 36.7(t, C-11), 204.9(s, C-12), 146.6(s, C-13), 141.0(s, C-14), 133.6(d, C-15), 129.4(d, C-16), 128.0(d, C-17), 15.7(q, C-18), 23.9(q, C-19), 138.8(s, C-20), 13.5(q, C-21), 78.3(d, C-22), 32.2(t, C-23), 119.6(d, C-24), 134.1(s, C-25),

25.7(q, C-26), 17.8(q, C-27), 20.5(q, C-28), 67.4(t, C-29), 24.2(q, C-30), 20.5(q, —Ac), 168.2(s, —Ac); FABMS m/z 535 $[M+Na]^+$, 513 $[M+H]^+$; HRFABMS m/z 513.3577, calcd for $C_{32}H_{49}O_5$, 513.3580.

【来源】 海绵 *Jaspis* sp.

【分析方法】 海绵的有机层经过 Sephadex LH-20 (CH_2Cl_2 -MeOH, 1:1) 分成 7 个部分, 两个活性部位 (C 和 D) 由 HPLC (Dynamax C-18, MeOH- H_2O , 80:20) 分离得到化合物 Stelliferin G。

【生物活性与毒性】 恶性黑色素瘤 (MALME-3M) 生长抑制剂, $IC_{50}=0.23\mu g/mL$ 。

【参考文献】 1. Meragelman K M, et al. *J Nat Prod*, 2001, 64: 389

2. Tsuda M, et al. *Tetrahedron*, 1991, 47: 2181

3. Tsuda M, et al. *Tennen Yuki Kagobutsu Toronkai Koen Yosh*, 1991, 33: 441

4. Raeppl F, et al. *Tetrahedron Lett*, 1999, 40: 6377

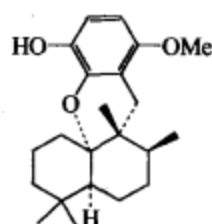
5. Oku N, et al. *J Nat Prod*, 2000, 63: 205

6. Meragelman K M, et al. *J Nat Prod*, 2001, 64: 389

7. Tabudravu J N, et al. *J Nat Prod*, 2001, 64: 813

A0199 Strongylin A

【结构式】



【分子式】 $C_{22}H_{32}O_3$

【相对分子质量】 344

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D + 72^\circ$ (c 0.023, CH_2Cl_2); UV (MeOH) λ_{max} (nm): 276(1030), 215(1370); IR (CH_2Cl_2) ν_{max} (cm^{-1}): 3520, 2900, 1600, 1450, 1370, 1312, 1294, 1250, 1170, 1080, 1030, 965, 938, 880, 840; HRMS (70eV) m/z : $[M]^+$ 344.2357 (calcd for $C_{22}H_{32}O_3$, 344.2353); 1H NMR (360MHz, C_6D_6) δ : 6.91(d, $J=8.6$ Hz, H-4'), 6.13(d, $J=8.6$ Hz, H-5'), 5.12(s, OH), 3.44(s, 6'-OMe), 3.20(d, $J=7.7$ Hz, H-14a), 2.30(d, $J=7.7$ Hz, H-14 β), 1.86(m, H_{ax}-7, H_{ax}-2), 1.66(m, H_{eq}-8), 1.43(m, H-5), 1.41(m, H_{eq}-6), 1.32(m, H_{eq}-2), 1.25(m, H_{ax}-3, H_{ax}-6), 1.12(m, H_{eq}-7, H_{eq}-3), 1.09(s, H-11abc), 0.90(d, $J=7.6$ Hz, H-15abc), 0.82(s, H-13abc), 0.65(s, H-12abc); ^{13}C NMR (90MHz, C_6D_6) δ : 151.3(s, C-6'), 139.7(s, C-2'), 139.4(s, C-3'), 83.8(s, C-10), 55.0(q, 6'-OMe), 44.0(d, C-5), 39.8(d, C-8), 38.3(s, C-9), 34.0(t, -3), 33.5(s, C-4), 32.8(t, C-14), 32.1(q, C-12), 29.5(t, C-1), 29.2(q, C-11), 27.9(t, C-7), 22.7(t, C-6), 20.5(q, C-13), 18.9(t, C-2), 17.4(q, C-15)。

【来源】 海绵 *Stronglophora hartmani*

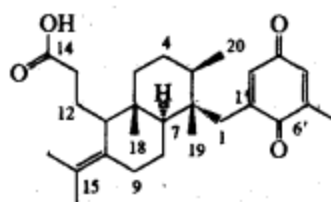
【分析方法】 乙酸乙酯提取部分经 a Kieselgel 60H stationary phase, 乙酸乙酯: 环己烷恒梯度洗脱, 正相半制备高效液相色谱法纯化获得活性成分 Strongylin A。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 P388 和流感病毒 PR-8。

【参考文献】 1. Wright A E, et al. *J Nat Prod*, 1991, 54: 1108

A0200 Stypoquinonic acid

【结构式】



【分子式】 $C_{27}H_{38}O_4$

【相对分子质量】 426

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]^{25}_D + 68.9^\circ (c\ 0.27, \text{MeOH})$; UV(OH) $\lambda_{\max}$: 255nm; IR(KBr) $\lambda_{\max}(\text{cm}^{-1})$: 3570~3240, 2930, 1655, 1440, 1385, 1030; $^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3) \delta$: 2.85(1H, d, $J = 13.9\text{Hz}$, H-1), 2.04(1H, d, $J = 13.9\text{Hz}$, H-1), 1.30(1H, dd, $J = 6.4, 11.7\text{Hz}$, H-7), 2.38(1H, q, $J = 8.7, 12.4\text{Hz}$, H-9), 2.29(1H, dd, $J = 3.8, 9.0\text{Hz}$, H-11), 1.64(3H, s, H-16), 1.66(3H, s, H-17), 1.00(3H, s, H-18), 0.89(3H, s, H-19), 0.99(3H, d, $J = 6.4\text{Hz}$, H-20), 6.63(1H, s, H-2'), 6.54(1H, s, H-4'), 2.04(3H, s, H-7'); $^{13}\text{C NMR}(\text{CDCl}_3) \delta$: 34.1(C-1), 40.7(C-2), 35.1(C-3), 25.2(C-4), 36.2(C-5), 39.0(C-6), 42.1(C-7), 22.4(C-8), 23.4(C-9), 123.7(C-10), 53.0(C-11), 24.8(C-12), 32.9(C-13), 180.3(C-14), 132.5(C-15), 20.7(C-16), 20.4(C-17), 17.6(C-18), 21.7(C-19), 15.6(C-20), 147.7(C-1'), 134.0(C-2'), 187.6(C-3'), 132.8(C-4'), 146.2(C-5'), 188.3(C-6'), 16.4(C-7'); EIMS $m/z[M^+]$ 426(22), 396(15), 353(16), 289(100); HREIMS m/z 426.2770(calcd for $C_{27}H_{38}O_4$, 426.2770)。

【来源】 海绵 *Styopodium zonale*

【分析方法】 海绵的二氯甲烷提取物经快速硅胶柱层析, 正己烷: 乙酸乙酯梯度洗脱。活性部位经正相 HPLC 纯化, 正己烷: 丙酮 (85: 15)~(55: 45) 洗脱得到化合物 styloquinonic acid。

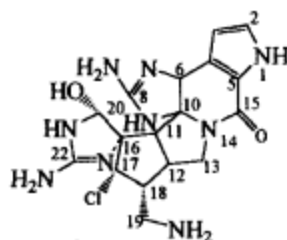
【生物活性与毒性】 该化合物能抑制酪氨酸激酶 (p56), 其 IC_{50} 值为 $79.7\mu\text{g/mL}$ 。同时对于 *Bacillus megaterium* 和 *Escherichia coli* 还具有微弱的抗菌作用。

【参考文献】 1. Wessels M, et al. J Nat Prod, 1999, 62: 927

2. Dorta E, et al. J Nat Prod, 2002, 65: 1727

A0201 Styloguanidine

【结构式】



【分子式】 $C_{17}H_{22}N_9O_2Cl$

【相对分子质量】 419

【理化常数及谱学数据】 HRFABMS m/z 420.1665 $[M+H]^+$; UV(CH₃OH) $\lambda_{\max}$: 273nm; $^1\text{H NMR}(\text{D}_2\text{O}) \delta$: 7.20(H, d, $J = 2.7\text{Hz}$, H-2), 6.31(H, d, $J = 2.7\text{Hz}$, H-3), 5.83(H, s, H-6), 3.13(H, d, $J = 14.2\text{Hz}$, H-11), 2.65(H, m, H-12), 4.04(H, dd, $J = 10.4, 7.2\text{Hz}$, H-13a), 4.45(H, t, $J = 10.4\text{Hz}$, H-13b), 4.45(H, d, $J = 8.3\text{Hz}$, H-17), 2.55(H, m, H-18), 3.44(H, dd, $J = 14.0, 6.7\text{Hz}$, H-19a), 3.37(H, dd, $J = 14.0, 6.6\text{Hz}$, H-19b), 6.12(H, s, H-20); $^{13}\text{C NMR}(\text{D}_2\text{O})$: 129.2(C-1), 109.1(C-3), 121.7(C-4), 121.4(C-5), 58.0(C-6), 161.3(C-8), 83.9(C-10), 58.2(C-11), 43.3(C-12), 46.9(C-13), 159.2(C-15), 73.5(C-16), 75.4(C-17), 50.1(C-18), 43.4(C-19), 85.3(C-20), 159.5(C-22)。

【来源】 海绵 *Stylorella aurantium*

【分析方法】 海绵的乙醇-水提取物上活性炭柱, 先用水, 然后用乙醇-水-乙酸 (50: 50: 1) 洗脱, 后者的洗脱部分上生物胶柱, 0.1% 乙酸洗脱, 最后用反相 HPLC (乙腈-水-TFA, 10: 90: 0.1) 分离得到纯品。结构通过 (HR) MS、UV 和 NMR ($^1\text{H NMR}$, $^{13}\text{C NMR}$ 和 2D-NMR) 等方法确定。

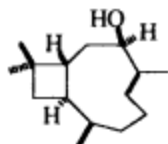
【生物活性与毒性】 在 $2.5\mu\text{g/disk}$ 剂量下能抑制 *Schwannella* sp. 的壳多糖酶。

【参考文献】 1. Kato T, et al. Tetrahedron Lett, 1995, 36 (12): 2133

2. Overman L E, et al. J Am Chem Soc, 1997, 119: 7159

A0202 Suberosol C

【结构式】

【分子式】 $C_{15}H_{24}O$

【相对分子质量】 220

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{29} - 67.9^\circ (c 0.14, CHCl_3)$; IR(neat) $\nu_{max} (cm^{-1})$: 3433, 1633, 1456, 1385, 1370, 1044; 1H NMR($CDCl_3$, 300MHz): 4.09(dd, $J = 5.3, 9.9$, H-3), 5.44(brdd, $J = 5.0, 8.8$, H-5), 2.38(q, $J = 10.5$, H-9), 0.97(3H, s, 12-Me), 0.99(3H, s, 13-Me), 1.64(3H, s, 14-Me), 4.84(s, H-15), 4.95(s, H-15); ^{13}C NMR($CDCl_3$, 75MHz): 51.0(d, C-1), 37.7(t, C-2), 78.7(d, C-3), 137.2(s, C-4), 123.6(d, C-5), 27.8(t, C-6), 34.3(t, C-7), 154.2(s, C-8), 47.1(d, C-9), 40.1(t, C-10), 33.0(s, C-11), 30.0(q, C-12), 22.8(q, C-13), 10.8(q, C-14), 112.2(t, C-15); EIMS(70eV) m/z 220[1.2, (M)⁺], 205[4.1, (M-Me)⁺], 202[3.1, (M-H₂O)⁺], 187[6.6, (M-Me-H₂O)⁺]; HREIMS m/z 220.1821(calcd for $C_{15}H_{24}O$, 220.1828)。

【来源】 海绵 *Subergorgia suberosa*

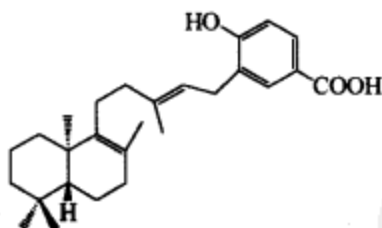
【分析方法】 海绵的 EtOAc 提取物上硅胶 G60 柱分段, 以正己烷-乙酸乙酯梯度洗脱, 5% EtOAc 洗脱的第 5 部分经反复硅胶柱层析, 最后由正相 HPLC 纯化, EtOAc- CH_2Cl_2 洗脱, 得到化合物 Suberosol C。

【生物活性与毒性】 体外试验显示较强的细胞毒活性, 对 P-388、A549 和 HT-29 的 ED_{50} 值分别为 2.1 $\mu g/mL$ 、5.6 $\mu g/mL$ 和 2.3 $\mu g/mL$ 。

【参考文献】 1. Wang G H, et al. J Nat Prod, 2002, 65: 887

A0203 (一)-(5R,10R)-Subersic acid

【结构式】

【分子式】 $C_{27}H_{38}O_3$

【相对分子质量】 410

【理化常数及谱学数据】 黄色油状物; $[\alpha]_D - 46^\circ (c 0.5, CHCl_3)$; 1H NMR($CDCl_3$) δ : 7.91(s, 2H, H-21 and H-19), 6.86(d, $J = 10Hz$, H-18), 5.36(t, $J = 5Hz$, H-14), 3.42(d, $J = 10Hz$, H-3, H-15), 2.14(m, 2-H, H-11), 2.12(m, 2H, H-12), 2.09(m, 2H, H-7), 1.83(m, H-1), 1.83(s, H-3, H-23), 1.62(m, 4-H, H-6, H-2), 1.58(s, H-3, H-24), 1.17(m, H-3'), 1.14(m, 2H, H-1', H-5), 0.95(s, H-3, H-25), 0.89(s, H-3, H-26), 0.84(s, H-3, H-27); ^{13}C NMR($CDCl_3$) δ : 171.7(s, C-22), 159.8(s, C-17), 141.0(s, C-13), 132.9(d, C-21), 130.8(d, C-19), 127.0(s, C-16), 126.3(s, C-8), 121.9(s, C-20), 120.3(d, C-14), 116.0(d, C-18), 52.1(s, C-5), 42.1(t, C-3), 40.7(t, C-12), 39.3(s, C-10), 37.3(t, C-1), 33.9(t, C-7), 33.6(s, C-4), 33.6(q, C-26), 29.9(t, C-15), 27.3(t, C-11), 21.9(q, C-27), 20.4(q, C-25), 19.8(q, C-24), 19.3(t, C-2), 19.3(t, C-6), 16.7(q, C-23); HREIMS m/z 409.2743[M-H]⁻ (calcd for $C_{27}H_{38}O_3$)。

【来源】 海绵 *Suberea* sp.

【分析方法】 海绵的乙醇提取物以有机溶剂萃取, 有机层经 Biotage 硅胶柱层析后, 以 RPHPLC 纯化得

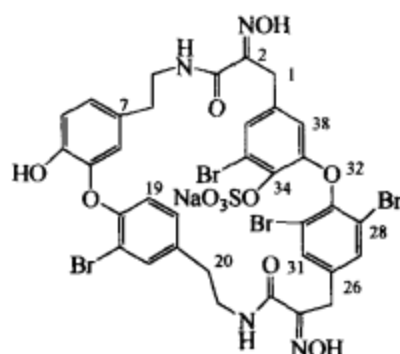
到化合物 (一)-(5*R*,10*R*)-Subersic acid。

【生物活性与毒性】 作为人 15-lipoxygenase (15-HLO) 抑制剂的 IC_{50} 值为 $15\mu\text{mol/L}$ 。

【参考文献】 1. Carroll J, et al. J Org Chem, 2001, 66: 6847

A0204 34-Sulfatobastadin 13

【结构式】



【分子式】 $C_{34}H_{27}Br_4N_4O_{11}SNa$

【相对分子质量】 1042 ($C_{34}H_{27}^{79}Br_2^{81}Br_2N_4O_{11}SNa$)

【理化常数及谱学数据】 HRFABMS(−) m/z 1018.8064 [$M - Na$][−], cal. for $C_{34}H_{27}^{79}Br_2^{81}Br_2N_4O_{11}SNa$; UV(MeOH) λ_{max} (nm): 280, 204; ^1H NMR (360 MHz, DMSO) δ : 3.41 (2H, s, H-1), 7.72 (H, t, $J = 5.8\text{ Hz}$, H-4), 3.22 (2H, dt, $J = 5.8, 7.0\text{ Hz}$, H-5), 2.54 (2H, t, $J = 7.0\text{ Hz}$, H-6), 6.50 (H, d, $J = 2.0\text{ Hz}$, H-8), 6.85 (H, d, $J = 8.5\text{ Hz}$, H-11), 6.81 (H, dd, $J = 2.0, 8.5\text{ Hz}$, H-6), 7.47 (H, d, $J = 2.0\text{ Hz}$, H-16), 7.00 (H, dd, $J = 2.0, 8.3\text{ Hz}$, H-18), 6.57 (H, d, $J = 8.3\text{ Hz}$, H-19), 2.66 (2H, t, $J = 6.5\text{ Hz}$, H-20), 3.37 (2H, dt, $J = 6.5, 6.3\text{ Hz}$, H-21), 8.10 (H, t, $J = 6.3\text{ Hz}$, H-22), 3.69 (2H, s, H-25), 7.42 (H, s, H-27), 7.42 (H, s, H-31), 6.93 (H, s, H-36), 5.98 (H, s, H-38), 11.68 ($N^2\text{—OH}$), 11.88 ($N^{24}\text{—OH}$), 9.35 (10-OH); ^{13}C NMR (90.5 MHz, DMSO): 27.9 (C-1), 150.7 (C-2), 162.6 (C-3), 40.3 (C-5), 33.8 (C-6), 130.7 (C-7), 120.1 (C-8), 143.0 (C-9), 146.7 (C-10), 117.0 (C-11), 125.0 (C-12), 152.3 (C-14), 111.9 (C-15), 133.1 (C-16), 135.4 (C-17), 129.3 (C-18), 117.9 (C-19), 33.9 (C-20), 39.8 (C-21), 163.1 (C-23), 151.3 (C-24), 28.4 (C-25), 137.4 (C-26), 133.1 (C-27), 117.2 (C-28), 146.6 (C-29), 117.2 (C-30), 133.1 (C-31), 150.3 (C-33), 138.6 (C-34), 119.1 (C-35), 125.9 (C-36), 133.6 (C-27), 113.5 (C-38)。

【来源】 海绵 *Ianthella* sp.

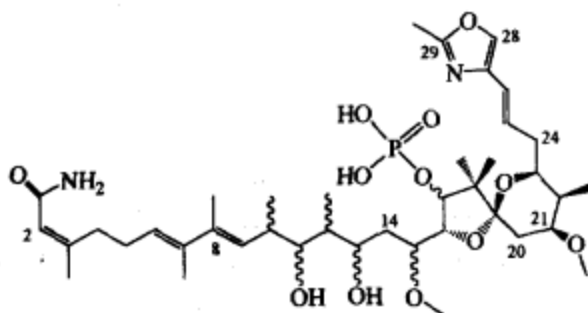
【分析方法】 海绵的乙醇提取物在正丁醇和水间分配, 正丁醇层 Sephadex LH-20 (甲醇), 馏分再用硅胶柱 (乙酸乙酯-甲醇) 纯化得到。结构通过 (HR) MS、UV 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 抑制猪胸部主动脉中 ET-1 和 ET_A 受体的结合, $IC_{50} = 39\mu\text{mol/L} \pm 3\mu\text{mol/L}$ 。

【参考文献】 1. Gulavita N K, et al. J Nat Prod, 1993, 56: 1613

A0205 Swinhoeiamide A

【结构式】



【分子式】 $C_{40}H_{65}N_2O_{12}P$

【相对分子质量】 797

【理化常数及谱学数据】 白色粉末状固体; $[\alpha]_D^{20} - 21.6^\circ (c 0.35, EtOH)$; FABMS pos m/z 835 $[M + K]^+$, neg m/z 795 $[M - H]^-$; HRFABMS m/z 795.4326 $[M - H]^-$ (calcd for $C_{40}H_{64}N_2O_{12}P$, 795.4197); UV(MeOH): 223nm; IR(KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3444, 2931, 1682, 1442, 1383, 1209, 1142; CD(EtOH) λ (nm) 200(0), 207(-4.0), 210(-3.0), 230(-9.0), 253(+1.0), 259(+1.0); 1H NMR δ : 5.78(d, 1.5, H-2), 1.91(d, 1.5, 3-Me), 2.77(m, H-4), 2.36(q, 7.2, H-5), 5.56(dt, 7.2, 1.2, H-6), 1.83(d, 1.2, 7-Me), 1.81(s, 8-Me), 5.70(d, 9.7, H-9), 2.71(m, H-10), 1.07(d, 6.9, 10-Me), 3.45(dd, 9.6, 2.5, H-11), 1.63(m, H-12), 0.77(d, 6.9, 12-Me), 3.88(ddd, 11.0, 6.0, 1.8, H-13), 1.93(m, H-14), 3.82(brt, 9.6, H-15), 3.53(s, 15-OMe), 4.10(dd, 9.6, 4.4, H-16), 4.42(dd, 10.4, 4.4, H-17), 1.30(s, 18-Me), 1.03(s, 18-Me), 1.70(dd, 12.2, 4.6, H-20), 3.75("dt", 11.8, 4.6, H-21), 3.37(s, 21-OMe), 2.10(m, H-22), 0.85(d, 6.9, 22-Me), 3.99(m, H-23), 2.47, 2.16(m, H-24), 6.75(ddd, 15.9, 10.1, 5.1, H-25), 6.27(bdd, 15.9, H-26), 7.76(bs, H-28), 2.50(s, 29-Me); ^{13}C NMR δ : 119.5(d, C-2), 156.3(s, C-3), 25.1(q, 3-Me), 33.8(t, C-4), 28.3(t, C-5), 125.8(d, C-6), 138.4(s, C-7), 137.1(s, C-8), 14.4(q, 8-Me), 127.5(d, C-9), 36.8(d, C-10), 18.9(q, 10-Me), 79.8(d, C-11), 44.1(d, C-12), 12.1(q, 12-Me), 72.3(d, C-13), 36.1(t, C-14), 80.3(d, C-15), 60.9(q, 15-OMe), 85.7(d, C-16), 84.2(d, C-17), 51.2(s, C-18), 18.2(q, 18-Me), 23.2(q, 18-Me 23), 109.9(s, C-19), 31.1(t, C-20), 79.0(d, C-21), 55.4(q, 21-OMe), 35.5(d, C-22), 4.4(q, 22-Me), 72.8(d, C-23), 37.2(t, C-24), 132.5(d, C-25), 119.5(d, C-26), 139.7(s, C-27), 136.1(d, C-28), 164.3(s, C-29), 13.5(q, 29-Me)。

【来源】 海绵 *Theonella swinhoei*

【分析方法】 海绵用甲醇提取, 提取物以正丁醇和水分配, 正丁醇层上 Sephadex LH20 柱, 用甲醇洗脱, 然后分别用正相和反相 HPLC 纯化, 洗脱剂分别采用 CH_2Cl_2 -MeOH (70 : 30) 和 MeOH- H_2O -TFA (80 : 20 : 0.1) 得到化合物 Swinhoeiamide A。

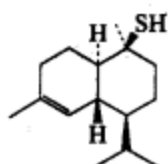
【生物活性与毒性】 抗真菌 *Candida albicans* 和 *Aspergillus fumigatus* 的 MIC 值分别为 1.2 $\mu g/mL$ 和 1.0 $\mu g/mL$ 。

【参考文献】 1. Edrada R A, et al. J Nat Prod, 2002, 65: 1168

2. Proksch P, et al. Pure Appl Chem, 2003, 75: 343

A0206 T-cadinthiol

【结构式】



【分子式】 $C_{15}H_{26}S$

【相对分子质量】 238

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} - 24.3^\circ (c 1.06, CHCl_3)$; IR(KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 2900, 1450, 1375; 1H NMR(300MHz, $CDCl_3$) δ : 5.51(1H, brs, H-5), 2.17(1H, m, H-12), 2.01(1H, m, H-6), 1.98(2H, m, H-3), 1.83(1H, m, H-2a), 1.83(1H, m, H-9a), 1.67(3H, s, H-11), 1.52(1H, m, H-8a), 1.50(1H, m, H-19b), 1.46(1H, m, H-8b), 1.45(1H, m, H-2b), 1.40(3H, s, H-15), 1.08(1H, ddd, 11.1, 9.9, 2.4, H-1), 0.99(1H, m, H-7), 0.91(3H, d, 6.9, H-14), 0.81(3H, d, 6.9, H-13); ^{13}C NMR(75.5MHz, $CDCl_3$) δ : 49.8(C-1), 24.3(C-2), 30.7(C-3), 134.3(C-4), 122.3(C-5), 38.4(C-6), 46.8(C-7), 20.8(C-8), 43.5(C-9), 49.0(C-10), 23.8(C-11), 26.2(C-12), 15.1(C-13), 21.4(C-14), 33.0(C-15); EIMS m/z (%RA) 238 (M^+ , >1), 204(65), 189(15), 161(100), 134(15), 119(15), 105(22); HREIMS m/z 238.1735 (M^+) ($C_{15}H_{26}S$, mmu error $\Delta 0.2$)^[1]。

【来源】 海绵 *Cymbastela hooperi*^[1]

【分析方法】 样品 CH_2Cl_2 提取, 减压柱层析 (梯度 P. ether-EtOAc), 反复正相 HPLC (hexane) 得纯化合物^[1,2]。

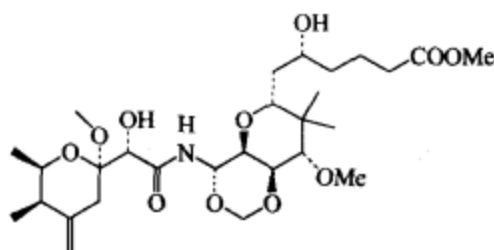
【生物活性与毒性】 显示了弱的抗原生动物的活性, 对培养的 *Plasmodium falciparum*, clone D6 (IC_{50}) 3.6 $\mu\text{g}/\text{mL}$, 青蒿素对照 IC_{50} 0.4 ng/mL ^[1]。

【参考文献】 1. Koenig G M, et al. J Org Chem, 1997, 62: 3837

2. Koenig G M, et al. J Org Chem, 1996, 61: 3259

A0207 Theopederin B

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{28}\text{H}_{47}\text{NO}_{11}$

【相对分子质量】 573

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_{\text{D}}^{25} + 49.1^\circ$ (c 0.06, CHCl_3); IR (film) ν_{max} (cm^{-1}): 3400, 2975, 1730, 1680, 1510, 1110, 1080, 1030; HRFABMS m/z : 542.2982 ($\text{M}^+ - \text{CH}_3\text{O}$, $\text{C}_{27}\text{H}_{44}\text{NO}_{10}$); ^1H NMR (CDCl_3) δ : 4.01 (dq, $J = 2.8, 6.6\text{Hz}$, H-2), 1.21 (d, $J = 6.6\text{Hz}$, 2-Me), 2.25 (dq, $J = 2.8, 7.1\text{Hz}$, H-3), 1.01 (d, $J = 7.1\text{Hz}$, 3-Me), 4.85 (bs, 4- CH_2), 4.75 (bs, 4- CH_2), 2.41 (d, $J = 14.4\text{Hz}$, H-5), 2.38 (bd, $J = 14.4$, H-5), 3.31 (s, 6-OMe), 4.30 (d, $J = 2.3\text{Hz}$, H-7), 3.93 (d, $J = 2.3\text{Hz}$, 7-OH), 7.46 (d, $J = 9.7\text{Hz}$, 9-NH), 5.89 (dd, $J = 9.7, 9.7\text{Hz}$, H-10), 5.15 (d, $J = 6.9\text{Hz}$, 10- OCH_2), 4.88 (d, $J = 6.9\text{Hz}$, 10- OCH_2), 3.86 (dd, $J = 9.7, 6.7\text{Hz}$, H-11), 4.23 (dd, $J = 10.3, 6.7\text{Hz}$, H-12), 3.47 (d, $J = 10.3\text{Hz}$, H-13), 3.57 (s, 13-OMe), 0.98 (s, 14- Me_{eq}), 0.88 (s, 14- Me_{ax}), 3.65 (dd, $J = 9.3, 2.6\text{Hz}$, H-15), 1.54 (dt, $J = 14.7, 2.6\text{Hz}$, H-16), 1.46 (dt, $J = 14.7, 9.3\text{Hz}$, H-16), 3.65 (ddt, $J = 9.3, 2.6, 7.6\text{Hz}$, H-17), 1.40 (m, H-18), 1.40 (m, H-18), 1.73 (ddt, $J = 14.1, 7.6, 7.5\text{Hz}$, H-19), 1.63 (ddt, $J = 14.1, 7.6, 7.5\text{Hz}$, H-19), 2.32 (t, $J = 7.5\text{Hz}$, H-20), 3.66 (s, 21-OMe); ^{13}C NMR (CDCl_3) δ : 69.6 (d, C-2), 17.9 (q, 2-Me), 41.3 (d, C-3), 12.1 (q, 3-Me), 145.5 (s, C-4), 110.6 (t, 4- CH_2), 33.7 (t, C-5), 99.8 (s, C-6), 48.9 (q, 6-OMe), 72.7 (d, C-7), 171.8 (s, C-8), 73.8 (d, C-10), 86.9 (t, 10- OCH_2), 71.3 (bd, C-11), 74.4 (d, C-12), 79.1 (d, C-13), 61.8 (q, 13-OMe), 41.7 (s, C-14), 23.1 (q, 14- Me_{eq}), 13.6 (bq, 14- Me_{ax}), 80.3 (d, C-15), 35.5 (t, C-16), 71.0 (d, C-17), 36.5 (t, C-18), 20.8 (t, C-19), 33.8 (t, C-20), 174.2 (s, C-21), 51.5 (q, 21-OMe)。

【来源】 海绵 *Theonella* sp.

【分析方法】 氯仿层经反相柱层析甲醇-水 (7:3) 处理, 得到的活性部位通过硅胶柱层析和反相高效液相色谱法分离, 纯化, 获得 Theopederin B。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 P388 的生长。

【参考文献】 1. Fusetani N, et al. J Org Chem, 1992, 57: 3828

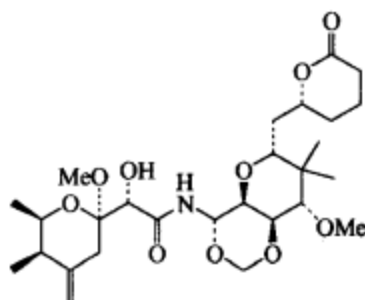
2. Toyota M, et al. Heterocycles, 1995, 40: 115

3. Toyota M, et al. Heterocycles, 1998, 47: 675

4. Bewley C A, et al. Angew Chem Int Ed Eng, 1998, 37: 2162

A0208 Theopederin C

【结构式】



【分子式】 $C_{27}H_{43}NO_{10}$

【相对分子质量】 541

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D + 172.1^\circ (c\ 0.03, CHCl_3)$; IR (film) ν_{max} (cm^{-1}): 3350, 2950, 1730, 1680, 1510, 1460, 1375, 1240, 1185, 1120, 1100, 1070, 1030, 1010, 920, 875, 755; HRFABMS m/z : 542.2963 (MH^+ , $C_{27}H_{44}NO_{10}$); 1H NMR ($CDCl_3$) δ : 4.03 (dq, $J = 2.8, 6.6$ Hz, H-2), 1.19 (d, $J = 6.6$ Hz, 2-Me), 2.25 (dq, $J = 2.8, 6.5$ Hz, H-3), 0.99 (d, $J = 6.5$ Hz, 3-Me), 4.86 (bs, 4-CH₂), 4.73 (bs, 4-CH₂), 2.32 (d, $J = 13.8$ Hz, H-5), 2.17 (bd, $J = 13.8$ Hz, H-5), 3.30 (s, 6-OMe), 4.24 (d, $J = 2.9$ Hz, H-7), 3.96 (d, $J = 2.9$ Hz, 7-OH), 7.52 (d, $J = 9.5$ Hz, 9-NH), 5.77 (dd, $J = 9.5, 9.5$ Hz, H-10), 5.10 (d, $J = 7.1$ Hz, 10-OCH₂), 4.85 (d, $J = 7.1$ Hz, 10-OCH₂), 3.78 (dd, $J = 9.5, 6.6$ Hz, H-11), 4.19 (dd, $J = 9.4, 6.6$ Hz, H-12), 3.40 (d, $J = 9.4$ Hz, H-13), 3.54 (s, 13-OMe), 1.00 (s, 14-Me_{eq}), 0.86 (s, 14-Me_{ax}), 3.40 (d, $J = 9.4$ Hz, H-15), 1.88 (m, H-16), 1.59 (m, H-16), 4.22 (m, H-17), 2.04 (m, H-18), 1.35 (m, H-18), 1.86 (m, H-19), 1.78 (m, H-19), 2.48 (ddd, $J = 17.5, 7.3, 5.9$ Hz, H-20), 2.40 (ddd, $J = 17.5, 0.9, 7.8$ Hz, H-20); ^{13}C NMR ($CDCl_3$) δ : 69.6 (d, C-2), 18.0 (q, 2-Me), 41.2 (d, C-3), 12.0 (q, 3-Me), 144.5 (s, C-4), 111.1 (t, 4-CH₂), 33.6 (t, C-5), 99.3 (s, C-6), 48.8 (q, 6-OMe), 71.6 (d, C-7), 172.0 (s, C-8), 73.7 (d, C-10), 86.3 (t, 10-OCH₂), 70.3 (bd, C-11), 74.0 (d, C-12), 79.3 (d, C-13), 61.6 (q, 13-OMe), 40.8 (s, C-14), 23.5 (q, 14-Me_{eq}), 14.0 (bq, 14-Me_{ax}), 75.7 (d, C-15), 35.8 (t, C-16), 78.3 (d, C-17), 27.2 (t, C-18), 18.2 (t, C-19), 29.2 (t, C-20), 171.9 (s, C-21).

【来源】 海绵 *Theonella* sp.

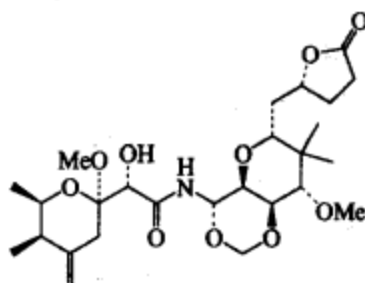
【分析方法】 氯仿层经反相柱层析甲醇-水 (7:3) 处理, 得到的活性部位通过硅胶柱层析和反相高效液相色谱法分离, 纯化, 获得 Theopederin C.

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 P388 的生长。

- 【参考文献】 1. Fusetani N, et al. J Org Chem, 1992, 57: 3828
2. Toyota M, et al. Heterocycles, 1995, 40: 115
3. Toyota M, et al. Heterocycles, 1998, 47: 675
4. Bewley C A, et al. Angew Chem Int Ed Eng, 1998, 37: 2162

A0209 Theopederin D

【结构式】



【分子式】 $C_{26}H_{41}NO_{10}$

【相对分子质量】 527

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D + 80.0^\circ (c\ 0.04, CHCl_3)$; IR (film) ν_{max} (cm^{-1}): 3300, 2900, 1765, 1675,

1515, 1175, 1100, 1065, 1025, 910, 870, 750; HRFABMS m/z : 496. 2552 ($M^+ - CH_3O$, $C_{25}H_{38}NO_9$); 1H NMR($CDCl_3$) δ : 4.03(dq, $J = 2.7, 6.5$ Hz, H-2), 1.20(d, $J = 6.5$ Hz, 2-Me), 2.26(dq, $J = 2.7, 7.1$ Hz, H-3), 1.01(d, $J = 7.1$ Hz, 3-Me), 4.86(bs 4- CH_2), 4.74(bs, 4- CH_2), 2.35(d, $J = 14.0$ Hz, H-5), 2.21(bd, $J = 14.0$, H-5), 3.30(s, 6-OMe), 4.27(d, $J = 3.1$ Hz, H-7), 4.08(d, $J = 3.1$ Hz, 7-OH), 7.52(d, $J = 9.4$ Hz, 9-NH), 5.81(dd, $J = 9.4, 9.4$ Hz, H-10), 5.13(d, $J = 7.0$ Hz, 10- OCH_2), 4.87(d, $J = 7.0$ Hz, 10- OCH_2), 3.82(dd, $J = 9.4, 6.4$ Hz, H-11), 4.21(dd, $J = 10.2, 6.4$ Hz, H-12), 3.44(d, $J = 10.2$ Hz, H-13), 3.56(s, 13-OMe), 1.02(s, 14- Me_{eq}), 0.88(s, 14- Me_{ax}), 3.42(d, $J = 10.2$ Hz, H-15), 1.94(m, H-16), 1.59(dd, $J = 14.2, 8.3$ Hz, H-16), 4.45(ddd, $J = 14.2, 8.4, 6.0$ Hz, H-17), 2.40(m, H-18), 1.75(m, H-18), 2.51(ddd, $J = 17.6, 10.0, 3.8$ Hz, H-19), 2.45(dd, $J = 17.6, 11.1$ Hz, H-19); ^{13}C NMR($CDCl_3$) δ : 69.4(d, C-2), 17.4(q, 2-Me), 41.1(d, C-3), 11.5(q, 3-Me), 144.6(s, C-4), 111.0(t, 4- CH_2), 32.9(t, C-5), 99.7(s, C-6), 48.2(q, 6-OMe), 71.5(d, C-7), 171.7(s, C-8), 73.4(d, C-10), 86.4(t, 10- OCH_2), 70.0(bd, C-11), 73.9(d, C-12), 79.2(d, C-13), 61.4(q, 13-OMe), 41.1(s, C-14), 23.0(q, 14- Me_{eq}), 13.5(bq, 14- Me_{ax}), 75.8(d, C-15), 34.6(t, C-16), 79.1(d, C-17), 27.6(t, C-18), 28.1(t, C-19), 176.7(s, C-20).

【来源】 海绵 *Theonella* sp.

【分析方法】 氯仿层经反相柱层析甲醇-水 (7:3) 处理, 得到的活性部位通过硅胶柱层析和反相高效液相色谱法分离, 纯化, 获得 Theopederin D.

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 P388 的生长.

【参考文献】 1. Fusetani N, et al. J Org Chem, 1992, 57: 3828

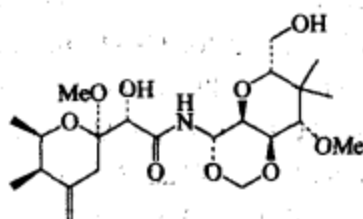
2. Toyota M, et al. Heterocycles, 1995, 40: 115

3. Toyota M, et al. Heterocycles, 1998, 47: 675

4. Bewley C A, et al. Angew Chem Int Ed Eng, 1998, 37: 2162

A0210 Theopederin E

【结构式】



【分子式】 $C_{22}H_{37}NO_9$

【相对分子质量】 459

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D + 136.7^\circ$ (c 0.03, $CHCl_3$); IR(film) ν_{max} (cm^{-1}): 3350, 2950, 1680, 1525, 1460, 1380, 1220, 1190, 1170, 1130, 1110, 1070, 1035, 910, 875, 845, 795, 760; HRFABMS m/z : 428. 2306 ($M^+ - CH_3O$, $C_{21}H_{34}NO_8$); 1H NMR($CDCl_3$) δ : 4.06(dq, $J = 2.9, 6.6$ Hz, H-2), 1.21(d, $J = 6.6$ Hz, 2-Me), 2.27(dq, $J = 2.9, 7.1$ Hz, H-3), 1.03(d, $J = 7.1$ Hz, 3-Me), 4.86(dd, $J = 2.0, 2.0$ Hz, 4- CH_2), 4.76(dd, $J = 2.0, 2.0$ Hz, 4- CH_2), 2.37(d, $J = 14.1$ Hz, H-5), 2.21(ddd, $J = 14.1, 2.0, 2.0$ Hz, H-5), 3.33(s, 6-OMe), 4.28(d, $J = 2.8$ Hz, H-7), 3.77(d, $J = 2.8$ Hz, 7-OH), 7.44(d, $J = 9.1$ Hz, 9-NH), 5.82(dd, $J = 9.1, 9.1$ Hz, H-10), 5.13(d, $J = 6.9$ Hz, 10- OCH_2), 4.91(d, $J = 6.9$ Hz, 10- OCH_2), 3.85(dd, $J = 9.1, 6.5$ Hz, H-11), 4.21(dd, $J = 9.8, 6.5$ Hz, H-12), 3.42(d, $J = 9.8$ Hz, H-13), 3.57(s, 13-OMe), 1.09(s, 14- Me_{eq}), 0.87(s, 14- Me_{ax}), 3.59(dd, $J = 7.7, 2.4$ Hz, H-15), 3.64(ddd, $J = 11.6, 7.4, 2.4$ Hz, H-16), 3.51(ddd, $J = 11.6, 7.7, 4.5$ Hz, H-16), 1.86(dd, $J = 7.4, 4.5$ Hz, 16-OH); ^{13}C NMR($CDCl_3$) δ : 69.3(d, C-2), 18.3(q, 2-Me), 41.2(d, C-3), 12.3(q, 3-Me), 144.8(s, C-4), 110.9(t, 4- CH_2), 33.0(t, C-5), 99.7(s, C-6), 48.8(q, 6-OMe), 71.0(d, C-7), 171.7(s, C-8), 74.6(d, C-10), 86.7(t, 10- OCH_2), 71.0(bd, C-11), 74.2(d, C-12), 79.4(d, C-13), 61.3(q, 13-OMe), 39.6(s, C-14), 23.4(q, 14- Me_{eq}), 14.6(bq, 14- Me_{ax}), 80.2(d, C-15), 61.5(t, C-16).

【来源】 海绵 *Theonella* sp.

【分析方法】 氯仿层经反相柱层析甲醇-水 (7:3) 处理, 得到的活性部位通过硅胶柱层析和反相高效液相色谱法分离, 纯化, 获得 Theopederin E。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 P388 的生长。

【参考文献】 1. Fusetani N, et al. J Org Chem, 1992, 57: 3828

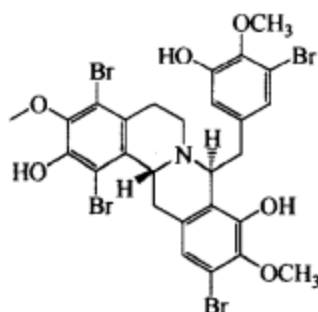
2. Toyota M, et al. Heterocycles, 1995, 40: 115

3. Toyota M, et al. Heterocycles, 1998, 47: 675

4. Bowley C A, et al. Angew Chem Int Ed Eng, 1998, 37: 2162

A0211 Theoneberine

【结构式】



【分子式】 $C_{27}H_{26}Br_2NO_6$

【相对分子质量】 780

【理化常数及谱学数据】 无色固体; mp 128°C; $[\alpha]_D^{20} - 53^\circ$ (c 0.6, $CHCl_3$); UV λ_{max} (CH_3OH): 284nm (5300), (0.01mol/L HCl-MeOH) 286nm (5300), (0.01mol/L NaOH-MeOH) 300nm (6800); IR (KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3450, 2920, 1565, 1480, 1455, 1420, 1410, 1240, 995; IR ($CHCl_3$) ν_{max} (cm^{-1}): 3675, 3610, 3000, 1520, 1420; FABMS m/z : 784, 780, 778, 776 ($M+H$)⁺, 566, 564, 562, 560 ($M-C_8H_8Br_2O$)⁺, 338, 336, 334; HRFABMS m/z : 779.8447 ($M+H$)⁺, calcd for $C_{27}H_{26}Br_2NO_6$ 779.8452; ¹H NMR (400MHz, C_6D_6) δ : 2.73 (ddd, $J = 16.1, 11.2, 7.3$, H-5a), 2.49 (dd, $J = 16.1, 3.9$, H-5 β), 2.30 (dd, $J = 11.2, 7.3$, H-6a), 2.66 (td, $J = 11.2, 3.9$, H-6 β), 4.16 (dd, $J = 9.8, 2.4$, H-8), 6.76 (s, H-12), 2.33 (dd, $J = 17.6, 11.7$, H-13a), 2.95 (dd, $J = dd, J = 17.6, 4.9$, H-13 β), 4.72 (dd, $J = 11.7, 4.9$, H-14), 2.86 (dd, $J = 14.2, 9.8$, H-15a), 2.98 (dd, $J = 14.2, 2.4$, H-15b), 7.14 (d, $J = 2.0$, H-17), 7.34 (d, $J = 2.0$, H-21), 3.36 (s, H-22), 3.46 (s, H-23), 3.32 (s, H-24), 5.38 (brs, 3OH); ¹³C NMR (400MHz, C_6D_6) δ : 109.4 (s, C-1), 145.8 (s, C-2), 144.1 (s, C-3), 119.4 (s, C-4), 127.8 (s, C-4a), 30.7 (t, C-5), 45.4 (t, C-6), 63.0 (d, C-8), 124.2 (s, C-8a), 147.3 (s, C-9), 142.6 (s, C-10), 113.8 (s, C-11), 124.3 (d, C-12), 131.7 (s, C-12a), 25.8 (t, C-13), 50.7 (d, C-14), 136.0 (s, C-14a), 39.6 (t, C-15), 140.0 (s, C-16), 116.4 (d, C-17), 150.3 (s, C-18), 143.3 (s, C-19), 115.8 (s, C-20), 125.3 (d, C-21), 60.2 (q, C-22), 60.7 (q, C-23), 60.4 (q, C-24).

【来源】 海绵 *Theonella* sp.

【分析方法】 甲醇粗提物分配于乙酸乙酯-水, 乙酸乙酯可溶部分经硅胶柱色谱 ($CHCl_3/MeOH$ 95:5)、反相高效液相色谱 ($MeOH/H_2O$ 85:15)、凝胶 Sephadex LH-20 柱色谱 ($CHCl_3/MeOH$ 1:1) 分离, 获得活性成分 Theoneberine。

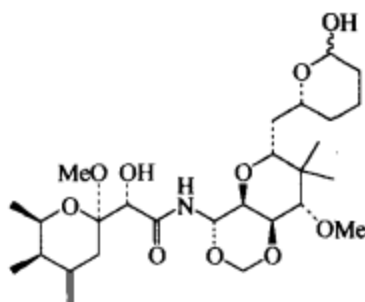
【生物活性与毒性】 抗菌, 抑制肿瘤细胞 L1210 和 KB 的生长。

【参考文献】 1. Kobayashi J, et al. J Org Chem, 1992, 57: 6680

2. Baker B J. carboline and isoquinoline alkaloids from marine organisms. From: Pelletier W. Alkaloids: Chemical and Biological Perspectives. Oxford: Pub. Pergamon, 1996. 357

A0212 Theopederin A

【结构式】



【分子式】 $C_{27}H_{45}NO_{10}$

【相对分子质量】 543

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D^{25} + 88.1^\circ (c\ 0.14, CHCl_3)$; IR (film) ν_{max} (cm^{-1}): 3350, 2950, 1680, 1520, 1455, 1435, 1375, 1345, 1320, 1295, 1265, 1220, 1185, 1165, 1100, 1065, 1025, 1005, 960, 915, 890, 840, 795, 755, 660; HRFABMS m/z : 494. 2764 ($M^+ - CH_3O - H_2O, C_{26}H_{40}NO_8$); 1H NMR ($CDCl_3$) δ : 4. 03 (dq, $J = 2.8, 6.6$ Hz, H-2), 1. 19 (d, $J = 6.6$ Hz, 2-Me), 2. 25 (dq, $J = 2.8, 7.1$ Hz, H-3), 1. 02 (d, $J = 7.1$ Hz, 3-Me), 4. 86 (d, $J = 1.9$ Hz, 4-CH₂), 4. 74 (t, $J = 2.0$ Hz, 4-CH₂), 2. 36 (d, $J = 14.1$ Hz, H-5), 2. 26 (ddd, $J = 14.1, 2.0, 1.9$ Hz, H-5), 3. 30 (s, 6-OMe), 4. 26 (s, H-7), 3. 80 (b, 7-OH), 7. 52 (d, $J = 9.8$ Hz, 9-NH), 5. 80 (dd, $J = 9.8, 9.8$ Hz, H-10), 5. 12 (d, $J = 6.8$ Hz, 10-OCH₂), 4. 84 (d, $J = 6.8$ Hz, 10-OCH₂), 3. 78 (dd, $J = 9.8, 6.9$ Hz, H-11), 4. 19 (dd, $J = 10.3, 6.9$ Hz, H-12), 3. 40 (d, $J = 10.3$ Hz, H-13), 3. 53 (s, 13-OMe), 0. 98 (s, 14-Me_{eq}), 0. 84 (s, 14-Me_{ax}), 3. 40 (m, H-15), 1. 61 (m, H-16), 1. 53 (m, H-16), 3. 33 (m, H-17), 1. 64 (m, H-18), 0. 95 (m, H-18), 1. 80 (m, H-19), 1. 41 (m, H-19), 1. 80 (m, H-20), 1. 22 (m, H-20), 4. 56 (dd, $J = 9.6, 2.0$ Hz, H-21), 3. 18 (b, 21-OH); ^{13}C NMR ($CDCl_3$) δ : 69. 7 (d, C-2), 18. 0 (q, 2-Me), 41. 3 (d, C-3), 12. 2 (q, 3-Me), 145. 4 (s, C-4), 111. 0 (t, 4-CH₂), 34. 1 (t, C-5), 99. 9 (s, C-6), 48. 6 (q, 6-OMe), 71. 7 (d, C-7), 172. 0 (s, C-8), 73. 7 (d, C-10), 86. 4 (t, 10-OCH₂), 70. 5 (bd, C-11), 74. 1 (d, C-12), 79. 5 (d, C-13), 61. 7 (q, 13-OMe), 41. 3 (s, C-14), 23. 2 (q, 14-Me_{eq}), 13. 5 (bq, 14-Me_{ax}), 76. 3 (d, C-15), 36. 2 (t, C-16), 74. 0 (d, C-17), 30. 0 (t, C-18), 21. 8 (t, C-19), 32. 6 (t, C-20), 96. 4 (d, C-21).

【来源】 海绵 *Theonella* sp.

【分析方法】 氯仿层经反相柱层析甲醇-水 (7:3) 处理, 得到的活性部位通过硅胶柱色谱法和反相高效液相色谱法分离, 纯化, 获得 Theopederin A.

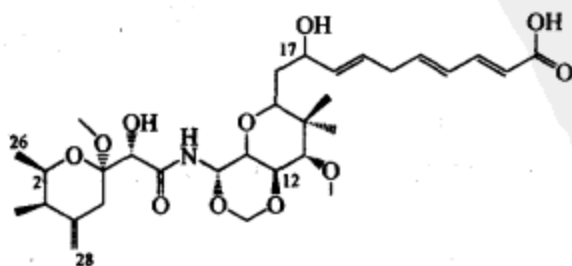
【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 P388 的生长.

【参考文献】 1. Fusetani N, et al. J Org Chem, 1992, 57: 3828

2. Toyota M, et al. Heterocycles, 1995, 40: 115

A0213 Theopederin L

【结构式】



【分子式】 $C_{31}H_{47}NO_{11}$

【相对分子质量】 609

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D^{25} + 34.0^\circ (c\ 0.05, CH_3OH)$; UV (MeOH) λ_{max} (nm): 260, 260, 202; IR (neat) ν_{max} (cm^{-1}): 3429, 2977, 1701, 1528, 1109, 1028; 1H NMR ($CDCl_3$) δ : 3. 98 (1H, $J = 2.6, 6.4$ Hz, H-2), 2. 22 (1H, $J = 2.6, 7.1$ Hz, H-3), 2. 36 (2H, $J = 15.3$, H-5), 4. 28 (1H, s, H-7), 7. 47 (1H, d, $J = 9.5$ Hz,

NH-9), 5.85(1H, dd, $J = 9.5, 9.6$ Hz, H-10), 3.85(1H, dd, $J = 9.6, 6.6$ Hz, H-11), 4.20(1H, dd, $J = 9.5, 6.6$ Hz, H-12), 3.43(1H, d, $J = 9.5$ Hz, H-13), 3.59(1H, dd, $J = 6.3, 5.8$ Hz, H-15), 1.55(2H, m, H-16), 4.11(1H, dt, $J = 5.8, 6.5$ Hz, H-17), 5.43(1H, dd, $J = 15.4, 6.5$ Hz, H-18), 5.66(1H, dt, $J = 15.4, 6.4$ Hz, H-19), 2.89(2H, t, $J = 6.4$, H-20), 6.15(1H, dt, $J = 15.4, 6.4$ Hz, H-21), 6.20(1H, dd, $J = 15.3, 10.2$ Hz, H-22), 7.30(1H, dd, $J = 15.3, 10.2$ Hz, H-23), 5.79(1H, d, $J = 15.3$ Hz, H-24), 1.18(3H, d, $J = 6.4$ Hz, H-26), 1.01(3H, d, $J = 7.1$ Hz, H-27), 4.72(1H, s, H-28), 4.86(1H, s, H-28), 0.97(3H, s, Meeq-14), 0.86(3H, s, Meax-14), 4.83(1H, d, $J = 6.8$ Hz, CH₂O-10), 5.12(1H, d, $J = 6.8$ Hz, CH₂O-10), 3.29(3H, s, MeO-6), 3.54(3H, s, MeO-13); ¹³CNMR(10% CD₃OD-CDCl₃) δ : 70.4(d, C-2), 41.4(d, C-3), 146.0(s, C-4), 33.4(t, C-5), 99.8(s, C-6), 73.2(d, C-7), 172.4(s, C-8), 73.2(d, C-10), 69.5(d, C-11), 74.1(d, C-12), 79.3(d, C-13), 41.4(s, C-14), 79.1(d, C-15), 35.8(t, C-16), 73.3(d, C-17), 133.2(d, C-18), 128.3(d, C-19), 35.1(t, C-20), 138.4(d, C-21), 129.8(d, C-22), 141.7(d, C-23), 128.3(d, C-24), 168.8(d, C-25), 17.7(q, C-26), 11.7(q, C-27), 109.9(t, C-28), 23.0(q, C-29), 13.5(q, C-30), 86.6(t, 10-OCH₂), 48.3(q, 6-OMe), 61.6(q, 13-OMe); HRFABMS(3-nitrobenzyl alcohol) m/z 632.3048, C₃₁H₄₇NO₁₁Na[M + Na]⁺.

【来源】 海绵 *Discodermia* sp.

【分析方法】 海绵的乙醇提取物以乙酸乙酯和水分配, 乙酸乙酯部分硅胶柱层析, 以 MeOH-CH₂Cl₂ 梯度洗脱。由 50% MeOH-CH₂Cl₂ 洗脱部分重新分配于正己烷和含水甲醇中, 含水甲醇层上 C18 柱色谱, H₂O/MeOH 梯度洗脱, 合并 40%~60% MeOH-H₂O 洗脱部分, 利用反相 HPLC 色谱, 洗脱溶剂为 40% MeCN-H₂O 得到化合物 Theopederin L。

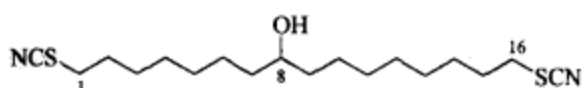
【参考文献】 1. Paul G K, et al. *J Nat Prod*, 2002, 65: 59

2. Fusetani N, et al. *J Org Chem*, 1992, 57: 3828

3. Toyota M, et al. *Heterocycles*, 1995, 40: 115

A0214 Thiocyanatin A

【结构式】



【分子式】 C₁₈H₃₂S₂N₂O

【相对分子质量】 356

【理化常数及谱学数据】 稳定的无色油状物; $[\alpha]_D^{20}$ (c 1.0 in CHCl₃); IR λ_{max} (film) (cm⁻¹): 3500, 2155; ¹H NMR(400MHz, CDCl₃) δ : 1.2~1.5(m, methylene envelope), 1.85(quin, $J = 7.4$ Hz, H-22, H-215), 2.95(t, $J = 7.4$ Hz, H-21, H-216), 3.6(m, H-8); ¹³C NMR(100MHz, CDCl₃) δ : 25.4, 25.5(t, C-6, C-10), 28.7, 28.8(t, C-4, C-13), 29.2, 29.3, 29.4(t, C-5, C-11, C-12), 29.8(t, C-2, C-15), 33.9, 34.0(t, C-1, C-16), 37.3, 37.4(t, C-7, C-9), 71.8(d, C-8), 112.4(s, SCN); ESI(+)MS m/z 379(M + Na, 65), 374(M + NH₄, 100), 357(M + H, 85); HRESI(+)MS m/z 357.2022(M + H) (calcd for C₁₈H₃₃S₂N₂O 357.2034)。

【来源】 海绵 *Oceanapia* sp.

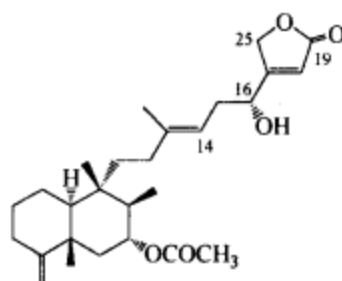
【分析方法】 海绵的乙醇提取物用二氯甲烷抽提三次, 二氯甲烷溶解部分进行硅胶固相萃取。25%~50% EtOAc/hexane 洗脱部分经正相 HPLC (40% EtOAc/hexane, Phenomenex spherex 250mm×10mm silica column) 分离得到化合物 Thiocyanatin A。

【生物活性与毒性】 对市售牲畜寄生虫 *Haemonchus contortus* 展示出良好的杀虫活性, 其 LD₉₉ 值为 1.3μg/mL。

【参考文献】 1. Capon R J, et al. *J Org Chem*, 2001, 66: 7765

A0215 Thorectandrois C

【结构式】



【分子式】 $C_{27}H_{40}O_5$

【相对分子质量】 444

【理化常数及谱学数据】 亮黄色油状物; $[\alpha]_D -29.0^\circ$ (c 0.27, MeOH); CD (MeOH) λ_{max} (nm): 241 (+3.2), 215 (-3.1), 197 (+4.5); UV (MeOH) λ_{max} : 218(3.6) nm; IR (film) ν_{max} (cm^{-1}): 3500 (OH), 1737 (C—O), 1645 (C—C); 1H NMR: 1.50, 1.58 (m, H-1), 1.28, 1.91 (m, H-2), 2.11, 2.32 (m, H-3), 1.48, 1.91 (m, H-6), 4.96 (dt, $J = 11.3, 4.0$, H-7), 1.58 (m, H-8), 1.20 (dd, $J = 2.6$, H-10), 1.40 (m, 2H, H-11), 1.77, 1.85 (m, H-12), 5.21 (t, $J = 7.0$, H-14), 2.40 (t, $J = 6.6$, 2H, H-15), 4.61 (t, $J = 6.3$, H-16), 5.93 (brs, H-18), 4.48, 4.51 (bs, H-20), 1.17 (s, 3H, H-21), 0.85 (d, $J = 6.7$, 3H, H-22), 0.83 (s, 3H, H-23), 1.61 (bs, 3H, H-24), 4.90 (s, 2H, H-25), 2.05 (s, 3H, H-27); ^{13}C NMR: 22.9 (C-1), 29.6 (C-2), 33.6 (C-3), 160.4 (C-4), 41.6 (C-5), 44.1 (C-6), 75.3 (C-7), 42.8 (C-8), 41.9 (C-9), 49.7 (C-10), 38.3 (C-11), 34.1 (C-12), 140.3 (C-13), 119.8 (C-14), 36.0 (C-15), 69.4 (C-16), 176.3 (C-17), 22.2 (C-21), 11.0 (C-22), 19.7 (C-23), 16.6 (C-24), 73.0 (C-25), 172.8 (C-26), 21.0 (C-27); HRFABMS m/z 445.2938 [$M + H$] $^+$, calcd for $C_{27}H_{41}O_5$, 445.2914.

【来源】 海绵 *Thorectandra* sp.

【分析方法】 依次用水和 MeOH/ CH_2Cl_2 (1:1) 提取海绵, 经萃取后得到的有机层由 RPHPLC (1.0cm $\times$ 25cm, C18, 6.0nm, Dynamax) 纯化, 洗脱溶剂为 90% 的乙腈/水。其中一部分再经过 RPHPLC (1.0cm $\times$ 10cm, C18, 6.0nm, Dynamax), 以 80% 的乙腈/水纯化, 得到化合物 Thorectandrols C。

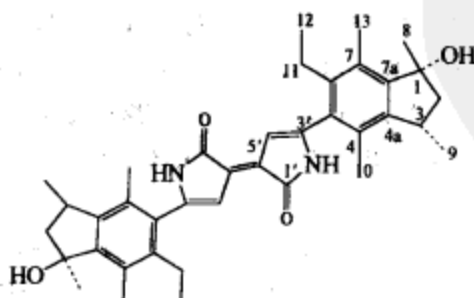
【生物活性与毒性】 对 A549、786-O 和 MALME-3M 等肿瘤细胞株显示较微弱的细胞毒活性, 其 IC_{50} 值约为 30~40 $\mu g/mL$ 。

【参考文献】 1. Charan R D, et al. J Nat Prod, 2002, 65: 492

2. Charan R D, et al. J Nat Prod, 2001, 64: 661

A0216 Trikendiol

【结构式】



【分子式】 $C_{38}H_{46}N_2O_4$

【相对分子质量】 594

【理化常数及谱学数据】 mp 160~162 $^\circ C$; $[\alpha] +102^\circ$ (c 0.02, $CHCl_3$); HRFABMS m/z 595.3423 [$M + H$] $^+$; UV λ_{max} (nm): 210, 265, 337, 510; IR (KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3400; 1H -NMR (300MHz, $CDCl_3$) δ : 1.82 (H, dd, $J = 13.5, 5.5$ Hz, Ha-2), 2.48 (H, dd, $J = 13.2, 8.3$ Hz, Hb-2), 3.13 (H, ddq, $J = 8, 7, 3$ Hz, H-3), 1.61 (3H, s, H-8), 1.3 (H, d, $J = 7$ Hz, H-9), 2.23 (3H, s, H-10), 2.65 (2H, q, $J = 7.5$ Hz, H-11), 1.11 (3H, t, $J =$

7.5 Hz, H-12), 2.47 (3H, s, H-13), 6.78 (H, brs, H-2'), 6.72 (H, d, $J = 2$ Hz, H-4'); ^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3): 82.2 (C-1), 52.2 (C-2), 35.4 (C-3), 130.9 (C-4), 144.3 (C-4a), 130.5 (C-5), 141.4 (C-6), 131.4 (C-7), 146.3 (C-7a), 28.2 (C-8), 22.1 (C-9), 16.7 (C-10), 24.1 (C-11), 15.6 (C-12), 14.0 (C-13), 170.7 (C-1'), 129.3 (C-3'), 104.1 (C-4'), 148.9 (C-5').

【来源】 海绵 *Trikentrion loeve*

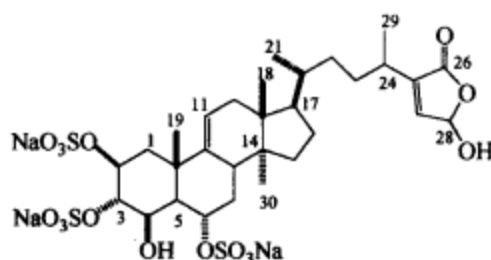
【分析方法】 海绵的二氯甲烷提取物逐步上硅胶柱 (二氯甲烷-丙酮 9:1), Sephadex LH-20 (甲醇-二氯甲烷 6:4) 和硅胶柱 (二氯甲烷-丙酮 9:1) 分离得到纯品。结构通过 (HR) MS、IR、UV 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 抗 HIV-1 活性, $\text{IC}_{50} = 2\mu\text{g/mL}$ 。

【参考文献】 1. Loukaci A, et al. Tetrahedron Lett, 1994, 35 (37): 6869

A0217 Topsentiasterol sulfate A

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{30}\text{H}_{43}\text{O}_{16}\text{S}_3\text{Na}_3$

【相对分子质量】 824

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha] + 48.4^\circ$ (c 0.20, MeOH); HRFABMS m/z 801.1500 $[\text{M} - \text{Na}]^-$; FABMS m/z 823 $[\text{M} - \text{H}]^-$, 801 $[\text{M} - \text{Na}]^-$, 721, 699, 601, 579; IR (KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3500, 2940, 1760, 1645, 1240; ^1H NMR (CD_3OD) δ : 1.85 (H, dd, $J = 4.2, 14.7$ Hz, H-1a), 2.32 (H, brd, $J = 14.6$ Hz, H-1b), 4.96 (H, m, H-2), 4.81 (H, dd, $J = 2.0, 2.9$ Hz, H-3), 4.46 (H, dt, $J = 1.0, 2.9$ Hz, H-4), 1.47 (H, dd, $J = 3.0, 11.3$ Hz, H-5), 4.85 (H, dt, $J = 4.5, 11.2$ Hz, H-6), 1.55 (H, q, $J = 11.8$ Hz, H-7a), 2.22 (H, dt, $J = 11.8, 4.9$ Hz, H-7b), 2.49 (H, m, H-8), 5.34 (H, dt, $J = 6.1, 2.0$ Hz, H-11), 2.12 (H, brd, $J = 17.2$ Hz, H-12a), 1.96 (H, ddd, $J = 1.3, 5.9, 17.2$ Hz, H-12b), 1.38, 1.44 (2H, m, H-15), 1.33, 1.92 (2H, m, H-16), 1.65 (H, q, $J = 9.5$ Hz, H-17), 0.70 (3H, s, H-18), 1.42 (3H, s, H-19), 1.42 (H, m, H-20), 0.91 (3H, d, $J = 6.5$ Hz, H-21), 1.11, 1.47 (2H, m, H-22), 1.47, 1.55 (2H, m, H-23), 2.46 (H, dq, $J = 7.0, 7.0$ Hz, H-24), 6.91 (H, brs, H-27), 6.07 (H, brs, H-28), 1.15 (3H, d, $J = 6.9$ Hz, H-29), 0.81 (3H, s, H-30); ^{13}C NMR (CD_3OD): 37.4 (C-1), 75.6 (C-2), 76.1 (C-3), 68.5 (C-4), 47.9 (C-5), 75.9 (C-6), 35.4 (C-7), 41.3 (C-8), 146.4 (C-9), 39.4 (C-10), 117.5 (C-11), 38.3 (C-12), 45.5 (C-13), 49.8 (C-14), 34.8 (C-15), 28.9 (C-16), 52.1 (C-17), 15.0 (C-18), 25.4 (C-19), 37.2 (C-20), 18.8 (C-21), 34.5 (C-22), 32.6 (C-23), 31.9 (C-24), 143.5 (C-25), 173.6 (C-26), 145.2 (C-27), 98.6 (C-28), 18.8 (C-29), 19.0 (C-30).

【来源】 海绵 *Topsentia* sp.

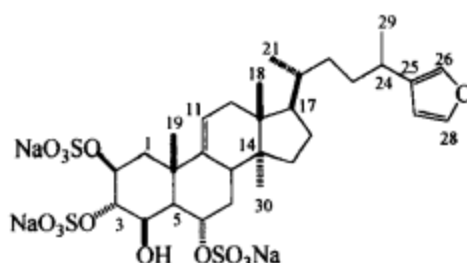
【分析方法】 海绵的甲醇提取物在水和乙醚间分配, 水层上 ODS open 柱 (甲醇-水), 50% 甲醇-水溶解部分上反相 HPLC (乙腈、 NaClO_4 、水) 得到纯品。结构通过 (HR) MS、IR 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 $10\mu\text{g/disk}$ 下对 *Pseudomonas aeruginosa* 和 *Escherichia coli* 有抑菌作用。

【参考文献】 1. Fusetani N, et al. Tetrahedron, 1994, 50 (26): 7765

A0218 Topsentiasterol sulfate D

【结构式】



【分子式】 $C_{30}H_{43}O_{14}S_3Na_3$

【相对分子质量】 792

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha] + 9.3^\circ (c 0.10, \text{MeOH})$; HRFABMS m/z 769.1597 $[M - Na]^-$; FABMS m/z 791 $[M - H]^-$, 769 $[M - Na]^-$, 669, 576; IR (KBr) $\nu_{\max} (\text{cm}^{-1})$: 3420, 2910, 1220; ^1H NMR (CD_3OD) δ : 1.85 (H, dd, $J = 4.2, 14.7\text{Hz}$, H-1a), 2.32 (H, brd, $J = 14.6\text{Hz}$, H-1b), 4.96 (H, m, H-2), 4.81 (H, dd, $J = 2.0, 2.9\text{Hz}$, H-3), 4.46 (H, dt, $J = 1.0, 2.9\text{Hz}$, H-4), 1.48 (H, dd, $J = 3.0, 11.3\text{Hz}$, H-5), 4.82 (H, dt, $J = 4.5, 11.2\text{Hz}$, H-6), 1.55 (H, q, $J = 11.8\text{Hz}$, H-7a), 2.22 (H, dt, $J = 11.8, 4.9\text{Hz}$, H-7b), 2.48 (H, m, H-8), 5.34 (H, dt, $J = 6.1, 2.0\text{Hz}$, H-11), 2.10 (H, brd, $J = 17.2\text{Hz}$, H-12a), 1.95 (H, ddd, $J = 1.3, 5.9, 17.2\text{Hz}$, H-12b), 1.33, 1.42 (2H, m, H-15), 1.27, 1.85 (2H, m, H-16), 1.62 (H, q, $J = 9.5\text{Hz}$, H-17), 0.68 (3H, s, H-18), 1.42 (3H, s, H-19), 1.37 (H, m, H-20), 0.90 (3H, d, $J = 6.5\text{Hz}$, H-21), 1.04, 1.40 (2H, m, H-22), 1.42, 1.55 (2H, m, H-23), 2.55 (H, dq, $J = 7.0, 7.0\text{Hz}$, H-24), 7.22 (H, brs, H-26), 6.30 (H, brs, H-27), 7.37 (H, brs, H-28), 1.16 (3H, d, $J = 6.9\text{Hz}$, H-29), 0.80 (3H, s, H-30); ^{13}C NMR (CD_3OD): 37.4 (C-1), 75.6 (C-2), 76.1 (C-3), 68.5 (C-4), 48.0 (C-5), 75.9 (C-6), 35.4 (C-7), 41.3 (C-8), 146.5 (C-9), 39.4 (C-10), 117.5 (C-11), 38.3 (C-12), 45.5 (C-13), 49.9 (C-14), 35.0 (C-15), 28.8 (C-16), 52.2 (C-17), 15.0 (C-18), 25.4 (C-19), 37.4 (C-20), 19.0 (C-21), 35.0 (C-22), 35.4 (C-23), 31.7 (C-24), 132.4 (C-25), 139.1 (C-26), 110.3 (C-27), 143.9 (C-28), 21.7 (C-29), 18.8 (C-30).

【来源】 海绵 *Topsentia* sp.

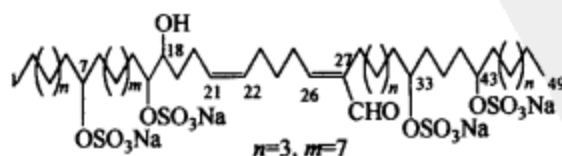
【分析方法】 海绵的甲醇提取物在水和乙醚间分配; 水层上 ODS open 柱 (甲醇-水), 75% 甲醇-水溶解部分上反相 HPLC (乙腈、 NaClO_4 、水) 得到纯品。结构通过 (HR) MS、IR 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 1. $10\mu\text{g}/\text{disk}$ 下对 *Pseudomonas aeruginosa* 和 *Escherichia coli* 有抑菌作用。2. $10\mu\text{g}/\text{disk}$ 下对真菌 *Mortierella remannianus* 和 *Candida albicans* 有抑菌作用。

【参考文献】 1. Fusetani N, et al. Tetrahedron, 1995, 50 (26): 7765

A0219 Toxadocial B

【结构式】



【分子式】 $C_{50}H_{92}S_4O_{18}Na_4$

【相对分子质量】 1200

【理化常数及谱学数据】 无色无定形固体; $[\alpha] + 3.7^\circ (c 0.2, \text{MeOH})$; HRFABMS m/z 1177.4861 $[M - Na]^-$; IR $\nu_{\max} (\text{cm}^{-1})$: 3470, 2925, 2850, 1670, 1640, 1380, 1220, 1060, 930, 820, 770; UV (MeOH) $\lambda_{\max}$: 232nm; ^1H -NMR ($\text{C}_5\text{D}_5\text{N}$) δ : 0.77 (3H, t, $J = 6.8\text{Hz}$, H-1), 1.91, 1.81 (2H, m, H-6), 4.88 (H, q, $J = 5.9\text{Hz}$, H-7), 1.73, 1.55 (2H, m, H-15), 2.02, 1.71 (2H, m, H-16), 5.08 (H, m, H-17), 4.28 (H, dt, $J = 10.0, 2.5\text{Hz}$, H-18), 2.01, 1.77 (2H, m, H-19), 2.55, 2.39 (2H, m, H-20), 5.57 (H, dt, $J = 10.5, 7.3\text{Hz}$, H-21), 5.44 (H, dt, $J = 10.5, 7.3\text{Hz}$, H-22), 2.30 (2H, q, $J = 7.4\text{Hz}$, H-25), 6.43 (H, t, $J = 7.4\text{Hz}$, H-26), 2.29 (2H, t, $J =$

7.4 Hz, H-28), 1.91, 1.81 (2H, m, H-32), 4.86 (H, q, $J = 5.9$ Hz, H-33), 1.91, 1.81 (2H, m, H-34), 1.91, 1.81 (2H, m, H-42), 4.88 (H, q, $J = 5.9$ Hz, H-43), 1.91, 1.81 (2H, m, H-44), 0.77 (3H, t, $J = 6.8$ Hz, H-49), 9.50 (H, s, H-50); ^{13}C NMR ($\text{C}_5\text{D}_5\text{N}$): 14.21 (C-1), 78.78 (C-7), 82.90 (C-17), 72.60 (C-18), 131.23 (C-21), 129.43 (C-22), 155.33 (C-26), 143.97 (C-27), 78.78 (C-43), 14.20 (C-49), 195.31 (C-50)。

【来源】 海绵 *Toxadocia cylindrica*

【分析方法】 海绵的甲醇提取物上 Sephadex LH-20 后用反相 HPLC 分离得到。结构通过 (HR) MS、UV、IR 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 凝血酶抑制剂, $\text{IC}_{50} = 4.6 \mu\text{g/mL}$ 。

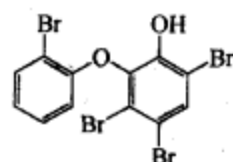
【参考文献】 1. Nakao Y, et al. Tetrahedron, 1993, 49 (48): 11183

2. Nakao Y, et al. Tetrahedron lett, 1993, 34 (9): 1511

3. Nakao Y, et al. Tennen Yuki Kagobutsu Toronkai Koen Yosh, 1993, 35: 701

A0220 3,4,6-Tribromo-2-(2-bromo-phenoxy)-phenol

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{12}\text{H}_6\text{Br}_4\text{O}_2$

【相对分子质量】 502

【理化常数及谱学数据】 黏性油状物; UV (MeOH) λ_{max} (nm): 220, 222; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ : 7.75 (s, H-5), 7.65 (1H, dd, 1.9, 7.9, H-3'), 7.20 (1H, ddd, 2.0, 7.5, 8.4, H-4'), 7.00 (1H, ddd, 1.7, 7.7, 7.7, H-5'), 6.54 (1H, dd, 1.4, 8.2, H-6'); ^{13}C NMR (100 MHz, CDCl_3) δ : 146.7 (C-1), 141.0 (C-2), 120.2 (C-3), 116.1 (C-4), 132.5 (C-5), 109.8 (C-6), 152.7 (C-1'), 111.8 (C-2'), 134.1 (C-3'), 124.6 (C-4'), 128.7 (C-5'), 114.8 (C-6'); EIMS (70 eV) m/z 506 (16), 504 (68), 502 (100), 500 (68), 498 (18) $[\text{M}]^+$, 425 (14), 423 (38), 421 (38), 419 (14) $[\text{M} - \text{Br}]^+$, 344 (36), 342 (70), 340 (36) $[\text{M} - \text{Br}_2]^+$ 。

【来源】 海绵 *Dysidea herbacea*^[1]

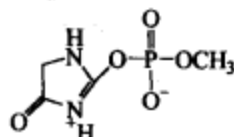
【分析方法】 样品分别用丙酮和甲醇提取, 提取物合并, 水-乙酸乙酯萃取, 乙酸乙酯部分 Sephadex LH-20 柱层析 (MeOH) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 具有抗革兰阳性菌 *B. subtilis*. MIC: $\mu\text{g/mL}$ (nmol) 1.56 (3.11)。抗真菌 *C. cucumerinum*, 抑制真菌的直径: 剂量 50 nmol (mm diam) 16.0, 剂量 25 nmol (mm diam) 8.0。对海水虾 *A. salina* 致死活性 LC_{50} ($\mu\text{g/mL}$, SE) 3.20 ± 0.35 。

【参考文献】 1. Handayani D, et al. J Nat Prod, 1997, 60: 1313

A0221 Ulosantoin

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_5\text{H}_9\text{N}_2\text{O}_5\text{P}$

【相对分子质量】 209

【理化常数及谱学数据】 无定形固体; mp 128~129°C; 在丙酮中析出单晶; HREIMS m/z 209.0326 $[\text{M}]^+$; LREIMS m/z (rel. int.): 209 $[\text{M} + \text{H}]^+$ (100), 179 (11), 165 (11), 151 (12), 139 (52), 108 (25), 97 (14), 81 (13); IR (CHCl_3) ν_{max} (cm^{-1}): 3320 (br), 2955, 2930, 2855, 1783, 1760, 1660, 1500, 1455, 1320, 1296, 1250, 1240, 1190, 1070, 1050; UV (CHCl_3) λ_{max} : 224 nm; ^1H NMR (CHCl_3) δ : 9.6 (H, brs), 3.94 (H,

s), 3.82(3H, d, $J = 11$ Hz), 3.05(3H, s); ^{13}C NMR(CHCl_3): 168.3, 156.9(d, $J = 8$), 54.4(d, $J = 5$), 52.2, 30.5; X-Ray 数据见参考文献。

【来源】 百慕大海绵 *Ulosa ruetzleri*

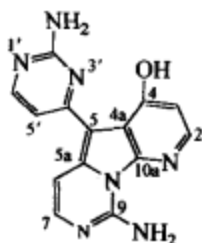
【分析方法】 海绵提取物的氯仿萃取层经反复的硅胶柱和 Sephadex LH-20 柱分离得到纯品。结构通过 (HR) MS、UV、IR 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 和 X-Ray 等方法确定。

【生物活性与毒性】 1. 对烟草天蛾幼虫的杀灭作用, $\text{LD}_{50} = 6\text{mg/kg}$ 。2. 局部给药 $0.2\mu\text{g}$ 时能完全杀灭墨西哥蚕豆甲虫和南方黏虫。3. 对美洲蟑螂 (*Periplaneta americana*) 有极强的杀灭作用, 局部给药 $\text{LD}_{100} = 1.0\mu\text{g}$, 胸腔内给药 $\text{LD}_{100} = 0.2\mu\text{g}$ 。

【参考文献】 1. van Wageningen B C, et al. J Org Chem, 1993, 58: 335

A0222 Variolin B

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{14}\text{H}_{11}\text{ON}_7$

【相对分子质量】 293

【理化常数及谱学数据】 棕黄色固体; mp 45°C (分解); HREIMS m/z 293.102 $[\text{M}]^+$; UV(MeOH) λ_{max} (nm): 422, 404, 324, 280, 244, 221; IR (KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3100, 1684, 1614, 1540, 1497, 1310, 1188, 1135; ^1H NMR[300MHz, $(\text{CD}_3)_2\text{SO}$] δ : 8.28(H, d, $J = 5.6$ Hz, H-2), 6.90(H, d, $J = 5.5$ Hz, H-3), 7.31(H, d, $J = 6.9$ Hz, H-6), 7.73(H, d, $J = 6.6$ Hz, H-7), 7.23(H, d, $J = 5.9$ Hz, H-5'), 8.37(H, d, $J = 5.4$ Hz, H-6'), 16.1(—OH), 8.6, 9.9(2H, m, 9-NH₂), 7.07(2H, m, 2'-NH₂); ^{13}C NMR[75MHz, $(\text{CD}_3)_2\text{SO}$]: 143.2(C-2), 107.6(C-3), 159.9(C-4), 111.2(C-4a), 99.6(C-5), 137.1(C-5a), 100.4(C-6), 144.6(C-7), 150.3(C-9), 145.0(C-10a), 158.4(C-2'), 161.5(C-4'), 106.1(C-5'), 106.1(C-6')。

【来源】 海绵 *Kirkpatrickia variolosa*

【分析方法】 海绵的提取物上 ODS flash 柱, 甲醇-水 (9:1) 洗脱的馏分再上硅胶柱, 二氯甲烷-甲醇 (95:5) 洗脱的馏分最后用 Sephadex LH-20 (二氯甲烷-甲醇 1:1) 分离得到纯品。结构通过 (HR) MS、IR、UV 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 对肿瘤细胞的抑制作用 (IC_{50} , ng/mL): P-388 (210)。

【参考文献】 1. Perry N B, et al. Tetrahedron, 1994, 50 (13): 3987

2. Trimurtulu G, et al. Tetrahedron, 1994, 50: 3993

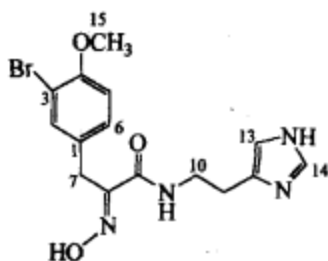
3. McClintock J B, et al. Am Zool, 1997, 37: 329

4. Urban S, et al. Curr Org Chem, 2000, 4: 765

5. Ahaidar A, et al. Tetrahedron Lett, 2003, 44: 6191

A0223 Verongamine

【结构式】



【相对分子质量】 380/382

【理化常数及谱学数据】 黄色半固态物质; HRFABMS m/z 381.0573 $[M+H]^+$; FABMS m/z 381 (92%), 383 (100), 403 (36) $[M+Na]^+$, 405 (38); IR (CHCl₃) $\nu_{\max}$ (cm⁻¹): 3390 (br), 3231 (br), 2936, 2837, 1655, 1495, 1254, 1054; UV (MeOH) $\lambda_{\max}$ (nm): 388, 389 (sh), 280, 206; ¹H NMR (300MHz, CD₃OD) δ : 7.42 (H, d, J = 2.1 Hz, H-2), 6.89 (H, d, J = 8.4 Hz, H-5), 7.17 (H, dd, J = 8.4, 2.1 Hz, H-6), 3.79 (2H, s, H-7), 3.47 (2H, t, J = 7.1 Hz, H-10), 2.77 (2H, t, J = 7.1 Hz, H-11), 6.80 (H, brs, H-13), 7.55 (H, brs, H-14), 3.80 (3H, s, H-15); ¹³C NMR (75MHz, CD₃OD + 5% CD₃COOD): 112.1 (C-1), 134.7 (C-2), 131.7 (C-3), 155.9 (C-4), 113.1 (C-5), 130.4 (C-6), 28.7 (C-7), 152.9 (C-8), 165.9 (C-9), 39.2 (C-10), 26.1 (C-11), 133.4 (C-12), 117.6 (C-13), 135.0 (C-14), 56.7 (C-15)。

【来源】 海绵 *Verongula gigantea*

【分析方法】 海绵的乙醇提取物在水和乙酸乙酯间分配, 乙酸乙酯层用 1mol/L 的 HCl 提取, 酸层调 pH 值至 9 后, 再用乙酸乙酯萃取, 乙酸乙酯层经过硅胶柱 (甲醇-二氯甲烷) 和 Sephadex LH-20 (乙醇-二氯甲烷) 分离得到。结构通过 (HR) MS、IR、UV 和 NMR (¹H NMR、¹³C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

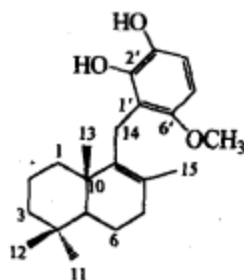
【生物活性与毒性】 组织胺-H₃ 拮抗剂, IC₅₀ = 1 μ g/mL。

【参考文献】 1. Mierzwa R, et al. J Nat Prod, 1994, 57 (1): 175; Pomponi S A, et al. US Pat. Appl. CA119 (14): 146572k

2. Ali S M, et al. Bioorg Med Chem Lett, 1998, 8: 1133
3. Wasserman H H, et al. J Org Chem, 1998, 63: 5581
4. Thirionet I, et al. Nat Prod Lett, 1998, 12: 209
5. Boehlow T R, et al. J Org Chem, 2001, 66: 3111
6. Manzo E, et al. Org Lett, 2003, 5: 4591

A0224 Wiedendiol-A

【结构式】



【分子式】 C₂₂H₃₂O₃

【相对分子质量】 344

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha] + 121^\circ$ (CHCl₃); HRFABMS m/z 345.2410 $[M+H]^+$; CIMS m/z (rel. Int.) 345 (39), 344 (15), 191 (38), 153 (100); UV (heptane) $\lambda_{\max}$ (nm): 201, 288; IR (film) $\nu_{\max}$ (cm⁻¹): 3498 (br), 3340, 2945, 1615, 1492, 1288, 1385, 1258, 1181, 1085, 789, 728; ¹H NMR (CDCl₃) δ : 2.16 (2H, dd, J = 8.9, 4.3 Hz, H-7), 0.92 (3H, s, H-11), 1.03 (3H, s, H-12), 0.86 (3H, s, H-13), 3.50, 3.42 (2H, d, J = 17.2 Hz, H-14), 1.72 (3H, s, H-15), 6.69 (H, d, J = 8.8 Hz, H-4'), 6.30 (H, d, J = 8.8 Hz, H-5'), 3.77 (3H, s, —OMe), 7.48 (H, s, —OH), 5.14 (H, brs, —OH); ¹³C NMR (CDCl₃): 35.9 (C-1), 18.8 (C-2), 41.6 (C-3), 33.5 (C-4), 51.7 (C-5), 18.8 (C-6), 33.6 (C-7), 133.1 (C-8), 143.7 (C-9), 39.6 (C-10), 33.3 (C-11), 21.8 (C-12), 20.0 (C-13), 24.8 (C-14), 20.6 (C-15), 113.6 (C-1'), 140.3 (C-2'), 139.1 (C-3'), 110.8 (C-4'), 101.5 (C-5'), 150.7 (C-6'), 55.9 (—OMe)。

【来源】 海绵 *Xestospongia wiedenmayeri*

【分析方法】 海绵的石油醚提取物上硅胶柱, 庚烷-氯仿梯度洗脱, 分离得到纯品。结构通过 (HR)

MS、IR、UV 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 CETP-SPA 抑制剂, $\text{IC}_{50} = 5\mu\text{mol/L}$ 。

【参考文献】 1. Stephen J Coval, et al. Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters, 1995, 5 (6): 605

2. Chackalamannil S, et al. Tetrahedron Lett, 1995, 34: 5315

3. Barrero A, et al. Tetrahedron Lett, 1997, 38: 8101

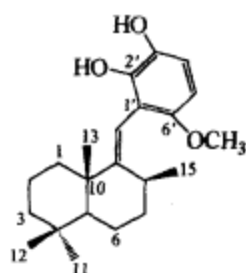
4. Barrero A F, et al. Tetrahedron, 1998, 54: 5635

5. Barrero A F, et al. Bioorg Med Chem Lett, 1999, 9: 2325

6. Fraga B M. Nat Prod Rep, 1999, 16: 711

A0225 Wiedendiol-B

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{22}\text{H}_{32}\text{O}_3$

【相对分子质量】 344

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha] - 41^\circ (\text{CHCl}_3)$; HRFABMS m/z 345. 2413 $[\text{M} + \text{H}]^+$; CIMS m/z (rel. Int.) 345(38), 344(58), 191(53), 153(100); UV (heptane) λ_{max} (nm): 199, 288, 325; IR (film) ν_{max} (cm^{-1}): 3500 (br), 2934, 1596, 1498, 1466, 1377, 1316, 1258, 1208, 1155, 758; ^1H NMR (CDCl_3) δ : 2.60 (H, m, H-8), 0.91 (3H, s, H-11), 0.91 (3H, s, H-12), 1.25 (3H, s, H-13), 5.78 (H, s, H-14), 1.03 (3H, d, $J = 7.6\text{Hz}$, H-15), 6.76 (H, d, $J = 8.8\text{Hz}$, H-4'), 6.36 (H, d, $J = 8.8\text{Hz}$, H-5'), 3.70 (3H, s, —OMe), 4.97 (H, s, —OH), 5.13 (H, s, —OH); ^{13}C NMR (CDCl_3): 38.8 (C-1), 18.8 (C-2), 42.0 (C-3), 34.0 (C-4), 55.1 (C-5), 17.8 (C-6), 34.2 (C-7), 32.0 (C-8), 164.3 (C-9), 41.3 (C-10), 33.4 (C-11), 22.8 (C-12), 21.9 (C-13), 112.6 (C-14), 21.8 (C-15), 114.8 (C-1'), 139.7 (C-2'), 137.8 (C-3'), 109.7 (C-4'), 102.7 (C-5'), 151.0 (C-6'), 56.0 (—OMe).

【来源】 海绵 *Xestospongia wiedenmayeri*

【分析方法】 海绵的石油醚提取物上硅胶柱, 庚烷-氯仿梯度洗脱, 分离得到纯品。结构通过 (HR) MS、IR、UV 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 CETP-SPA 抑制剂, $\text{IC}_{50} = 5\mu\text{mol/L}$ 。

【参考文献】 1. Stephen J Coval, et al. Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters, 1995, 5 (6): 605

2. Chackalamannil S, et al. Tetrahedron Lett, 1995, 34: 5315

3. Barrero A, et al. Tetrahedron Lett, 1997, 38: 8101

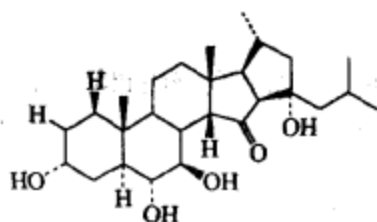
4. Barrero A F, et al. Tetrahedron, 1998, 54: 5635

5. Barrero A F, et al. Bioorg Med Chem Lett, 1999, 9: 2325

6. Fraga B M. Nat Prod Rep, 1999, 16: 711

A0226 Xestobergsterol A

【结构式】



【分子式】 $C_{27}H_{44}O_5$

【相对分子质量】 448

【理化常数及谱学数据】 1H NMR(400MHz, pyridine- d_5) δ : 1.76(H-1), 1.50(H-1), 2.72(H-2), 1.65(H-2), 4.35(H-3), 1.88(H-4), 1.68(H-4), 2.36(H-5), 3.57(dd, $J = 10.0$ Hz, H-6), 5.05(dd, $J = 10.0$, 10.0Hz, H-7), 1.97(H-8), 1.57(H-9), 1.54(H-11), 1.24(H-11), 1.41(H-12), 1.06(H-12), 3.42(H-14), 2.70(d, $J = 9.5$ Hz, H-16), 1.72(H-17), 1.18(s, H-18), 0.89(s, H-19), 2.63(H-20), 1.12(d, $J = 6.5$ Hz, H-21), 2.12(dd, $J = 12.1, 5.9$ Hz, H-22), 1.33(dd, $J = 12.1, 12.1$ Hz, H-22), 1.98(H-24), 1.56(H-24), 2.19(H-25), 1.06(d, $J = 5.1$ Hz, H-26), 1.04(d, $J = 5.1$ Hz, H-27); ^{13}C NMR(100MHz, pyridine- d_5) δ : 33.1(t, C-1), 31.3(t, C-2), 65.3(d, C-3), 29.4(t, C-4), 42.4(d, C-5), 75.7(d, C-6), 74.9(d, C-7), 39.1(C-8), 46.5(d, C-9), 36.9(s, C-10), 21.5(C-11), 38.6(t, C-12), 38.6(s, C-13), 51.7(d, C-14), 217.3(s, C-15), 62.8(d, C-16), 58.0(d, C-17), 19.9(q, C-18), 12.8(q, C-19), 34.9(d, C-20), 20.9(q, C-21), 52.3(t, C-22), 82.2(s, C-23), 52.0(t, C-24), 25.0(d, C-25), 24.9(q, C-26), 25.3(q, C-27)。

【来源】 海绵 *Xestospongia bergquistia*

【分析方法】 活性部位乙酸乙酯层经中压硅胶柱色谱法和凝胶 LH-20 色谱法分离, 反相高效液相色谱法进一步纯化, 获得 Xestobergsterol A。

【生物活性与毒性】 抑制大鼠柱细胞释放组织胺。

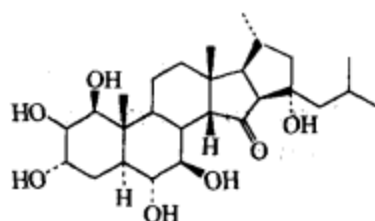
【参考文献】 1. Shoji N, et al. J Org Chem, 1992, 57: 2996

2. Takei M, et al. Experientia, 1993, 49: 145

3. Izzo I, et al. Tetrahedron Lett, 2001, 42: 8977

A0227 Xestobergsterol B

【结构式】



【分子式】 $C_{27}H_{44}O_7$

【相对分子质量】 480

【理化常数及谱学数据】 1H NMR(400MHz, pyridine- d_5) δ : 4.29(H-1), 4.46(H-2), 4.64(H-3), 2.85(H-4), 2.36(H-4), 2.60(H-5), 3.92(H-6), 5.15(H-7), 2.12(H-8), 2.01(H-9), 2.38(H-11), 2.21(H-11), 1.46(H-12), 1.21(H-12), 3.54(H-14), 2.73(d, $J = 10.3$ Hz, H-16), 1.71(dd, $J = 10.3, 10.3$ Hz, H-17), 1.22(s, H-18), 1.49(s, H-19), 2.63(H-20), 1.10(d, $J = 5.9$ Hz, H-21), 2.10(H-22), 1.33(dd, $J = 12.5, 12.5$ Hz, H-22), 1.98(dd, $J = 13.9, 5.1$ Hz, H-24), 1.60(dd, $J = 13.9, 6.6$ Hz, H-24), 2.21(H-25), 1.06(d, $J = 8.1$ Hz, H-26), 1.04(d, $J = 8.1$ Hz, H-27); ^{13}C NMR(100MHz, pyridine- d_5) δ : 77.0(t, C-1), 76.2(t, C-2), 70.6(d, C-3), 26.3(t, C-4), 42.0(d, C-5), 75.0(d, C-6), 75.0(d, C-7), 39.4(C-8), 48.3(d, C-9), 43.5(s, C-10), 25.0(C-11), 39.1(t, C-12), 38.1(s, C-13), 52.0(d, C-14), 217.6(s, C-15), 62.8(d, C-16), 58.0(d, C-17), 20.0(q, C-18), 10.0(q, C-19), 34.7(d, C-20), 20.8(q, C-21), 52.4(t, C-22), 82.2(s, C-23), 52.0(t, C-24), 25.0(d, C-25), 24.9(q, C-26), 25.3(q, C-27)。

【来源】 海绵 *Xestospongia bergquistia*

【分析方法】 活性部位乙酸乙酯层经中压硅胶柱色谱法和凝胶 LH-20 色谱法分离, 反相高效液相色谱法进一步纯化, 获得 Xestobergsterol B。

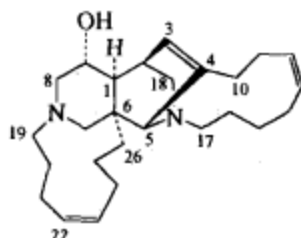
【生物活性与毒性】 抑制大鼠柱细胞释放组织胺。

【参考文献】 1. Shoji N, et al. J Org Chem, 1992, 57: 2996

2. Takei M, et al. *Experientia*, 1993, 49: 145
3. Izzo I, et al. *Tetrahedron Lett*, 2001, 42: 8977

A0228 Xestocyclamide A

【结构式】



【分子式】 $C_{26}H_{40}N_2O$

【相对分子质量】 396

【理化常数及谱学数据】 mp 89~91°C; $[\alpha]_D^{25} -13.5^\circ (c\ 0.019, \text{MeOH})$; HREIMS m/z 396.3143 $[M]^+$; EIMS m/z (rel. int.) 396 $[M]^+$, 65, 379 (20), 365 (30), 353 (20), 267 (45), 242 (10), 217 (25), 188 (42), 146 (25), 93 (100); IR (film) $\nu_{\max}$ (cm^{-1}): 3470, 2980, 1650, 1450, 1205; $^{13}\text{C}/^1\text{H}$ NMR (125/500MHz, CDCl_3 -DMSO 9:1) δ : 140.99 (C-4), 132.21 (C-12), 5.32 (H, m, H-12), 131.57 (C-13), 5.23 (H, m, H-13), 131.56 (C-22), 5.55 (H, dt, $J = 11.0, 5.0\text{Hz}$, H-22), 129.69 (C-23), 5.57 (H, m, H-23), 125.27 (C-3), 5.95 (H, d, $J = 7.0\text{Hz}$, H-3), 65.56 (C-9), 3.20 (H, dt, $J = 8.4, 4.1\text{Hz}$, H-9), 63.10 (C-5), 3.05 (H, s, H-5), 55.88 (C-17), 3.42, 3.65 (2H, m, H-17), 51.04 (C-8), 3.10 (H, t, $J = 11.2\text{Hz}$, H-8a), 2.85 (H, m, H-8b), 49.38 (C-1), 0.95 (H, dd, $J = 9.3, 0.8\text{Hz}$, H-1), 49.30 (C-18), 2.82, 2.25 (2H, m, H-18), 44.03 (C-6), 40.26 (C-25), 2.17, 1.80 (2H, m, H-25), 36.15 (C-10), 2.38, 2.24 (2H, m, H-10), 33.41, 2.90 (H, m), 26.35 (C-15), 1.80, 1.67 (2H, m, H-15), 26.28 (C-20), 1.50, 1.28 (2H, m, H-20), 25.78 (C-11), 2.20 (2H, m, H-11), 25.50 (C-26), 2.10, 1.53 (2H, m, H-26), 25.24 (C-14), 2.10, 1.53 (2H, m, H-14), 22.78 (C-21), 1.79, 1.53 (2H, m, H-21), 20.20 (C-24), 2.20 (2H, m, H-24), 19.36 (C-16), 1.80, 1.65 (2H, m, H-16).

【来源】 海绵 *Xestospongia* sp.

【分析方法】 海绵的提取物采用蛋白激酶 C (PKC) 抑制模型的活性追踪法进行分离, 经过正相和反相 HPLC 后用离心分配色谱 (CPC) 法得到纯品。结构通过 (HR) MS、IR 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

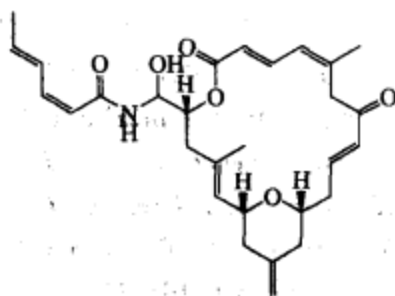
【生物活性与毒性】 抗蛋白激酶 C (PKC), $\text{IC}_{50} = 4\mu\text{g/mL}$, 抑制 IL-1 的释放, $\text{LC}_{50} = 1\mu\text{mol/L}$ 。

【参考文献】 1. Rodriguez J, et al. *J Am Chem Soc*, 1993, 115: 10436

2. Rodriguez J, et al. *Tetrahedron Lett*, 1994, 35: 4719

A0229 Zampanolide

【结构式】



【分子式】 $C_{29}H_{37}NO_6$

【相对分子质量】 495

【理化常数及谱学数据】 无定形粉末固体; $[\alpha]_D^{25} +101^\circ (c\ 0.12, \text{CH}_2\text{Cl}_2)$; UV (MeOH) $\lambda_{\max}$ (nm) (ϵ): 230

(25000), 264(30000); IR(CCl₄) $\nu_{\max}$ (cm⁻¹): 3450, 2950, 1720, 1680, 1645; CD(MeOH) $\Delta\epsilon$ - 30(260nm), + 45(227nm); ¹H NMR(300MHz, DMSO-d₆) δ : 8.29(1H, d, 9.2, NH), 7.52(1H, dd, 15.0, 11.6, H-3), 7.44(1H, ddq, 14.7, 11.3, 1.2, H-4'), 6.74(1H, ddd, 15.3, 8.6, 5.5, H-9), 6.37(1H, t 11.3, H-3'), 6.11(1H, d, 5.2, OH), 6.20(1H, d, 11.6, H-4), 5.97(1H, m, H-5'), 5.95(1H, d, 15.3, H-8), 5.93(1H, d, 15.0, H-2), 5.65(1H, d, 11.3, H-2'), 5.33(1H, ddd, 9.2, 6.0, 5.2, H-20), 5.10(1H, d, 7.6, H-16), 4.96(1H, ddd, 10.0, 6.0, 1.8, H-19), 4.73(2H, s, H-22), 4.12(1H, d, 14.4, H-6), 3.87(1H, ddd, 2.7, 7.6, 11.3, H-15), 3.27(1H, m, H-11), 3.01(1H, d, 14.4, H-6), 2.33(1H, m, H-18), 2.30(2H, m, H-10), 2.17(1H, brd, 12.8, H-12), 2.09(1H, m, H-18), 2.07(1H, m, H-14), 1.88(1H, m, H-14), 1.84(1H, m, H-12), 1.79(1H, dd, 6.7, 1.2, H-6'), 1.75(3H, s, H-21), 1.61(3H, s, H-23); ¹³C NMR(75MHz, DMSO-d₆) δ : 165.5(C-1), 120.6(C-2), 139.5(C-3), 125.1(C-4), 143.0(C-5), 44.8(C-6), 197.2(C-7), 130.8(C-8), 145.8(C-9), 39.2(C-10), 76.0(C-11), 40.3(C-12), 143.7(C-13), 40.3(C-14), 75.1(C-15), 129.0(C-16), 132.4(C-17), 40.8(C-18), 71.9(C-19), 72.9(C-20), 23.6(C-21), 108.9(C-22), 16.6(C-23), 165.2(C-1'), 119.2(C-2'), 140.6(C-3'), 128.6(C-4'), 137.1(C-5'), 18.3(C-6'); HRFABMS m/z 496.2683, (M + H)⁺, calcd for C₂₉H₃₈NO₆, 496.2699^[1].

【来源】 海绵未鉴定种属^[1]

【分析方法】 样品用 acetone 提取, 反复硅胶柱层析 (hexane-EtOAc), HPLC (CH₃CN-H₂O 7:1) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 细胞毒活性, 抗 P388、A549、HT29、MEL28 IC₅₀ 值 1~5ng/mL^[1]。

【参考文献】 1. Tanaka, et al. Tetrahedron Lett, 1996, 37: 5535

2. Higa T, et al. ACS Symp Ser, 2000, 745: 12

3. Smith III A B, et al. J Am Chem Soc, 2001, 123: 12426

4. Smith III A B, et al. Org Lett, 2002, 4: 635

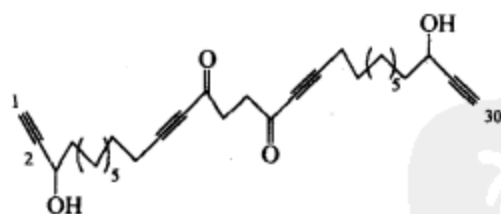
5. Smith III A B, et al. J Am Chem Soc, 2002, 124: 11102

6. Hoye T R, et al. J Am Chem Soc, 2003, 125: 9576

7. Crimmins M T, et al. Heterocycles, 2004, 62: 179

A0230 (3R,28R)-3,28-Dihydroxy-1,12,18,29-triacont-tetrayne-14,17-dione

【结构式】



【分子式】 C₃₀H₄₂O₄

【相对分子质量】 476

【理化常数及谱学数据】 淡黄色油状物; $[\alpha] + 22^\circ$ (c 0.18, CHCl₃); RFABMS m/z 489.2971 [M + Na]⁺; IR(CHCl₃) $\nu_{\max}$ (cm⁻¹): 3600, 3400, 3300, 2200, 1675; UV $\lambda_{\max}$: 225(nm) (sh), 221nm; ¹H NMR(400MHz, CDCl₃) δ : 1.31~1.40(16H, m), 1.45(4H, m, H-5, H-26), 1.57(4H, q, J = 7.1Hz, H-10, H-21), 1.70(4H, m, H-4, H-27), 1.98(2H, brs, —OH), 2.35(4H, t, J = 7.1Hz, H-11, H-20), 2.46(2H, d, J = 2.0Hz, H-1, H-30), 2.88(4H, s, H-15, H-16), 4.36(2H, td, J = 4.4, 2.0Hz, H-3, H-28); ¹³C NMR(100MHz, CDCl₃): 18.96(C-11, C-20), 24.91(C-5, C-26), 27.56(C-10, C-21), 28.76, 28.84, 29.08, 29.22(C-6-C-9, C-22-C-25), 37.60(C-4, C-27), 38.93(C-15, C-16), 62.26(C-3, C-28), 72.83(C-1, C-30), 80.54(C-12, C-19), 85.01(C-2, C-29), 95.31(C-13, C-18), 185.47(C-14, C-17)。

【来源】 海绵 *Petrosia* sp.

【分析方法】 海绵的甲醇提取物在水和二氯甲烷间分配, 二氯甲烷层经 Sephadex LH-20 (甲醇-二氯甲

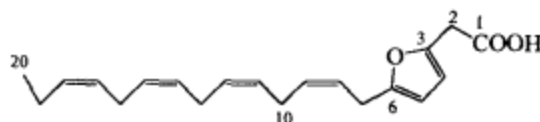
烷1:1)、硅胶柱(苯-乙酸乙酯)和反相HPLC(甲醇-水)得到纯品。结构通过(HR)MS、UV、IR和NMR(^1H NMR、 ^{13}C NMR和2D-NMR)等方法确定。

【生物活性与毒性】 1. 对海鞘(*Styela partita*) 蛋细胞分裂的抑制作用, $\text{IC}_{50} = 30\mu\text{g/mL}$ 。2. 对海虾的毒性, $\text{LC}_{50} = 0.1\mu\text{g/mL}$ 。

【参考文献】 1. Chi, et al. Chem Lett, 1994, 89

A0231 (8Z,11Z,14Z,17Z)-3,6-Epoxy-eicosane-3,5,8,11,14,17-hexene acid

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{20}\text{H}_{26}\text{O}_3$

【相对分子质量】 314

【理化常数及谱学数据】 黄色油状物; $\text{IR}\nu_{\text{max}}(\text{cm}^{-1})$: 3420, 2960, 1720, 1575, 1410, 1230, 1020, 900, 790, 720; $\text{UV}(\text{MeOH})\lambda_{\text{max}}(\text{nm})$: 220, 281; ^1H NMR(CDCl_3) δ : 3.66(2H, s, H-2), 6.13(H, d, $J = 3.2\text{Hz}$, H-4), 5.93(H, d, $J = 3.2\text{Hz}$, H-5), 3.39(2H, d, $J = 6.3\text{Hz}$, H-7), 5.54(2H, m, $J = 6.3, 10.6\text{Hz}$, H-8, H-9), 2.82(6H, m, H-10, H-13, H-16), 5.37(6H, m, H-11, H-12, H-14, H-15, H-17, H-18), 2.06(2H, m, $J = 7.6, 7.0\text{Hz}$, H-19), 0.96(3H, t, $J = 7.6\text{Hz}$, H-20); ^{13}C NMR(CDCl_3): 174.84(C-1), 33.80(C-2), 155.66(C-3), 108.99(C-4), 105.99(C-5), 145.45(C-6), 26.28(C-7), 124.64(C-8), 130.07(C-9), 25.59(C-10), 127.78(C-11), 127.70(C-12), 25.59(C-13), 128.47(C-14), 128.57(C-15), 25.50(C-16), 126.97(C-17), 130.01(C-18), 20.52(C-19), 14.14(C-20)。

【来源】 新西兰海绵 *Hymeniacidon Hauraki*

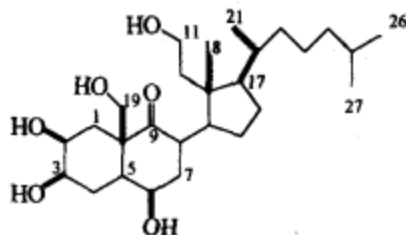
【分析方法】 海绵的甲醇-甲苯(4:1)提取物在水和氯仿间分配, 氯仿层上硅胶柱, 石油醚-乙酸乙酯梯度洗脱后再用硅胶柱(石油醚-乙酸乙酯)纯化得到。结构通过UV、IR和NMR(^1H NMR、 ^{13}C NMR和2D-NMR)等方法确定。

【生物活性与毒性】 1. 对P-388肿瘤细胞毒作用, $\text{IC}_{50} = 13.4\mu\text{g/mL}$ 。2. $5\mu\text{g/disk}$ 剂量下, 对BSC-1细胞(非洲绿猴肾肿瘤细胞)抑制环能扩展2~4mm。

【参考文献】 1. Prinsep R, et al. J Nat Prod, 1994, 57 (11): 1557

A0232 9,11-Secosterol-2 β ,3 β ,6 β ,11,17-pentene-9-one

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{27}\text{H}_{48}\text{O}_6$

【相对分子质量】 468

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha] -18.5^\circ(c\ 0.35, \text{MeOH})$; $\text{HRFABMS } m/z\ 491.3328[\text{M} + \text{Na}]^+$; $\text{CD}(\text{MeOH})(\theta)_{295} : -9100^\circ$; $\text{IR}(\text{film})\nu_{\text{max}}(\text{cm}^{-1})$: 3350, 1715; ^1H NMR(600MHz, CD_3OD) δ : 2.31(H, dd, $J = 12.8, 4.3\text{Hz}$, H-1a), 1.36(H, dd, $J = 12.8, 11.6\text{Hz}$, H-1b), 3.68(H, ddd, $J = 11.6, 4.8, 2.9\text{Hz}$, H-2), 3.83(H, m, H-3), 1.68, 1.14(2H, m, H-4), 2.34(H, m, H-5), 3.73(H, brq, $J = 2.5\text{Hz}$, H-6), 1.79, 2.07(2H, m, H-7), 3.35(H, ddd, $J = 13.6, 5.5, 3.2\text{Hz}$, H-8), 3.57(2H, dt, $J = 7.2, 1.1\text{Hz}$, H-11), 1.70, 1.57(2H, m, H-12), 2.52(H, ddd, $J = 11.3, 8.4, 3.5\text{Hz}$, H-14), 1.16, 1.48(2H, m, H-15), 1.13, 1.78

(2H, m, H-16), 1.55 (H, m, H-17), 0.77 (3H, s, H-18), 4.72, 3.51 (2H, d, $J = 11.1$ Hz, H-19), 1.49 (H, m, H-20), 1.00 (3H, d, $J = 6.6$ Hz, H-21), 1.42, 1.02 (2H, m, H-22), 1.43, 1.19 (2H, m, H-23), 1.13, 1.16 (2H, m, H-24), 1.54 (H, m, H-25), 0.88 (6H, d, $J = 6.6$ Hz, H-26, H-27); ^{13}C NMR (75 MHz, CD_3OD) δ : 33.0 (C-1), 71.6 (C-2), 69.7 (C-3), 35.1 (C-4), 42.5 (C-5), 69.2 (C-6), 36.7 (C-7), 40.5 (C-8), 212.6 (C-9), 57.6 (C-10), 59.1 (C-11), 41.3 (C-12), 46.6 (C-13), 42.6 (C-14), 23.5 (C-15), 27.0 (C-16), 50.8 (C-17), 17.8 (C-18), 71.9 (C-19), 35.7 (C-20), 19.9 (C-21), 36.7 (C-22), 25.6 (C-23), 40.6 (C-24), 29.1 (C-25), 22.9 (C-26), 23.1 (C-27)。

【来源】 海绵 *Stellatta* sp.

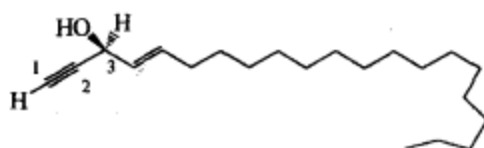
【分析方法】 海绵的乙醇提取物在水和二氯甲烷间分配, 二氯甲烷层经过反复的 flash 硅胶柱层析 (氯仿-甲醇-水), ODS 柱和 HPLC (78% 甲醇-水) 得到纯品。结构通过 (HR) MS、IR、UV、CD 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 抗真菌 *Mortierella ramaniana*, MIC=12.5 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 。

【参考文献】 1. Matsunaga, et al. *Experientia*, 1994, 50: 771

A0233 3(S)-Hydroxy-heneicisene-(4E)-ene-1-yne

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{21}\text{H}_{38}\text{O}$

【相对分子质量】 306

【理化常数及谱学数据】 无色固体; $[\alpha] + 11.0^\circ$ (c 0.21, MeOH); HREIMS m/z 306.2929 $[\text{M}]^+$; LREIMS m/z (rel. int.) 306(4), 123(22), 110(25), 109(40), 96(31), 95(40), 91(21), 83(27), 43(100); ^1H NMR (CDCl_3) δ : 0.86 (3H, d, $J = 7$ Hz, H-21), 1.23-1.36 (28H, m), 1.77 (H, br, —OH), 2.04 (2H, q, $J = 7$ Hz), 2.54 (H, d, $J = 1$ Hz), 4.82 (H, brd, $J = 5.5$ Hz), 5.58 (H, ddt, $J = 15.5, 5.5, 1$ Hz), 5.90 (H, dtd, $J = 15, 7, 1$ Hz); ^{13}C NMR (CDCl_3): 14.12 (C-21), 22.68 (C-20), 28.82, 29.18, 19.47, 29.58, 29.69, 31.92, 31.93 (CH_2), 62.83 (C-3), 73.96 (C-1), 83.32 (C-2), 128.29 (C-4), 134.70 (C-5)。

【来源】 海绵 *Cribrachalina vasculum*

【分析方法】 海绵的二氯甲烷-甲醇 (1:1) 和甲醇的提取物混合后, 在正己烷和 90% 甲醇-水间分配, 正己烷层经过硅胶柱层析和反相 HPLC (90% 甲醇-水) 后得到纯品。平面结构通过 MS 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。立体结构由 Mosher 法确定。

【生物活性与毒性】 在 NCI 肿瘤株筛选中, 对肺癌细胞 H-522 和卵巢癌细胞 (IGROV-1) 有较好的选择性, 敏感度是其他细胞平均水平的 10~100 倍。

【参考文献】 1. Hallock Y F, et al. *J Nat Prod*, 1995, 58 (12): 1801

A0234 18-Bromo-(13E,17E)-octadecane-9,17-diene-5,7,15-triynic acid

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{18}\text{H}_{19}\text{BrO}_2$

【相对分子质量】 346/348

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; FABMS(−) m/z 345/347 ($\text{M} - \text{H}$); IR (film) ν_{max} (cm^{-1}): 3500~2400, 2200, 1700, 1555, 1190, 950, 910, 745; UV (MeOH) λ_{max} (nm): 287, 267, 227, 217; ^1H NMR (300 MHz,

CDCl_3) δ : 2.50(2H, t, $J = 7.3\text{ Hz}$, H-2), 1.85(2H, tt, $J = 7.3, 7.0\text{ Hz}$, H-3), 2.42(2H, t, $J = 7.0\text{ Hz}$, H-4), 2.25(2H, m, H-9), 1.52(2H, m, H-10), 1.52(2H, m, H-11), 2.12(2H, m, H-12), 6.15(H, dt, $J = 15.8, 6.5\text{ Hz}$, H-13), 5.54(H, dd, $J = 15.8, 2.3\text{ Hz}$, H-14), 6.16(H, dd, $J = 14.0, 2.3\text{ Hz}$, H-17), 6.55(H, d, $J = 14.0\text{ Hz}$, H-18); $^{13}\text{C NMR}(\text{CDCl}_3)$: 179.1(C-1), 32.6(C-7), 23.2(C-3), 18.5(C-4), 75.9(C-5), 66.3(C-6), 65.4(C-7), 77.4(C-8), 18.9(C-9), 27.6(C-11, C-10), 29.7(C-12), 145.2(C-13), 109.6(C-14), 90.5(C-15), 84.6(C-16), 117.7(C-17, C-18)。

【来源】 海绵 *Petrosia volcano*

【分析方法】 海绵的乙醇提取物的乙醚和正丁醇萃取层经过硅胶柱(甲醇:氯仿)分段后,过 ODS flash 柱(75%甲醇-水, 0.1%TFA),再使用反相 HPLC 纯化得到。结构通过 MS、IR、UV 和 NMR ($^1\text{H NMR}$ 、 $^{13}\text{C NMR}$ 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 对真菌 *Mortierella ramannianus* 有较强的抑制作用。

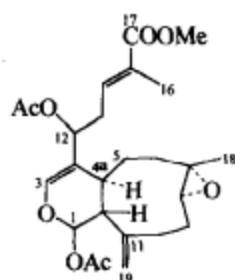
【参考文献】 1. Fusetani N, et al. Tetrahedron, 1993, 49 (6): 1203

鄧平卿
和
PDG

B 珊瑚天然产物

B0001 Acalycigorgin B

【结构式】



【分子式】 $C_{25}H_{34}O_8$

【相对分子质量】 442

【理化常数及谱学数据】 无色固体; $[\alpha] + 70.8^\circ (c 0.13, CHCl_3)$; HREIMS m/z 402. 2063 $[M - AcOH]^+$; IR $\nu_{max} (cm^{-1})$: 3080, 1740, 1720, 1665, 1615, 1230, 905; 1H NMR (400MHz, $CHCl_3$) δ : 2. 22 (H, m, H-4a), 2. 40 (H, brs, H-11a), 2. 94 (H, dd, $J = 10. 7, 3. 7$ Hz, H-8), 3. 73 (3H, s, $-OCH_3$), 4. 98, 5. 00 (2H, brs, H-19), 5. 39 (H, t, $J = 7. 3$ Hz, H-12), 5. 96 (H, d, $J = 2. 1$ Hz, H-1), 6. 53 (H, d, $J = 1. 8$ Hz, H-3), 6. 60 (H, tq, $J = 7. 3, 1. 2$ Hz, H-14), 2. 03, 2. 08 (各 3H, s, 2 个 $-OAc$), 1. 31, 1. 85 (各 3H, s, H-16, H-18); ^{13}C NMR (100MHz, $CHCl_3$): 12. 81 (C-16), 16. 59 (C-18), 24. 39 (C-9), 29. 79 (C-5), 31. 96 (C-13), 32. 65 (C-10), 36. 98 (C-4a), 39. 73 (C-6), 47. 24 (C-11a), 51. 80 ($-OCH_3$), 59. 69 (C-7), 62. 52 (C-8), 73. 15 (C-12), 91. 29 (C-1), 114. 67 (C-19), 115. 37 (C-4), 130. 22 (C-15), 135. 86 (C-14), 141. 26 (C-3), 148. 44 (C-11), 167. 94 (C-17), 169. 36 and 170. 12 (2 个 OAc), 20. 91 and 21. 25 (2 个 OAc).

【来源】 日本柳珊瑚 *Acalycigorgia* sp.

【分析方法】 柳珊瑚甲醇提取物在水和二氯甲烷间分配, 二氯甲烷层上 Sephadex LH-20 (甲醇-二氯甲烷 1:1) 和硅胶柱 (正己烷-乙酸乙酯), 再上反相 HPLC (甲醇-水) 得到纯品。结构通过 (HR) MS、IR 和 NMR (1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

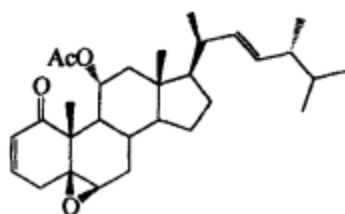
【生物活性与毒性】 在 50 $\mu g/mL$ 下对海鞘 (*Styela partita*) 蛋的有丝分裂有抑制作用。

【参考文献】 1. Ochi M, et al. Heterocycles, 1993, 36 (1): 41

2. Ochi M, et al. Heterocycles, 1994, 38: 151

B0002 Acetic acid 10, 13-dimethyl-1-oxo-17-(1, 4, 5-trimethyl-hex-2-enyl)-1, 4, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17-tetradecahydro-20-oxa-cyclopropa [5, 6] cyclopenta [α] phenanthren-11-yl ester

【结构式】



【分子式】 $C_{30}H_{44}O_4$

【相对分子质量】 468

【理化常数及谱学数据】 无色固体; mp 143.5~144°C; $[\alpha]_D^{20} - 75.6^\circ$ (c 0.14, $CHCl_3$); UV(EtOH) λ_{max} (ϵ); 224(5600) nm; IR(KBr) ν_{max} (cm^{-1}); 1728, 1685, 1255; 1H NMR(400MHz, $CDCl_3$) δ : 6.12(1H, dd, 3.0, 10.1, H-2), 6.67(1H, ddd, 2.5, 6.1, 10.1, H-3), 2.85(1H, td, 2.8, 12.8, H-4), 3.08(1H, brs, H-6), 2.12(1H, td, 3.1, 14.7, H-7), 4.98(1H, dt, 10.5, 5.4, H-11), 2.34(1H, dd, 12.3, 5.3, H-12), 0.73(3H, s, H-18), 1.28(3H, s, H-19), 0.97(3H, d, 6.6, H-21), 5.12(1H, dd, 8.1, 15.3, H-22), 5.19(1H, dd, 7.6, 15.3, H-23), 0.80(3H, d, 6.7, H-26), 0.82(3H, d, 6.6, H-27), 0.89(3H, d, 6.9, H-28), 1.94(3H, s, AcO); ^{13}C NMR(125MHz, $CDCl_3$) δ : 201.8(C-1), 130.1(C-2), 140.3(C-3), 33.2(C-4), 62.3(C-5), 62.3(C-6), 31.7(C-7), 28.5(C-8), 46.8(C-9), 50.1(C-10), 70.4(C-11), 45.3(C-12), 42.5(C-13), 55.1(C-14), 24.0(C-15), 28.5(C-16), 55.8(C-17), 12.5(C-18), 13.5(C-19), 39.9(C-20), 19.6(C-21), 135.2(C-22), 132.2(C-23), 42.8(C-24), 33.0(C-25), 19.9(C-26), 20.9(C-27), 17.6(C-28), 170.2, 21.4(AcO); EIMS m/z 468(M^+ , 0.7)^[1]。

【来源】 软珊瑚 *Clavularia viridis*^[1]

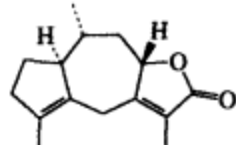
【分析方法】 样品 MeOH 提取, hexane 萃取部分反复硅胶柱层析 (hexane-EtOAc), HPLC (MeOH-H₂O 95:5) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 细胞毒活性, 在 20 μ g/mL 浓度下对 HeLa S3 和 15PDL 细胞表现抑制活性^[1]。

【参考文献】 1. Watanabe K, et al. Steroids, 1996, 61: 439

B0003 Americanolide D

【结构式】



【分子式】 $C_{15}H_{20}O_2$

【相对分子质量】 232

【理化常数及谱学数据】 黄色油状物; $[\alpha]_D^{23} - 15.0^\circ$ (c 1.0, CH_3Cl); UV(MeOH) λ_{max} ; 208nm (ϵ 7467); IR(neat) ν_{max} (cm^{-1}); 2962, 2931, 2875, 1754, 1454, 1379, 1330, 1216, 1169, 1102, 1021, 756; 1H NMR(300MHz, $CDCl_3$) δ : 4.68(1H, dd, 11.4, 3.6, H-8), 3.56(1H, d, 13.3, H-6 β), 2.87(1H, m, H-1), 2.62(1H, brd, 13.5, H-6 α), 2.20(1H, m, H-3 β), 2.11(1H, m, H-3 α), 2.08(1H, m, H-10), 1.84(3H, d, 1.1, H-13), 1.82(1H, m, H-9 β), 1.79(1H, m, H-2 α), 1.68(3H, s, H-15), 1.39(1H, m, H-9 α), 1.27(1H, m, H-2 β), 0.99(3H, d, 7.1, H-14); ^{13}C NMR(75MHz, $CDCl_3$) δ : 52.4(C-1), 24.9(C-2), 36.1(C-3), 131.3(C-4), 136.8(C-5), 24.8(C-6), 162.0(C-7), 105.7(C-8), 36.0(C-9), 27.8(C-10), 129.0(C-11), 172.6(C-12), 8.6(C-13), 19.8(C-14), 14.6(C-15); EIMS m/z [M^+] 232(100), 217(22), 203(31), 190(16), 175(11), 161(20), 150(22), 147(19), 133(29), 121(48), 119(28), 109(52), 107(48), 105(34), 95(30), 93(27), 91(51), 81(26), 79(36), 77(35); HREIMS m/z [M^+] 232.1461, calcd for $C_{15}H_{20}O_2$ 232.1463^[1]。

【来源】 珊瑚 *Pseudopterogorgia americana*^[1]

【分析方法】 样品 hexane 提取, 硅胶柱层析 (hexane-acetone), 硅胶柱层析 (hexane-iPrOH 9:1), HPLC (hexane-i-PrOH 97:3) 得纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 具有强的细胞毒活性, 抗 HeLa 和 CHO-K1 cells ED_{50} 值分别为 30 μ g/mL 和 100 μ g/mL, 抗人类结肠癌细胞 KM-12 IC_{50} 0.1 μ g/mL^[1]。

【参考文献】 1. Rodriguez A D, et al. J Nat Prod, 1997, 60: 207

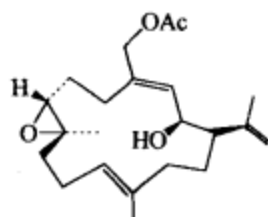
2. Rodriguez A D, et al. J Nat Prod, 1996, 59: 653

3. Richardson P L, et al. Acta Crystallogr Sect C, 1998, 66

4. Richardson P L, et al. Acta Crystallogr Sect C, 1998, 54: 66

B0004 Asperdiol acetate

【结构式】



【分子式】 $C_{22}H_{34}O_4$

【相对分子质量】 362

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} - 52.4^\circ (c 2.5, CHCl_3)$; UV(MeOH) λ_{max} : 206nm (ϵ 9900); IR(neat) ν_{max} (cm^{-1}): 3467, 3068, 2927, 2856, 1740, 1640, 1453, 1381, 1229, 1053, 1025, 963, 885, 800; 1H NMR(300MHz, $CDCl_3$) δ : 5.46(1H, brd, 7.8, H-3), 5.12(1H, brt, 6.9, H-11), 4.96(1H, s, H-17a), 4.76(1H, s, H-17b), 4.52(1H, s, H-18a), 4.48(1H, s, H-18b), 4.48(1H, m, H-2), 2.68(1H, dd, 4.8, 6.3, H-7), 2.31(2H, m, H-5), 2.18(2H, m, H-10), 2.07(3H, s, AcO), 2.04(1H, m, H-1), 2.01(1H, m, H-9a), 2.00(2H, m, H-13), 1.81(1H, m, H-6a), 1.75(3H, s, H-16), 1.73(1H, m, H-14a), 1.61(3H, s, H-20), 1.50(1H, m, H-14b), 1.48(1H, m, H-6b), 1.31(1H, m, H-9b), 1.19(3H, s, H-19); ^{13}C NMR(75MHz, $CDCl_3$) δ : 50.3(C-1), 68.3(C-2), 132.1(C-3), 135.4(C-4), 26.2(C-5), 26.5(C-6), 64.6(C-7), 60.2(C-8), 37.4(C-9), 24.0(C-10), 124.8(C-11), 134.5(C-12), 36.0(C-13), 28.0(C-14), 145.5(C-15), 22.5(C-16), 113.9(C-17), 67.0(C-18), 16.6(C-19), 15.8(C-20), 170.7, 20.9(AcO); EIMS m/z 362(0.2), 344(4), 302(6), 284(11), 152(35), 135(45), 121(48), 109(67), 95(84), 81(100), 69(62); HREIMS m/z $[M]^+$ 362.2440(calcd for $C_{22}H_{34}O_4$ 362.2457).

【来源】 柳珊瑚 *Eunicea succinea*^[1]

【分析方法】 样品 CH_3Cl -MeOH (1:1) 提取, 提取物 H_2O -hexane 萃取, hexane 部分分子排阻柱层析 Bio-beadsSX-2 (toluene), 硅胶柱层析 (hexane-EtOAc 7:3), 反复硅胶柱层析 (hexane-ipropanol, $CHCl_3$ -acetone), 反相 HPLC (MeOH- H_2O 7:3) 得纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 具有细胞毒样活性, 抗 CNS 癌细胞 (SNB-75) GI_{50} 值为 6.25×10^{-7} mol/L, 抗黑肿瘤 (M14) 和乳腺癌细胞 (HS 578T) GI_{50} 值为 8.28×10^{-6} mol/L^[1]。

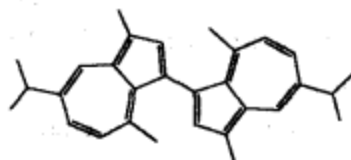
【参考文献】 1. Rodriguez A D, et al. J Nat Prod, 1997, 60: 1134

2. Weinheimer A J, et al. Tetrahedron Lett, 1977, 1295

3. Still W C, et al. J Org Chem, 1983, 48: 4785

B0005 2,2-Biguaiazulenyl

【结构式】



【分子式】 $C_{30}H_{34}$

【相对分子质量】 394

【理化常数及谱学数据】 淡青色固体; mp 88~90°C; UV-Vis(MeOH) λ_{max} (nm) ($\lg \epsilon$): 626(3.40), 374(4.29), 354(4.21), 309(4.64), 283(4.80), 250(4.66); IR(KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 2960, 2925, 1540, 1460, 1365, 1200, 1160, 1050, 940, 920, 860, 810; 1H NMR(500MHz, C_6D_6) δ : 8.23(2H, d, 2.0, H-6, H-6), 7.62

(2H, s, H-3, H-3), 7.13(2H, dd, 10.7, 2.0, H-8, H-8), 6.64(2H, d, 10.7, H-9, H-9), 2.81(2H, m, H-11, H-11), 2.63(6 H, s, Me-15, Me-15), 2.28(6 H, s, Me-14, Me-14), 1.23(12 H, d, 6.8, Me-12, Me-12, Me-13, Me-13); ^{13}C NMR(125MHz, C_6D_6) δ : 146.75(C, C-10, C-10), 141.75(CH, C-3, C-3), 139.08(C, C-7, C-7), 138.85(C, C-4, C-4), 134.80(CH, C-8, C-8), 134.11(C, C-1, C-1), 133.92(CH, C-6, C-6), 128.35(C, C-2, C-2), 126.54(CH, C-9, C-9), 123.80(C, C-5, C-5), 38.11(CH, C-11, C-11), 26.67(CH_3 , C-14, C-14), 24.73(CH_3 , C-12, C-12), 24.72(CH_3 , C-13, C-13), 13.05(CH_3 , C-15, C-15); HREIMS $[M]^+$ m/z obsd 394.2638, $\text{C}_{30}\text{H}_{34}$ requires 394.2660; LREIMS m/z 394(100, rel int), 337(29), 321(9), 266(7), 119(12), 80(18)^[1]。

【来源】 柳珊瑚 *Calicogorgia granulose*^[1]

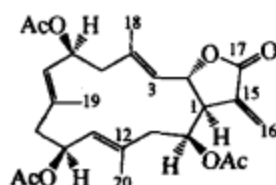
【分析方法】 样品 CH_2Cl_2 提取, 粗提物硅胶柱层析 (hexane-EtOAc), HPLC (CH_3CN) 得到纯化化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 抗菌活性, 在抗菌的纸盘实验中, 浓度 $25\mu\text{g/mL}$, 盘直径 13mm, 抑制直径分别为: *Escherichia coli* 3mm; *Bacillus subtilis* 8mm; *Candida albicans* 5mm^[1]。

【参考文献】 1. Seo Y, et al. J Nat Prod, 1996, 59: 985

B0006 Clavularial A

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{26}\text{H}_{34}\text{O}_8$

【相对分子质量】 474

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} -19.5^\circ$ (c 0.13, CHCl_3); UV(OH) λ_{max} : 208(4.10)nm; IR (KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 1763, 1731, 1665, 1237; ^1H NMR(CDCl_3) δ : 5.30(dd, $J = 3.4, 8.8$, H-2), 5.03(brd, $J = 8.8$, H-3), 5.57(ddd, $J = 5.4, 9.1, 10.0$, H-6), 5.16(brd, $J = 9.1$, H-7), 5.67(ddd, $J = 5.4, 9.0, 10.1$, H-10), 5.15(brd, $J = 9.0$, H-11), 2.17(dd, $J = 8.8, 13.5$, H-13), 2.54(brd, $J = 13.5$, H-13), 5.31(dd, $J = 3.7, 8.8$, H-14), 5.66(d, $J = 1.9$, H-16), 6.35(d, $J = 2.4$, H-16), 1.88(brs, H-18), 1.68(brs, H-19), 1.82(brs, H-20), 2.00(s, —AcO), 2.02(s, —AcO), 2.04(s, —AcO); ^{13}C NMR(CDCl_3) δ : 46.2(C-1), 73.4(C-2), 124.3(C-3), 139.7(C-4), 42.3(C-5), 68.9(C-6), 127.0(C-7), 137.3(C-8), 44.4(C-9), 66.9(C-10), 126.7(C-11), 138.0(C-12), 41.9(C-13), 73.6(C-14), 136.4(C-15), 123.7(C-16), 169.3(C-17), 19.9(C-18), 16.3(C-19), 15.8(C-20), 20.9(CH_3CO), 21.2(CH_3CO), 21.3(CH_3CO), 170.0(CH_3CO), 170.1(CH_3CO); HREIMS m/z 474.2252[calcd for $\text{C}_{26}\text{H}_{34}\text{O}_8$, 474.2254(M)⁺].

【来源】 软珊瑚

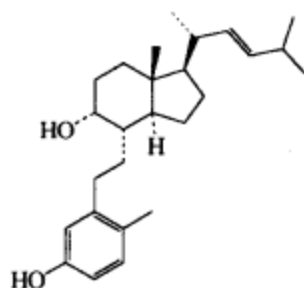
【分析方法】 海绵的甲醇提取物分配于 EtOAc 和 H_2O 之间, 含水层以正丁醇萃取, 乙酸乙酯溶解部分用硅胶柱分离, 正己烷-乙酸乙酯梯度洗脱。硅胶柱反复柱层析后, HPLC 分离纯化得到化合物 Clavularial A。

【生物活性与毒性】 体外试验对人结肠腺癌细胞 (DLD-1) 和人 T 淋巴白血病细胞 (MOLT-4) 显示完全抑制增殖作用。其 IC_{50} 值分别为 $4.2\mu\text{g/mL}$ 和 $0.9\mu\text{g/mL}$ 。

【参考文献】 1. Iwashima M, et al. J Nat Prod, 2000, 63: 1647

B0007 Calicoferol H

【结构式】



【分子式】 $C_{26}H_{40}O_2$

【相对分子质量】 384

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} - 6.6^\circ$ (c 0.1, $CHCl_3$); UV (MeOH) λ_{max} (lg ϵ): 219 (3.84) nm, 281 (3.32) nm; IR (KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3360, 2955, 2880, 1610, 1590, 1500, 1370, 1260, 1160, 970; 1H NMR (500 MHz, $CDCl_3$) δ : 6.98 (1H, d, 8.3, H-1), 6.65 (1H, d, 2.5, H-4), 6.57 (1H, dd, 8.3, 2.5, H-2), 5.27 (1H, dd, 15.6, 6.6, H-23), 5.16 (1H, dd, 15.6, 8.3, H-22), 4.04 (1H, brs, H-9), 2.71 (1H, ddd, 13.2, 11.5, 5.1, H-6), 2.42 (1H, ddd, 13.2, 10.7, 5.4, H-6), 2.22 (3H, s, H-19), 2.19 (1H, m, H-24), 2.00 (1H, m, H-20), 1.77 (1H, m, H-12), 1.75 (2H, m, H-11), 1.65 (1H, m, H-16), 1.56 (1H, m, H-15), 1.53 (1H, m, H-8), 1.52 (3H, m, H-7, H-14), 1.50 (1H, m, H-12), 1.23 (1H, m, H-16), 1.20 (1H, m, H-17), 1.09 (1H, m, H-15), 1.00 (3H, d, 6.8, H-21), 0.94 (6H, d, 6.8, H-25, H-26), 0.70 (3H, s, H-18); ^{13}C NMR (125 MHz, $CDCl_3$) δ : 131.0 (C-1), 112.4 (C-2), 153.5 (C-3), 115.4 (C-4), 142.7 (C-5), 30.9 (C-6), 30.3 (C-7), 40.9 (C-8), 67.2 (C-9), 127.9 (C-10), 30.2 (C-11), 34.1 (C-12), 42.8 (C-13), 47.8 (C-14), 24.4 (C-15), 27.9 (C-16), 56.0 (C-17), 11.3 (C-18), 18.4 (C-19), 39.9 (C-20), 20.8 (C-21), 133.4 (C-22), 134.9 (C-23), 31.0 (C-24), 22.8 (C-25), 22.8 (C-26); LREIMS m/z (rel int) 384 (40), 366 (5), 349 (4), 269 (7), 229 (4), 147 (14), 134 (100), 121 (59), 97 (26); HREIMS $[M]^+$ m/z 384.3023 (calcd for $C_{26}H_{40}O_2$ 384.3028).

【来源】 柳珊瑚 *Muricella*^[1]

【分析方法】 样品二氯甲烷提取, 硅胶柱层析 (Hexane-EtOAc), 正相 HPLC (hexane-EtOAc 85:15), 反相 HPLC (MeCN) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 具有强的细胞毒活性, 抗人类白血病细胞 K-562 LC_{50} 值 10.7 $\mu g/mL$, 此外具有抗 PLA2 活性, 在 50 $\mu g/mL$ 浓度下抑制 67%^[1]。

【参考文献】 1. Seo Y, et al. J Nat Prod, 1998, 61: 1441

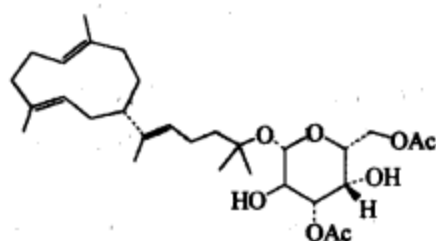
2. Ochi M, et al. Chem Lett, 1991, 427

3. Seo Y, et al. J Nat Prod, 1995, 58: 1291

4. Sala G D, et al, Tetrahedron Lett, 1998, 39: 4741

B0008 Calyculaglycoside A

【结构式】



【分子式】 $C_{30}H_{48}O_8$

【相对分子质量】 536

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{24} + 9.2^\circ$ (c 0.6, $CHCl_3$); UV (MeOH) λ_{max} : 214 nm (lg ϵ 3.88); IR (neat) ν_{max} (cm^{-1}): 3445, 2922, 2872, 2853, 1748, 1733, 1456, 1373, 1259, 1242, 1163, 1090, 1037, 978; 1H NMR (300 MHz, $CDCl_3$) δ : 5.06 (1H, brt, 6.3, H-5), 4.99 (1H, brt, 6.4, H-12), 4.94 (1H, brt, 6.6, H-1),

4.93(1H, dd, 3.3, 9.3, H-3), 4.51(1H, d, 7.8, H-1), 4.34(2H, brs, H-6), 3.50(1H, brs, H-5), 3.49(1H, brs, H-4), 3.45(1H, t, 9.0, H-2), 2.16(3H, s, AcO-3), 2.14(1H, m, H-6 α), 2.10(2H, m, H-2), 2.08(3H, s, AcO-6), 2.07(2H, m, H-3), 2.06(2H, m, H-13), 1.99(2H, m, H-9), 1.97(2H, m, H-14), 1.87(1H, m, H-6 β), 1.62(1H, m, H-8 β), 1.56(3H, s, H-20), 1.54(3H, s, H-19), 1.54(3H, s, H-18), 1.45(1H, m, H-7), 1.23(3H, s, H-17), 1.22(3H, s, H-16), 1.22(1H, m, H-8 α); ^{13}C NMR(75MHz, CDCl_3) δ : 125.7(C-1), 24.7(C-2), 38.9(C-3), 133.5(C-4), 125.8(C-5), 28.2(C-6), 47.8(C-7), 28.2(C-8), 39.4(C-9), 133.1(C-10), 134.2(C-11), 125.0(C-12), 24.0(C-13), 37.9(C-14), 81.7(C-15), 23.8(C-16), 24.8(C-17), 15.6(C-18), 15.6(C-19), 15.3(C-20), 97.1(C-1), 72.2(C-2), 78.0(C-3), 69.7(C-4), 73.9(C-5), 63.5(C-6), 172.4, 21.0(AcO-3), 171.3, 20.8(AcO-6); EIMS m/z 272(55), 257(30), 247(3), 229(19), 201(11), 189(25), 175(19), 163(13), 162(14), 161(32), 149(26), 148(27), 147(32), 137(16), 136(39), 135(45), 134(28), 133(37), 127(11), 123(34), 122(35), 121(93), 119(40), 109(36), 107(78), 93(100), 91(35), 78(42), 72(50), 68(87); HRFABMS m/z $[\text{M} + \text{Na}]^+$ obsd 559.32474, $\text{C}_{30}\text{H}_{48}\text{O}_8\text{Na}$ required 559.32469; HREIMS m/z $[\text{M} - \text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{O}_7 - \text{H}_2\text{O}]^+$ obsd 272.25137, $\text{C}_{20}\text{H}_{32}$ required 272.25040^[1]。

【来源】 柳珊瑚 *Eunicea* sp.^[1]

【分析方法】 样品 $\text{CH}_3\text{Cl}-\text{MeOH}$ (1:1) 提取, 提取物 $\text{H}_2\text{O}-\text{hexane}$ 萃取, hexane 部分分子排阻柱层析 Bio-beadsSX-3 (toluene), 硅胶柱层析 (hexane-EtOAc 4:1) 得纯化合物^[1]。

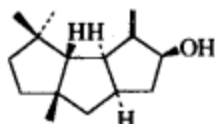
【生物活性与毒性】 具有强的抗感染活性^[1]。

【参考文献】 1. Cobar O M, et al. J Org Chem, 1997, 62: 7183

2. Shi Y P, et al. J Nat Prod, 2001, 64: 1439

B0009 Capnellene-8 β -ol

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{15}\text{H}_{24}\text{O}$

【相对分子质量】 220

【理化常数及谱学数据】 黄色无定形固体; $[\alpha]_D^{25} + 19.5^\circ$ (c 0.20, CHCl_3); IR(CHCl_3) ν_{max} (cm^{-1}): 3441, 2929, 2864, 1709, 1459, 1376, 1170, 889; ^1H NMR(250MHz, CDCl_3) δ : 5.05(1H, t, 2.5, H-12), 4.96(1H, t, 2.4, H-12), 4.74(1H, tt, 8.0, 4.2, H-8), 2.36(1H, ddd, 4.6, 2.8, 1.6, H-10), 2.22(1H, ddt, 7.6, 3.5, 4.2, H-6), 2.13(1H, dd, 8.4, 4.2, H-7), 2.09(1H, m, H-3), 1.79(1H, dd, 13.8, 8.4, H-5), 1.75(1H, d, 3.3, H-11), 1.51(1H, dd, 13.8, 4.8, H-5), 1.51(2H, m, H-2), 1.45(1H, m, H-3), 1.39(1H, m, H-7), 1.24(3H, s, H-13), 1.02(3H, s, H-14), 0.82(3H, s, H-15); ^{13}C NMR(62.5MHz, CDCl_3) δ : 42.5(C-1), 41.5(C-2), 40.5(C-3), 53.3(C-4), 48.9(C-5), 42.1(C-6), 40.3(C-7), 75.6(C-8), 160.6(C-9), 49.5(C-10), 68.0(C-11), 105.4(C-12), 32.1(C-13), 30.8(C-14), 26.1(C-15)^[1]。

【来源】 软珊瑚 *Capnella imbricata*^[1]

【分析方法】 样品分别用甲醇、二氯甲烷提取, 提取物 hexane、 CH_2Cl_2 萃取, CH_2Cl_2 萃取物 Sephadex LH-20 柱层析 ($\text{MeOH}-\text{CH}_2\text{Cl}_2$ 1:1), 正相 HPLC (hexane-EtOAc 1:9) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 细胞毒活性, IC_{50} $\mu\text{mol/L}$: Leukemia HL-60 68; K562 4.6; ovarian A2780 6.6; breast MCF-7 >4500; Colon HT115 >4500^[1]。

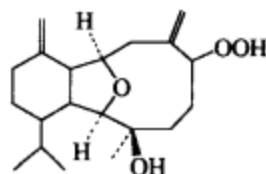
【参考文献】 1. Morris L A, et al. Tetrahedron, 1998, 54: 12953

2. Kagechika K, et al. Tetrahedron, 1993, 49: 1773

3. Wang B, et al. Zhongshan Daxue Xuebao, Ziran Kexueban, 1996, 35: 10

B0010 Cladiellaperoxide

【结构式】

【分子式】 $C_{20}H_{32}O_4$

【相对分子质量】 336

【理化常数及谱学数据】 无定形粉末; $[\alpha]_D^{25} - 27.8^\circ$ (c 0.42, $CHCl_3$); IR($CHCl_3$) ν_{max} (cm^{-1}): 3600, 3530, 3300, 3070, 1645, 900; 1H NMR(270MHz, $CDCl_3$) δ : 7.86(1H, s, OOH), 5.52(1H, d, 1.2, H-16a), 5.26(1H, d, 1.2, H-16b), 4.81(1H, t, 2.0, H-17a), 4.74(1H, dd, 11.5, 3.2, H-6), 4.68(1H, t, 2.0, H-17b), 4.12(1H, dd, 5.6, 10.6, H-9), 3.67(1H, s, H-2), 2.93(1H, dd, 10.6, 7.9, H-10), 2.78(1H, dd, 13.9, 5.6, H-8a), 2.34(1H, d, 13.9, H-8b), 2.28(1H, m, H-4a), 2.24(1H, m, H-1), 2.22(1H, m, H-12a), 2.15(1H, m, H-12b), 2.12(1H, m, H-5a), 2.03(1H, m, H-4b), 1.76(1H, m, H-13a), 1.70(1H, dd, 3.2, 8.9, H-5b), 1.30(1H, dt, 3.4, 11.8, H-14), 1.23(3H, s, H-15), 1.18(1H, m, H-18), 1.03(1H, td, 3.4, 13.5, H-13b), 0.96(3H, d, 7.1, H-20), 0.74(3H, d, 7.1, H-19); ^{13}C NMR(67.8MHz, $CDCl_3$) δ : 44.4 (C-1), 91.8(C-2), 74.1(C-3), 34.8(C-4), 29.7(C-5), 86.3(C-6), 147.7(C-7), 40.0(C-8), 79.6(C-9), 48.0(C-10), 146.2(C-11), 31.8(C-12), 25.3(C-13), 44.0(C-14), 27.1(C-15), 117.9(C-16), 111.3(C-17), 27.9(C-18), 15.1(C-19), 22.0(C-20); EIMS m/z (M^+) 336(1.0), 318(11), 302(22), 277(29), 179(65), 177(35), 107(46), 95(69), 81(52), 69(44), 43(100); HRFABMS m/z 337.2380; calcd for $C_{20}H_{33}O_4$ $[M+H]^+$ 337.2380^[1].

【来源】 软珊瑚 *Cladiella sphaeroides*^[1]

【分析方法】 样品 MeOH 提取, 提取物 H_2O -hexane 萃取, hexane 部分 Sephadex LH-20 (MeOH- $CHCl_3$ 1:1), 硅胶柱层析 [hexane-acetone (98:2)~(10:90)], 反相 HPLC(MeOH- H_2O 75:25) 得到纯化化合物^[1].

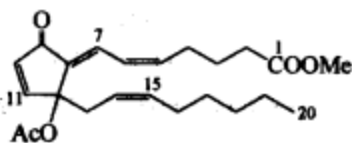
【生物活性与毒性】 具有毒性, 在 30mg/kg 浓度下对海水虾具有致死性^[1].

【参考文献】 1. Yamada K, et al. J Nat Prod, 1997, 60: 393

2. Ata A, et al. Helv Chim Acta, 2004, 87: 592

B0011 Claviridenone F

【结构式】

【分子式】 $C_{23}H_{32}O_5$

【相对分子质量】 388

【理化常数及谱学数据】 不定形固体; $[\alpha]_D^{25} + 6.7^\circ$ (c 0.31, $CHCl_3$); IR(KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 1734, 1708, 1240; UV(MeOH) λ_{max} (nm): 224(3.89), 288(4.06); 1H NMR($CDCl_3$): 1.63(ddd, $J = 13.5, 8.0, 7.5$, H-3), 6.04(dt, $J = 10.8, 8.1$, H-5), 6.54(dd, $J = 12.3, 10.8$, H-6), 7.25(d, $J = 12.6$, H-7), 6.43(d, $J = 6.0$, H-10), 7.48(d, $J = 6.0$, H-11), 2.97(dd, $J = 14.0, 6.6$, H-13), 2.70(dd, $J = 14.0, 8.4$, H-13), 0.88(t, $J = 6.9$, H-20), 3.69(s, $-OCH_3$), 2.04(s, $-CH_3CO$); ^{13}C NMR($CDCl_3$): 173.7(s, C-1), 33.4(t, C-2), (24.5t, C-3), 27.3(t, C-4), 146.5(d, C-5), 123.2(d, C-6), 125.6(d, C-7), 135.5(s, C-8), 194.0(s, C-9), 135.3(d, C-10), 157.8(d, C-11), 85.5(s, C-12), 35.6(t, C-13), 121.3(d, C-14), 134.9(d, C-15), 27.5(t, C-

16), 29.7(t, C-17), 31.6(t, C-18), 22.6(t, C-19), 14.1(q, C-20), 51.7(q, —OCH₃), 169.4(s, —CH₃CO), 21.4(q, —CH₃CO); EIMS m/z 388[M]⁺ (1), 345(2), 287(2), 235(8), 203(9), 147(15), 129(26), 103(26), 55(100); HREIMS m/z 388.2248(calcd for C₂₃H₃₂O₅, 388.2251)。

【来源】 软珊瑚 *Clavularia viridis*

【分析方法】 软珊瑚的二氯甲烷提取物经反复硅胶柱层析, *n*-hexane-EtOAc 梯度洗脱, 正相 HPLC 纯化, 溶剂为正己烷-丙酮 (11:1), 得到化合物 Claviridenone F。

【生物活性与毒性】 体外试验显示强烈的细胞毒活性, 抗 A549、HT-29、P-388 等肿瘤株的 ED₅₀ 值分别为 $5.0 \times 10^{-3} \mu\text{g/mL}$ 、 $5.1 \times 10^{-2} \mu\text{g/mL}$ 、 $5.2 \times 10^{-7} \mu\text{g/mL}$ 。

【参考文献】 1. Duh C Y, et al. J Nat Prod, 2002, 65: 1535

2. Kitagawa I, et al. Tetrahedron, 1985, 41: 995

3. Kobayashi M, et al. Tetrahedron Lett, 1982, 23: 5331

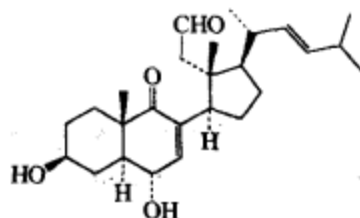
4. Kobayashi M, et al. Chem Pharm Bull, 1983, 31: 1440

5. Hashimoto S, et al. Tetrahedron Lett, 1985, 26: 2679

6. Watanabe K, et al. Chem Pharm Bull, 2003, 51: 909

B0012 2-(4,6-Dihydroxy-8a-methyl-1-oxo-1,4,4a,5,6,7,8,8a-octahydro-naphthalen-2-yl)-5-(1,4-dimethyl-pent-3-enyl)-1-methyl-cyclopentyl-acetaldehyde

【结构式】



【分子式】 C₂₆H₄₀O₄

【相对分子质量】 416

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; UV(EtOH) λ_{max} : 239nm; ¹H NMR(500MHz, CDCl₃) δ : 9.91(1H, dd, 1.7, 3.7, H-11), 6.60(1H, d, 1.7, H-7), 5.29(1H, dd, 15.4, 6.3, H-22), 5.25(1H, dd, 8.1, 15.4, H-23), 4.30(1H, d, 9.9, H-6), 3.61(1H, m, H-3), 3.56(1H, t, 10.0, H-14), 2.31(1H, m, H-4), 2.25(1H, dd, 3.7, 15.7, H-12), 2.22(1H, m, H-25), 2.15(1H, m, H-20), 2.04(1H, dd, 1.7, 15.7, H-12), 1.94(1H, m, H-12), 1.90(1H, m, H-17), 1.86(1H, m, H-1), 1.78(1H, m, H-5), 1.77(1H, m, H-15), 1.66(2H, m, H-16), 1.50(1H, m, H-15), 1.47(1H, m, H-1), 1.46(1H, m, H-2), 1.46(1H, m, H-4), 1.11(3H, s, H-19), 1.00(3H, d, 6.5, H-21), 0.95(6H, d, 6.8, H-26, 27), 0.73(3H, s, H-18); ¹³C NMR(125MHz, CDCl₃) δ : 31.8(C-1), 30.5(C-2), 70.0(C-3), 32.7(C-4), 48.6(C-5), 69.4(C-6), 147.1(C-7), 136.3(C-8), 203.8(C-9), 44.6(C-10), 203.7(C-11), 52.5(C-12), 46.1(C-13), 43.7(C-14), 25.6(C-15), 26.5(C-16), 51.3(C-17), 16.8(C-18), 15.9(C-19), 38.5(C-20), 21.7(C-21), 131.8(C-22), 136.3(C-23), 31.0(C-25), 22.5(C-26), 22.6(C-27)^[1]。

【来源】 软珊瑚 *Gersemia fruticosa*^[1]

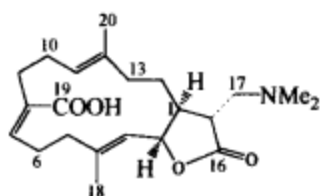
【分析方法】 样品乙酸乙酯提取, 提取物 hexane、EtOAc 萃取, 合并萃取物, 硅胶柱层析 (P. ether-EtOAc), 硅胶柱层析 (acetone-CHCl₃), 正相 HPLC (hexane-isopropanol 9:1), HPLC (CH₃CN-H₂O 1:1) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 细胞毒活性, 对人类白血病细胞 K562 IC₅₀ 16 $\mu\text{mol/L}$ ^[1]。

【参考文献】 1. Koljak R, et al. Tetrahedron, 1998, 54: 179

B0013 17-Dimethylaminolobohedleolide

【结构式】



【分子式】 $C_{22}H_{33}NO_4$

【相对分子质量】 375

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} + 13.1^\circ (c\ 0.25, CHCl_3)$; UV(OH) λ_{max} : 222nm, 218nm; IR (KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3400~3100, 1760, 1674, 1200, 1176, 961; 1H NMR($CDCl_3$) δ : 5.54(dd, $J = 11.0, 7.5$, H-2), 5.40(brd, $J = 11.0$, H-3), 5.62(dd, $J = 9.0, 3.5$, H-7), 4.95(brt, $J = 7.7$, H-11), 3.36(dd, $J = 13.5$, 4.0, H-17), 3.45(dd, $J = 13.5, 10.5$, H-17), 1.75(s, H-18), 1.50(s, H-20), 2.97(s, NMe), 2.97(s, NMe); ^{13}C NMR($CDCl_3$) δ : 44.0(C-1), 80.6(C-2), 119.9(C-3), 145.0(C-4), 40.7(C-5), 27.3(C-6), 145.1(C-7), 131.6(C-8), 36.5(C-9), 25.9(C-10), 124.0(C-11), 136.0(C-12), 37.2(C-13), 27.9(C-14), 40.1(C-15), 178.9(C-16), 57.9(C-17), 15.1(C-18), 171.0(C-19), 16.2(C-20), 42.6(NMe), 45.7(NMe); HR-FABMS m/z $[MH]^+$ 376.2494(calcd 376.2488 for $C_{22}H_{34}NO_4$).

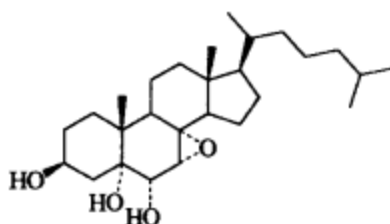
【来源】 软珊瑚 *Lobophytum* sp.

【生物活性与毒性】 细胞水平的体外抗 HIV-1 感染试验显示, 该化合物的 $EC_{50} = 3.3\mu g/mL$, $IC_{50} = 10.2\mu g/mL$.

【参考文献】 1. Rashid M A, et al. J Nat Prod, 2000, 63: 531

B0014 17-(1,5-Dimethyl-hexyl)-10,13-dimethyl-tetradecahydro-20-oxa-cyclopropa [7,8] cyclopenta [α] phenanthrene-3,5,6-triol

【结构式】



【分子式】 $C_{27}H_{46}O_4$

【相对分子质量】 434

【理化常数及谱学数据】 白色固体; mp 169~171 $^\circ C$; IR(KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3400, 2960, 2870, 1470, 1380, 1330, 1050, 980, 830; 1H NMR(500MHz, $CDCl_3$) δ : 4.17(1H, brd, 2.3, OH-5), 3.94(1H, m, H-3), 3.70(1H, dd, 5.4, 0.5, H-6), 3.60(1H, brs, H-7), 2.61(1H, brd, 5.4, OH-6), 2.25(1H, ddd, 13.2, 5.0, 2.3, H-4 α), 2.06(1H, brd, 12.1, H-12 β), 1.99(1H, dd, 11.4, 8.2, H-9), 1.87(1H, dd, 12.8, 6.8, H-14), 1.84(1H, m, H-16), 1.82(1H, m, H-2 α), 1.78(1H, m, H-11 α), 1.72(1H, m, H-11 β), 1.65(1H, m, H-1 α), 1.53-1.48(2H, m, H-1 β and H-25), 1.46-1.41(2H, m, H-4 β and H-15 α), 1.35-1.31(4H, m, H-2 β , H-20, H-23, and H-23), 1.29-1.24(3H, m, H-12 α , H-16 and H-17), 1.20-1.10(3H, m, H-15 β , H-24, and H-24), 1.02(3H, s, Me-19), 0.97(2H, m, H-22), 0.93(3H, d, 6.4, Me-21), 0.87(3H, d, 6.8, Me-26/Me-27), 0.86(3H, d, 6.8, Me-26/Me-27), 0.73(3H, s, Me-18); ^{13}C NMR(125MHz, $CDCl_3$) δ : 32.2(C-1), 30.5(C-2), 66.6(C-3), 38.9(C-4), 77.9(C-5), 67.8(C-6), 65.5(C-7), 67.6(C-8), 40.1(C-9), 40.8(C-10), 22.1(C-11), 38.1(C-12), 42.5(C-13), 53.8(C-14), 21.2(C-15), 27.2(C-16), 55.8(C-17), 12.4(C-18), 18.9(C-19), 35.9(C-20), 18.8(C-21), 35.9(C-22), 28.8(C-23), 39.4(C-24), 28.0(C-25), 22.8(C-26), 22.8(C-27); HRDEIMS m/z 434.3413(10), ($C_{27}H_{46}O_4$ requires 434.3396), 416(12), 398(14), 277(7), 265(100), 128(20), 95(15), 81(16)^[1].

【来源】 柳珊瑚 *Acabaria undulata*^[1]

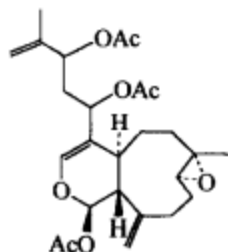
【分析方法】 样品 CH_2Cl_2 提取, 硅胶减压闪柱层析 (hexane-EtOAc), Sephadex LH-20 (CH_2Cl_2 - Me_2CO -EtOH 2:4:1), HPLC (MeOH - CH_3CN 6:4) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 细胞毒活性, IC_{50} $\mu\text{mol/L}$: P-388 17.9, DLD-1 19.6, 磷酸化酶 A2 (PLA2); 抑制活性 IC_{50} 13.8 $\mu\text{mol/L}$ ^[1]。

【参考文献】 1. Shin J, et al. J Nat Prod, 1996, 59: 679

B0015 7,8-Epoxyzahavin A

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{26}\text{H}_{36}\text{O}_8$

【相对分子质量】 476

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} - 121.7^\circ$ (c 0.34, CHCl_3); IR (film) ν_{max} (cm^{-1}): 2970, 2940, 2870, 1740, 1440, 1372, 1235, 1162, 1020, 915; ^1H NMR (400MHz, CDCl_3) δ : 1.08 (1H, m, H-6), 1.30 (3H, brs, H-18), 1.49 (1H, m, H-9a), 1.67 (1H, m, H-5), 1.72 (3H, brs, H-17), 1.90 (2H, m, H-13), 2.03 (3H, s, AcO), 2.05 (3H, s, AcO), 2.06 (1H, m, H-4a), 2.07 (3H, s, AcO), 2.08 (1H, m, H-5a), 2.25 (1H, m, H-6a), 2.28 (1H, m, H-9b), 2.39 (2H, m, H-10), 2.42 (1H, m, H-11a), 2.95 (1H, dd, 3.7, 10, H-8), 4.89 (1H, brs, H-16a), 4.95 (1H, brs, H-16b), 4.96 (1H, brs, H-19b), 5.04 (1H, brs, H-19a), 5.19 (1H, dd, 5.3, 8.2, H-14), 5.29 (1H, dd, 4.7, 8.2, H-12), 5.93 (1H, d, 2.1, H-1), 6.40 (1H, s, H-3); ^{13}C NMR (100MHz, CDCl_3) δ : 91.6 (C-1), 137.5 (C-3), 116.9 (C-4), 37.1 (C-4a), 29.2 (C-5), 39.5 (C-6), 59.8 (C-7), 62.8 (C-8), 24.7 (C-9), 32.1 (C-10), 148.0 (C-11), 47.9 (C-11a), 68.6 (C-12), 38.9 (C-13), 73.1 (C-14), 142.8 (C-15), 112.8 (C-16), 18.3 (C-17), 16.9 (C-18), 115.2 (C-19), 21.0 (3 $\times$ AcO), 169.5 (AcO), 169.8 (AcO), 170.0 (AcO); EIMS (70eV) m/z (int %) no M^+ , 417 (1), 356 (5), 297 (6), 243 (15), 149 (23), 145 (23), 105 (23), 91 (27), 81 (25), 69 (17), 43 (100); HREIMS m/z 476.2419 (calcd for $\text{C}_{26}\text{H}_{36}\text{O}_8$, 476.2408)。

【来源】 软珊瑚 *Eleutherobia aurea*^[1]

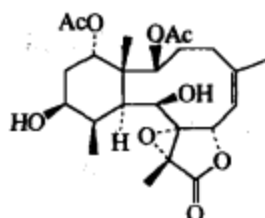
【分析方法】 样品 EtOAc 提取, 硅胶闪柱层析 (梯度 hexane-EtOAc), 反相 HPLC (MeCN - H_2O) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 在 20 $\mu\text{g/mL}$ 的浓度下对 fMLP 促进的兔中性粒细胞过氧化物的释放有抑制活性 (>90%)^[1]。

【参考文献】 1. Hooper G J, et al. J Nat Prod, 1997, 60: 889

B0016 Excavatolide E

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{24}\text{H}_{34}\text{O}_9$

【相对分子质量】 466

【理化常数及谱学数据】 白色固体; mp 190~191°C; $[\alpha]_D^{20} + 53.0^\circ$ (c 0.14, CHCl₃); IR (KBr) $\nu_{\max}$ (cm⁻¹): 3480, 1782, 1746, 1446, 1376, 1250, 1030; ¹H NMR (300MHz, Me₂CO-d₆) δ : 6.07 (1H, brs, OH-9), 5.55 (1H, d, 8.4, H-7), 5.10 (1H, d, 8.4, H-6), 4.85 (1H, d, 8.4, H-2), 4.63 (1H, brs, H-14), 4.46 (1H, brs, OH-12), 3.89 (1H, d, 11.7, H-9), 3.89 (1H, m, H-12), 3.00 (1H, dt, 15.0, 3.6, H-3), 2.48 (1H, brd, 14.1, H-4), 2.03 (1H, dd, 11.7, 5.2, H-10), 1.91 (3H, s, AcO), 1.91 (3H, s, H-16), 1.90 (3H, s, AcO), 1.84 (1H, m, H-11), 1.79 (1H, m, H-13), 1.68 (1H, m, H-4), 1.56 (1H, brd, 13.8, H-13), 1.48 (3H, s, H-18), 1.41 (1H, m, H-3), 1.26 (3H, s, H-15), 1.11 (1H, d, 7.2, H-20); ¹³C NMR (75MHz, Me₂CO-d₆) δ : 46.3 (C-1), 75.6 (C-2), 29.3 (C-3), 28.2 (C-4), 144.9 (C-5), 119.1 (C-6), 75.7 (C-7), 72.9 (C-8), 74.9 (C-9), 41.7 (C-10), 46.1 (C-11), 66.6 (C-12), 31.9 (C-13), 76.4 (C-14), 15.3 (C-15), 27.2 (C-16), 64.6 (C-17), 70.5 (C-18), 172.2 (C-19), 9.76 (C-20), 170.8, 20.3 (AcO), 170.6, 21.7 (AcO); FABMS m/z (rel int) 467 [0.8, (M+H)⁺], 407 (1.3), 347 (0.6), 329 (1.1); HRFABMS m/z 467.2271 (calcd for C₂₄H₃₅O₉, 467.2261)^[1].

【来源】 柳珊瑚 *Briareum excavatum*^[1]【分析方法】 样品乙酸乙酯提取, 硅胶柱层析 (hexane-EtOAc) 得到纯化合物^[1]。【生物活性与毒性】 细胞毒活性, 抗 A549、HT-29、KB、P-388 细胞 ED₅₀ (μg/mL) 值分别为 1.2, 1.6, 0.8, 1.6^[1]。

【参考文献】 1. Sheu J H, et al. J Nat Prod, 1998, 61: 602

2. Sung P, et al. J Nat Prod, 1999, 62: 457

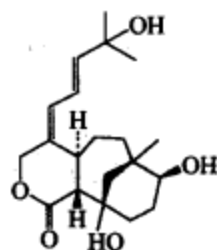
3. Neve J E, et al. Aust J Chem, 1999, 52: 359

4. Sheu J, et al. J Nat Prod, 1999, 62: 1415

5. Hanson J R. Nat Prod Rep, 2000, 17: 165

B0017 Floride B

【结构式】

【分子式】 C₂₀H₃₀O₅

【相对分子质量】 350

【理化常数及谱学数据】 白色无定形固体; $[\alpha]_D^{24} + 150^\circ$ (c 0.08, CHCl₃); UV (MeOH) $\lambda_{\max}$ (lg ϵ): 245 (4.25) nm; IR (KBr) $\nu_{\max}$ (cm⁻¹): 3450, 1720, 1650, 970, 940; ¹H NMR (500MHz, CD₃OD) δ : 1.03 (6H, d, 6.6, H-16 and H-17), 1.40-1.52 (1H, m, H-6), 1.64-1.75 (2H, m, H-6 and H-8), 1.65 (1H, brd, 13.2, H-19), 1.78-1.96 (2H, m, H-5 and H-9), 1.81 (1H, d, 13.2, H-19), 1.96 (1H, m, H-5), 2.04-2.11 (1H, m, H-8), 2.36-2.44 (2H, m, H-9 and H-15), 2.79 (2H, m, H-4a and H-11a), 3.36 (1H, brs, H-8), 4.40 (1H, d, 11.9, H-3 α), 5.00 (1H, brd, 11.9, H-3 β), 5.82 (1H, dd, 7.0, 14.5, H-14), 6.00 (1H, dd, 11.2, 14.5, H-13), 6.08 (1H, brd, 11.2, H-12); ¹³C NMR (125MHz, CD₃OD) δ : 176.9 (C-1), 72.5 (C-3), 136.1 (C-4), 38.3 (C-4a), 35.5 (C-5), 39.2 (C-6), 38.3 (C-7), 74.7 (C-8), 28.7 (C-9), 28.4 (C-10), 72.6 (C-11), 58.6 (C-11a), 124.6 (C-12), 123.1 (C-13), 146.8 (C-14), 32.7 (C-15), 22.6 (C-16), 22.6 (C-17), 31.2 (C-18), 43.7 (C-19); LREIMS m/z 334 [M]⁺, 318 [M-18]⁺; HREIMS m/z 334.2177 ([M]⁺, calcd for C₂₀H₃₀O₄, 334.2144)^[1].

【来源】 软珊瑚 *Xenia florida*^[1]

【分析方法】 样品甲醇提取, CH_2Cl_2 萃得部分硅胶柱层析 (hexane- CH_2Cl_2), 硅胶柱层析 (hexane- Et_2O 1:4), HPLC ($\text{MeOH}-\text{H}_2\text{O}$ 7:3) 得到纯化合物^[1]。

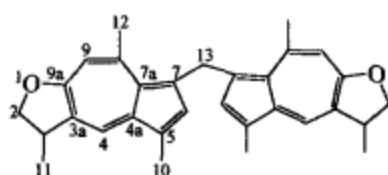
【生物活性与毒性】 抗菌活性, 抗 *Staphylococcus aureus* 和 *Aeromonas salmonicida* 100 $\mu\text{g}/\text{disk}$ ^[1]。

【参考文献】 1. Lwagawa T, et al. J Nat Prod, 1998, 61: 1513

2. Iwagawa T, et al. J Nat Prod, 2000, 63: 468

B0018 Gorgiabisazulene

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{31}\text{H}_{32}\text{O}_2$

【相对分子质量】 436

【理化常数及谱学数据】 紫色色素; $[\alpha] -92^\circ (c\ 0.05, \text{CHCl}_3)$; HREIMS m/z 436.2409 $[\text{M}]^+$; LREIMS m/z 436, 421, 391, 224, 212, 197, 182; IR (CCl_4) ν_{max} (cm^{-1}): 1605, 1555, 1455, 1335, 1215, 1080, 1025, 970, 915; UV (EtOH) λ_{max} (nm): 572.8, 373.2, 357.6 (sh) 326.8, 310.4, 300.8 (sh), 235.6; ^1H NMR (400MHz, CDCl_3) δ : 1.42 (6H, d, $J = 6.7\text{Hz}$, H-10, H-10'), 2.48 (6H, s, H-11, H-11'), 2.88 (6H, s, H-12, H-12'), 3.67 (2H, ddq, $J = 8.8, 7.0, 6.7\text{Hz}$, H-3, H-3'), 4.12 (2H, dd, $J = 8.8, 7.0\text{Hz}$, Ha-2, Ha-2'), 4.68 (2H, dd, $J = 8.8, 8.8\text{Hz}$, Hb-2, Hb-2'), 5.11 (2H, s, H-13), 6.51 (2H, s, H-9, H-9'), 6.85 (2H, s, H-6, H-6'), 7.90 (2H, s, H-4, H-4'); ^{13}C NMR (100MHz, CDCl_3): 12.86 (C-11, C-11'), 20.31 (C-10, C-10'), 27.55 (C-12, C-12'), 35.32 (C-13), 39.16 (C-3, C-3'), 77.44 (C-2, C-2'), 109.88 (C-9, C-9'), 121.87 (C-3a, C-3a'), 125.37 (C-4a, C-4a'), 128.61 (C-4, C-4'), 129.12 (C-8, C-8'), 131.41 (C-7, C-7'), 133.09 (C-5, C-5'), 136.40 (C-6, C-6'), 147.47 (C-7a, C-7a'), 165.19 (C-9a, C-9a').

【来源】 柳珊瑚 *Acalyogorgia* sp.

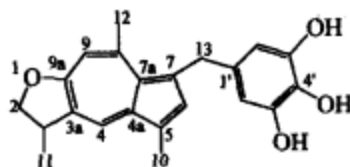
【分析方法】 柳珊瑚的甲醇提取物在水和二氯甲烷间分配, 二氯甲烷层经过 Sephadex LH-20 (甲醇: 二氯甲烷) 和硅胶柱 (正己烷-乙酸乙酯) 以及反相 HPLC (甲醇-水) 分离得到。结构通过 (HR) MS、IR、UV 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 对海鞘 (*Styela partita*) 细胞分裂的抑制, IC_{50} 为 8 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 。

【参考文献】 1. Masamitsu OCHI, et al. Chem Lett, 2003, 1993

B0019 Gorgiagallylazulene

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{22}\text{H}_{22}\text{O}_4$

【相对分子质量】 350

【理化常数及谱学数据】 粉末状紫色色素; $[\alpha] -30^\circ (c\ 0.11, \text{CHCl}_3)$; HREIMS m/z 350.1534 $[\text{M}]^+$; EIMS m/z 350, 348, 212, 197, 182, 153; IR (CHCl_3) ν_{max} (cm^{-1}): 3550, 3350, 1605, 1552, 1530, 1515, 1365, 1330, 1180, 1025, 975; UV (EtOH) λ_{max} (nm): 564, 370.8, 353.2, 322 (sh), 306.8, 206.8; ^1H NMR (400MHz, CDCl_3) δ : 1.40 (3H, d, $J = 6.7\text{Hz}$, H-10), 2.54 (3H, s, H-11), 2.74 (3H, s, H-12), 3.66 (H, ddq, $J = 8.8, 7.0, 6.7\text{Hz}$, H-3), 4.10 (H, dd, $J = 8.8, 7.0\text{Hz}$, Ha-2), 4.65 (H, dd, $J = 8.8, 8.8\text{Hz}$, Hb-2), 4.36

(2H, s, H-13), 6.12 (2H, s, H-2', H-6'), 6.49 (H, s, H-9), 7.90 (H, s, H-4), 7.08 (H, s, H-6); ^{13}C NMR (100MHz, CDCl_3): 12.81 (C-11), 20.34 (C-10), 27.16 (C-12), 36.95 (C-13), 39.05 (C-3), 77.44 (C-2), 108.07 (C-2', C-6'), 110.31 (C-9), 122.26 (C-3a), 125.321 (C-4a), 127.89 (C-1'), 128.65 (C-4), 129.40 (C-7), 129.54 (C-8), 133.12 (C-5), 135.97 (C-4'), 136.94 (C-6), 144.01 (C-3', C-5'), 147.58 (C-7a), 165.26 (C-9a)。

【来源】 柳珊瑚 *Acalycigorgia* sp.

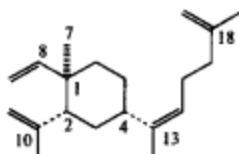
【分析方法】 柳珊瑚的甲醇提取物在水和二氯甲烷间分配, 二氯甲烷层经过 Sephadex LH-20 (甲醇: 二氯甲烷) 和硅胶柱 (正己烷-乙酸乙酯) 以及反相 HPLC (甲醇-水) 分离得到。结构通过 (HR) MS、IR、UV 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 对盐水虾的毒性, LC_{50} 为 $30\mu\text{g}/\text{mL}$ 。

【参考文献】 1. Masamitsu OCHI, et al. Chem Lett, 2003, 1993

B0020 Ineleganene

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{20}\text{H}_{32}$

【相对分子质量】 272

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} + 9.6'$ (c 0.10, CHCl_3); IR (KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3090, 2925, 1637; ^1H NMR (CDCl_3) δ : 2.01 (dd, $J = 12.1, 5.0$, H-2), 1.01 (s, H-7), 5.82 (dd, $J = 17.7, 10.2$, H-8), 4.88 (d, $J = 10.2$, H-9), 4.91 (d, $J = 17.7$, H-9), 4.59 (brs, H-11), 4.82 (brs, H-11), 1.71 (s, H-12), 1.69 (s, H-14), 4.74 (brs, H-19), 4.79 (brs, H-19), 1.62 (s, H-20); ^{13}C NMR (CDCl_3) δ : 40.4 (s, C-1), 52.9 (d, C-2), 33.4 (t, C-3), 44.5 (d, C-4), 26.8 (t, C-5), 39.8 (t, C-6), 16.6 (q, C-7), 150.4 (d, C-8), 109.8 (t, C-9), 147.8 (s, C-10), 112.1 (t, C-11), 24.7 (q, C-12), 131.6 (s, C-13), 25.6 (q, C-14), 124.3 (d, C-15), 27.3 (t, C-16), 34.9 (t, C-17), 154.5 (s, C-18), 107.1 (t, C-19), 17.7 (q, C-20); EIMS m/z 272 [M] $^+$ (0.3), 258 (0.3), 244 (0.2), 230 (1); HREIMS m/z 272.2496 (calcd for $\text{C}_{20}\text{H}_{32}$, 272.2498)。

【来源】 软珊瑚 *Sinularia ineleigans*

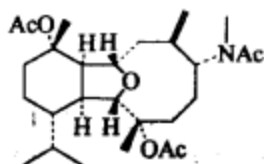
【分析方法】 软珊瑚的二氯甲烷提取物分配于水和二氯甲烷之间。二氯甲烷溶解部分重新分配于 10% 含水 MeOH 和正己烷之间, 正己烷层经硅胶柱层析, n -hexanes-EtOAc (1:3) 洗脱, 然后于 Sephadex LH-20 柱纯化得到化合物 Ineleganene。

【生物活性与毒性】 体外试验显示对 A549 和 P-388 细胞系的 GI_{50} 值分别为 $3.63\mu\text{g}/\text{mL}$ 和 $0.20\mu\text{g}/\text{mL}$ 。

【参考文献】 1. Chai M C, et al. J Nat Prod, 2000, 63: 843

B0021 Labiatamide B

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{27}\text{H}_{43}\text{NO}_6$

【相对分子质量】 477

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D^{25} - 6'$ (c 0.20, CHCl_3); IR (film) ν_{max} (cm^{-1}): 2940, 1760, 1685, 1370, 1244;

^1H NMR(360MHz, CDCl_3) δ : 5.46(1H, s, H-16), 5.32(1H, s, H-16), 4.12(1H, dd, 4.5, 10.3, H-9), 3.58(1H, s, H-2), 3.56(1H, m, H-6), 3.15(1H, dd, 10.3, 8.2, H-10), 2.66(1H, dd, 13.7, 4.5, H-8), 2.48(1H, d, 13.7, H-8), 2.27(1H, dd, 11.6, 7.4, H-1), 2.05(1H, m, H-5), 2.03(3H, s, AcO), 2.02(3H, s, AcO), 1.94(3H, s, AcO), 1.90(1H, m, H-18), 1.70(1H, m, H-4), 1.45(1H, m, H-14), 1.43(1H, s, H-15), 1.39(1H, s, H-17), 0.95(1H, d, 6.8, H-20), 0.95(1H, dt, 13.3, 3.4, H-4), 0.79(1H, d, 6.8, H-19); ^{13}C NMR(90MHz, CDCl_3) δ : 41.7(C-1), 91.1(C-2), 84.7(C-3), 30.2(C-4), 30.2(C-5), 71.4(C-6), 143.9(C-7), 43.1(C-8), 79.4(C-9), 43.8(C-10), 82.1(C-11), 32.1(C-12), 18.4(C-13), 43.8(C-14), 22.1(C-15), 119.6(C-16), 22.4(C-17), 27.7(C-18), 15.4(C-19), 21.9(C-20), 169.4(CO), 169.1(CO), 169.0(CO); HREIMS m/z 434.2882, calcd for $\text{C}_{25}\text{H}_{40}\text{NO}_5$, 434.2908[M-Ac] $^{+}$ [1]。

【来源】 柳珊瑚 *Eunicella labiata* [1]

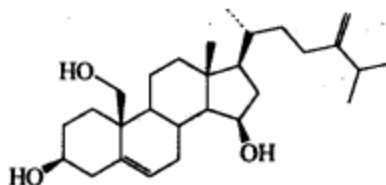
【分析方法】 样品用 CHCl_3 -MeOH 9:1 提取, 减压硅胶闪柱层析 (isooctane-EtOAc), 正相 HPLC (isooctane-EtOAc) 得到纯化合物 [1]。

【生物活性与毒性】 细胞毒活性, 对人类结肠癌细胞 HCT-116 ED_{50} 0.85 $\mu\text{g}/\text{mL}$ [1]。

【参考文献】 1. Roussis V, et al. Tetrahedron, 1996, 52: 2735

B0022 24-Methylenecholesta-5-ene-3 β , 15 β , 19-triol

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{28}\text{H}_{46}\text{O}_3$

【相对分子质量】 430

【理化常数及谱学数据】 无色棱柱体; mp 204~205 $^{\circ}\text{C}$; $[\alpha]_{\text{D}}^{25}$ -28.8 $^{\circ}$ (c 0.34, MeOH); UV(MeOH) λ_{max} (lg ϵ): 208(4.4) nm; IR(KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3340, 1640, 890; ^1H NMR(500MHz, MeOH- d_4) δ : 5.76(1H, m, H-6), 4.72(1H, brs, H-28), 4.66(1H, brs, H-28), 4.16(1H, m, H-15), 3.85(1H, d, 11.7, H-19), 3.62(1H, d, 11.7, H-19), 3.56(1H, m, H-3), 2.37(1H, m, H-16 α), 2.26(2H, m, H-4), 2.17(1H, m, H-2 α), 2.15(1H, m, H-1 β), 2.14(1H, m, H-8), 1.98(1H, m, H-12 β), 1.87(2H, m, H-7), 1.76(1H, m, H-23), 1.76(1H, m, H-2 β), 1.69(1H, m, H-11 β), 1.56(1H, m, H-11 α), 1.54(1H, m, H-20), 1.41(1H, m, H-23), 1.09(1H, m, H-12 α), 1.09(1H, m, H-17), 1.04(3H, d, 6.9, H-27), 1.02(3H, d, 6.6, H-26), 1.01(3H, s, H-18), 0.98(1H, m, H-1 α), 0.96(3H, d, 6.3, H-21), 0.93(1H, m, H-9), 0.76(1H, m, H-14); ^{13}C NMR(125MHz, MeOH- d_4) δ : 34.5(C-1), 32.2(C-2), 70.8(C-3), 43.1(C-4), 138.3(C-5), 126.4(C-6), 32.8(C-7), 30.2(C-8), 52.7(C-9), 43.6(C-10), 23.2(C-11), 42.8(C-12), 43.6(C-13), 63.6(C-14), 72.5(C-15), 42.2(C-16), 57.8(C-17), 15.4(C-18), 63.7(C-19), 36.9(C-20), 19.4(C-21), 36.1(C-22), 32.0(C-23), 157.9(C-24), 35.1(C-25), 22.6(C-26), 22.5(C-25), 107.1(C-26); EIMS m/z [M] $^{+}$ 430(0.3), 412(7), 382(35), 364(10), 349(5), 321(1), 298(3), 265(5), 239(32), 225(4), 213(8), 197(12), 185(25), 157(16), 145(40), 131(34), 91(52), 69(100); HREIMS m/z 412.3338[M $^{+}$ - H $_2$ O] (calcd for $\text{C}_{28}\text{H}_{44}\text{O}_2$, 412.3330) [1]。

【来源】 软珊瑚 *Nephthea erecta* [1]

【分析方法】 样品二氯甲烷提取, 硅胶柱层析 (CHCl_3 -MeOH), 硅胶柱层析 (hexane-EtOAc) 得到纯化合物 [1]。

【生物活性与毒性】 细胞毒活性, 抗 A549、HT-29、KB、P-388 细胞 ED_{50} ($\mu\text{g}/\text{mL}$) 值分别为 0.41, 0.17, 0.60, 0.07 [1]。

【参考文献】 1. Duh C Y, et al. J Nat Prod, 1998, 61: 1022

B0023 Montiporic acid A

【结构式】

【分子式】 $C_{14}H_{20}O_3$

【相对分子质量】 236

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; UV(MeOH) $\lambda_{\max}(\epsilon)$ (nm): 255(1059), 273(799); IR(film) $\nu_{\max}$ (cm^{-1}): 2925, 2850, 2250, 1730; 1H NMR(300MHz, $CDCl_3$) δ : 4.36(2H, s, H-1), 4.22(2H, s, H-1), 2.26(2H, t, 7.5, H-6), 1.52(2H, m, H-7), 1.34(2H, m, H-8), 1.25(2H, m, H-11), 1.24(2H, m, H-9), 1.24(2H, m, H-10), 0.86(3H, t, 7.0, H-12); ^{13}C NMR(75MHz, $CDCl_3$) δ : 59.1(C-1), 69.7(C-1), 72.9(C-3), 64.2(C-4), 82.1(C-5), 19.0(C-6), 27.9(C-7), 28.4(C-8), 28.4(C-9), 31.6(C-10), 22.6(C-11), 13.9(C-12), 65.8(C-1), 178.8(C-2); HRFABMS(negative) m/z found 235.1332($M-H$), calcd for $C_{14}H_{19}O_3$ 235.1334^[1].

【来源】 珊瑚 *Montipora digitata*^[1]

【分析方法】 样品 EtOH-H₂O 7:3 提取, MeOH-H₂O 萃取部分 ODS 柱层析 ($CHCl_3$ -MeOH-H₂O), 硅胶柱层析 ($CHCl_3$ -MeOH), 制备 TLC ($CHCl_3$ -MeOH-H₂O 70:30:5), HPLC (MeOH-H₂O 9:1) 得到纯化合物^[1].

【生物活性与毒性】 对 *Escherichia coli* 有抗菌活性, 细胞毒活性, 抗 P-388 IC₅₀ 5.0 $\mu g/mL$ ^[1].

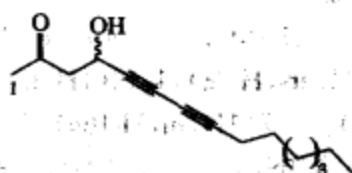
【参考文献】 1. Fusetani N, et al. J Nat Prod, 1996, 59: 796

2. Stefani H, et al. Tetrahedron Lett, 1999, 40: 9215

3. Alam N, et al. J Nat Prod, 2001, 64: 1059

B0024 Montiporyne I

【结构式】

【分子式】 $C_{15}H_{22}O_2$

【相对分子质量】 234

【理化常数及谱学数据】 淡黄色油状物; UV(OH) $\nu_{\max}(cm^{-1})$: 256(691), 291(1116), 308(1068); 1H NMR($CDCl_3$) δ : 2.16(s, H-1), 2.86(dd, 16.5, 8.0, H-3), 2.78(dd, 16.5, 5.5, H-3), 4.78(dd, 8.0, 5.5, H-4), 2.28(t, 7.5, H-9), 1.52(quint, 7.5, H-10), 0.90(t, 7.0, H-15); ^{13}C NMR($CDCl_3$) δ : 30.5(C-1), 207.8(C-2), 51.7(C-3), 59.0(C-4), 70.1(C-5), 76.9(C-6), 65.3(C-7), 82.2(C-8), 19.7(C-9), 29.3-29.8(C-10, 11, 12), 32.9(C-13), 23.6(C-14), 14.4(C-15); HRFABMS m/z 257 $[M+Na]^+$.

【来源】 石质珊瑚

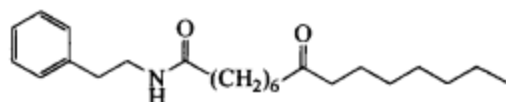
【分析方法】 石质珊瑚的甲醇提取物由乙酸乙酯和水进行分配, 乙酸乙酯层又由水和氯仿进行分配。得到的氯仿层经过反相 MPLC (YMC Gel ODS-A, 6.0nm 500/400 mesh), 以甲醇/水梯度洗脱, 得到 14 个部分。80% MeOH/H₂O 洗脱部分经过 HPLC 分离纯化得到化合物 Montiporyne I.

【生物活性与毒性】 呈现显著的人皮肤癌细胞 (SK-MEL-2) 和人卵巢癌细胞 (SK-OV-3) 细胞毒活性, ED₅₀ 值分别为 1.40 $\mu g/mL$ 和 1.81 $\mu g/mL$.

【参考文献】 1. Alam N, et al. J Nat Prod, 2001, 64: 1059

2. Bae B H, et al. J Nat Prod, 2000, 63: 1511

3. Speed T J, et al. Tetrahedron Lett, 2002, 43: 367

B0025 N-[2-Phenylethyl]-9-oxo-hexadecacarboxamide**【结构式】****【分子式】** $C_{24}H_{39}NO_2$ **【相对分子质量】** 373

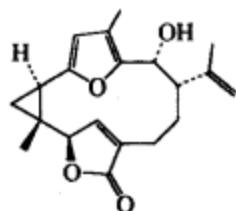
【理化常数及谱学数据】 黄色无定形固体; mp 85℃; UV(MeOH) $\lambda_{max}(\epsilon)$ (nm): 257(9800), 368(27000); IR(neat) $\nu_{max}(cm^{-1})$: 3316, 1707, 1638; 1H NMR(300MHz, $CDCl_3$) δ : 0.87(3H, t, 7.1, H-16), 1.22(14H, brs, H-4-6 and H-12-15), 1.55(6H, m, H-3, 7, 11), 2.08(2H, t, 7.8, H-2), 2.35(2H, t, 7.5, H-10), 2.36(2H, t, 7.5, H-8), 2.79(2H, t, 6.9, H-2), 3.49(2H, q, 6.9, H-1), 4.41(1H, brs, NH), 7.23(5H, m, phenyl); 1H NMR(500MHz, C_6D_6) δ : 0.87(3H, t, 7.1, H-16), 1.23(2H, heptet, H-15), 1.28(14H, brs, H-4-6 and H-12-15), 1.54(2H, pentet, H-11), 1.61(2H, pentet, H-7), 1.65(2H, m, H-3), 1.81(2H, t, 7.2, H-2), 2.05(2H, t, 7.5, H-10), 2.07(2H, t, 7.2, H-8), 2.53(2H, t, 6.9, H-2), 3.38(2H, q, 6.9, H-1), 4.57(1H, brs, NH), 7.16(5H, m); ^{13}C NMR(75MHz, $CDCl_3$) δ : 13.87(C-16), 22.3(C-15), 23.86, 25.70, 26.0, 29.22, 29.26, 29.35, 35.73, 36.84, 40.4(C-1), 42.53, 42.80(C-8 and C-10), 126.49(C-6), 128.62, (C-4 and C-8), 128.76(C-5 and C-7), 138.93(C-3), 173.08(C-1), 206.39(C-9); HREIMS m/z found 373.2968(calcd for $C_{24}H_{39}NO_2$, 373.2981); EIMS (70eV) m/z (rel int) 373 (1.1) M^+ , 282 (16.9) $[M - C_6H_5CH_2]^+$, 288 (2.5) $[C_6H_5CH_2OH_2NHCO(CH_2)_7CO]^+$, 274(21) $[M - C_7H_{15}]^+$, 253(69) $[M - C_6H_6CH_2CH_2NH]^+$, 176 (9) $[C_6H_5CH_2CH_2NHCO(CH_2)_2]^+$, 163 (13) $[C_6H_5CH_2CH_2-NHC(OH)CH_2]^+$, 104 (100) $[C_6H_5CHCH_2]^+$, 91(13.5) $[C_6H_5CH_2]^+$, 85(29), 69(16)^[1].

【来源】 八角珊瑚 *Telesto riisei*^[1]

【分析方法】 样品 MeOH、MeOH- CH_2Cl_2 1:1 提取, 合并提取物, Sephadex LH-20 (CH_2Cl_2 -MeOH 1:1), 硅胶柱层析 (hexane- CH_2Cl_2 , CH_2Cl_2 -MeOH), HPLC (MeOH- H_2O 23:77) 得到纯化化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 细胞毒活性, 抗 P-388 ED_{50} 2.1 $\mu g/mL$ ^[1]。

【参考文献】 1. Liyanage G K, et al. J Nat Prod, 1996, 59: 148

B0026 Pinnatin A**【结构式】****【分子式】** $C_{20}H_{24}O_4$ **【相对分子质量】** 328

【理化常数及谱学数据】 无色晶体; mp 189~211℃; $[\alpha]_D^{24} + 225.4^\circ$ (c 0.55, $CHCl_3$); UV(MeOH) $\lambda_{max}(\epsilon)$: 216(12800)nm; IR(film) $\nu_{max}(cm^{-1})$: 3469, 2964, 1730, 1654, 1564, 1459, 1083, 1055, 988, 897, 888, 802; 1H NMR(500MHz, $CDCl_3$) δ : 7.48(1H, brd, 1.5, H-11), 5.79(1H, brs, H-5), 4.83(1H, m, H-16), 4.81(1H, brs, H-10), 4.72(1H, brs, H-16), 4.63(1H, brs, H-2), 2.50(1H, m, H-14), 2.41(1H, m, H-13), 2.39(1H, m, H-13), 2.15(1H, brd, 11.0, H-1), 2.04(1H, m, H-14), 1.95(3H, s, H-18), 1.85(3H, s, H-17), 1.79(1H, dd, 9.0, 7.2, H-7), 1.42(1H, dd, 9.0, 6.0, H-9), 1.31(1H, dd, 7.2, 6.0, H-9), 0.29(3H, s, H-19); ^{13}C NMR(125MHz, $CDCl_3$) δ : 50.6(C-1), 66.7(C-2), 150.2(C-3), 116.9(C-4), 109.1(C-5), 151.2

(C-6), 18.3(C-7), 22.5(C-8), 22.1(C-9), 81.0(C-10), 152.9(C-11), 130.6(C-12), 20.8(C-13), 26.1(C-14), 146.2(C-15), 112.8(C-16), 19.9(C-17), 9.6(C-18), 13.6(C-19); HREIMS m/z $[M]^+$ calcd for $C_{20}H_{24}O_4$ 328.1675, found 328.1673(11), 310.1570(5, $C_{20}H_{22}O_3$), 295.1333(9, $C_{19}H_{19}O_3$), 242.0939(12, $C_{15}H_{14}O_3$), 214.0989(24, $C_{14}H_{14}O_2$), 213.0917(26, $C_{14}H_{13}O_2$), 189.0914(35, $C_{12}H_{13}O_2$), 163.0757(95, $C_{10}H_{11}O_2$), 137.0601(100, $C_8H_9O_2$), 124.0522(44, $C_7H_8O_2$).

【来源】 柳珊瑚 *Pseudopterogorgia bipinnata*^[1]

【分析方法】 样品氯仿-甲醇 1:1 提取, $CHCl_3$ 萃得部分硅胶柱层析 (hexane-EtOAc), Bio-Beads (SX-3) 柱层析 (toluene), HPLC (hexane-isopropanol 85:15) 得到纯化合物^[1]。

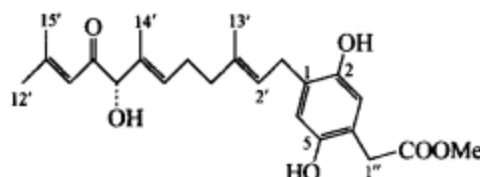
【生物活性与毒性】 细胞毒活性, 在 10^{-5} mol/L 浓度下对肾、卵巢、结肠、白血病癌细胞有细胞毒活性^[1]。

【参考文献】 1. Rodriguez A D, et al. J Org Chem, 1998, 63: 4425

2. Hanson J R. Nat Prod Rep, 2000, 17: 165

B0027 Rietone

【结构式】



【分子式】 $C_{24}H_{32}O_6$

【相对分子质量】 416

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha] + 95^\circ$ (c 0.8, $CHCl_3$); HREIMS m/z 416.2188 $[M]^+$; UV λ_{max} (nm): 297, 235, 209; IR ν_{max} (cm^{-1}): 1680, 1510, 1620; 1H NMR (400MHz, $CDCl_3$) δ : 6.58 (H, s, H-3), 6.55 (H, s, H-6), 3.25 (2H, dd, $J = 6.7, 7.5$ Hz, H-1'), 5.28 (H, t, $J = 7$ Hz, H-2'), 2.20 (2H, m, H-4'), 2.39, 2.41 (2H, m, H-5'), 5.59 (H, dd, $J = 9.1, 7.9$ Hz, H-6'), 4.52 (H, d, $J = 4.1$ Hz, H-8'), 6.12 (H, s, H-10'), 2.21 (3H, s, H-12), 1.65 (3H, s, H-13'), 1.43 (3H, s, H-14'), 1.91 (3H, s, H-15'), 3.55 (2H, s, H-1''), 5.22 (s, 2-OH), 7.51 (s, 5-OH), 4.69 (d, $J = 4.1$ Hz, 8'-OH), 3.68 (3H, s, —OMe); ^{13}C NMR (100MHz, $CDCl_3$): 127.6 (C-1), 146.9 (C-2), 116.4 (C-3), 118.6 (C-4), 148.6 (C-5), 117.4 (C-6), 27.7 (C-1'), 122.5 (C-2'), 136.1 (C-3'), 38.8 (C-4'), 25.5 (C-5'), 133.1 (C-6'), 132.6 (C-7'), 83.0 (C-8'), 198.4 (C-9'), 118.5 (C-10'), 160.8 (C-11'), 21.4 (C-12'), 15.5 (C-13'), 10.8 (C-14'), 28.0 (C-15'), 35.8 (C-1''), 173.4 (C-2''), 52.2 (—OMe).

【来源】 南非软珊瑚 *Alcyonium fauri*

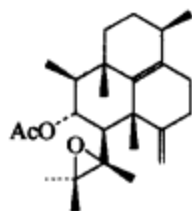
【分析方法】 海绵的乙酸乙酯提取物上硅胶柱 (正己烷-乙酸乙酯 2:1) 分离得到纯品。平面结构通过 (HR) MS、IR、UV 和 NMR (1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。立体结构由 Mosher 法确定。

【生物活性与毒性】 在 NCI 的抗 HIV 实验中, EC_{50} 和 IC_{50} 分别为 $1.23 \mu mol/L$ 和 $9.32 \mu mol/L$ 。

【参考文献】 1. Hooper G J et al. Tetrahedron Lett, 1995, 36 (18): 3265

B0028 Sinulobatin C

【结构式】



【分子式】 $C_{22}H_{32}O_3$

【相对分子质量】 344

【理化常数及谱学数据】 无色无定形固体; $[\alpha]_D^{25} + 98.2^\circ (c\ 0.23, CHCl_3)$; IR ($CHCl_3$) ν_{max} (cm^{-1}): 3010, 3000, 2950, 1735, 1655, 1260, 900; 1H NMR (500MHz, $CDCl_3$) δ : 4.95 (1H, t, 10.2, H-12), 4.84 (1H, d, 1.7, H-20a), 4.67 (1H, d, 2.0, H-20a), 2.52 (1H, d, 13.9, H-4), 2.49 (1H, d, 6.9, H-14), 2.25 (1H, m, H-1a), 2.20 (1H, m, H-8a), 2.12 (3H, s, CH_3CO), 2.05 (1H, m, H-2a), 2.03 (1H, m, H-2b), 2.03 (1H, m, H-7), 2.02 (1H, m, H-2b), 1.99 (1H, m, H-9a), 1.75 (1H, m, H-10), 1.73 (1H, m, H-8b), 1.25 (1H, m, H-13), 1.22 (1H, m, H-11), 1.25 (1H, m, H-9b), 1.17 (3H, s, H-17), 1.07 (3H, s, H-16), 0.95 (3H, d, 6.9, H-18), 0.92 (3H, d, 6.3, H-18); ^{13}C NMR (125MHz, $CDCl_3$) δ : 30.6 (C-1), 31.6 (C-2), 147.3 (C-3), 47.0 (C-4), 130.3 (C-5), 134.8 (C-6), 35.0 (C-7), 30.6 (C-8), 27.1 (C-9), 42.4 (C-10), 43.7 (C-11), 79.0 (C-12), 46.4 (C-13), 67.2 (C-14), 57.2 (C-15), 12.0 (C-16), 24.5 (C-17), 19.1 (C-18), 14.9 (C-19), 109.3 (C-20), 169.5, 21.4 (AcO); FABMS m/z $[M + Na]^+$ 367; HRFABMS m/z $[M + Na]^+$ found 367.2274, calcd. for $C_{20}H_{32}O_3Na$, 367.2250^[1].

【来源】 软珊瑚 *Simularia nanolobata*^[1]

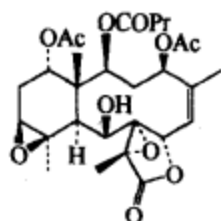
【分析方法】 样品经甲醇浸泡后用甲醇-氯仿 1:1 提取, 水-正己烷萃取, 正己烷部分 Sephadex LH-20 ($CHCl_3$ -MeOH 1:1), 硅胶柱层析 (梯度 hexane-EtOAc)、反相 HPLC (MeOH- H_2O 85:15) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 具有细胞毒活性, 抗鼠类淋巴瘤细胞 L1210 IC_{50} 3.2 $\mu g/mL$, 抗人类表皮癌细胞 KB IC_{50} 4.5 $\mu g/mL$ ^[1]。

【参考文献】 1. Yamada K, et al. Tetrahedron, 1997, 53: 4569

B0029 Stecholid A

【结构式】



【分子式】 $C_{28}H_{38}O_{11}$

【相对分子质量】 550

【理化常数及谱学数据】 白色固体; mp 113~115°C; $[\alpha]_D^{25} + 54.8^\circ (c\ 0.23)$; IR ν_{max} (cm^{-1}): 3450, 1780, 1740; MS 550 (M^+ , 7), 490 (3), 464 (11), 463 (47), 420 (57), 124 (100); HRFABMS m/z : 573.233 (calcd for $C_{28}H_{38}O_{11}Na^+$); 1H NMR (300MHz, $CDCl_3$) δ : 4.82 (d, $J = 6.6$ Hz, H-2), 3.10 (dd, $J = 16.0, 12.8$ Hz, H-3), 1.93 (ddd, $J = 16.0, 6.6, 5.3$ Hz, H-3'), 5.02 (dd, $J = 12.8, 5.3$ Hz, H-4), 5.48 (bd, $J = 10.0$ Hz, H-6), 5.59 (d, $J = 10.0$ Hz, H-7), 4.47 (dd, $J = 6.5, 3.7$ Hz, H-9), 2.30 (d, $J = 3.7$ Hz, H-10), 3.07 (bd, $J = 5.4$ Hz, H-12), 2.17 (ddd, $J = 15.8, 5.4, 3.0$ Hz, H-13), 2.08 (dd, $J = 15.8, 1.0$ Hz, H-13'), 4.68 (bs, H-14), 1.19 (s, H-15), 2.20 (bs, H-16), 1.68 (s, H-18), 1.35 (s, H-20), 2.88 (d, $J = 6.5$ Hz, 9-OH); acetate methyles; 2.05 (s), 1.99 (s); other esters; 2.26 (t), 1.64 (m), 0.95 (t); ^{13}C NMR (75MHz, $CDCl_3$) δ : 45.8 (C-1), 72.3 (C-2), 38.3 (C-3), 72.4 (C-4), 145.1 (C-5), 122.4 (C-6), 73.8 (C-7), 70.9 (C-8), 72.6 (C-9), 42.6 (C-10), 62.4 (C-11), 61.4 (C-12), 25.1 (C-13), 73.4 (C-14), 16.1 (C-15), 25.4 (C-16), 62.4 (C-17), 9.4 (C-18), 171.6 (C-19), 24.5 (C-20); acetate methyles; 21.1, 21.1; other esters; 36.1, 18.2, 13.7; ester carbonyls; 173.0, 170.4, 170.2.

【来源】 柳珊瑚 *Solenopodium stechei*

【分析方法】 氯仿-甲醇 (2:1) 粗提物经硅胶柱色谱法、正相高效液相色谱法 [hexane-acetone (9:1)~

(2:1)、反相高效液相色谱法 [MeOH-H₂O(85:15)~(65:35)] 分离, 纯化, 获得活性成分 Stecholid A。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 P388 的生长。

【参考文献】 1. Bloor S J, et al. J Org Chem, 1992, 57: 1205

2. Schmitz F J, et al. J Nat Prod, 1993, 56: 1339

3. Sheu J, et al. J Nat Prod, 1996, 59: 935

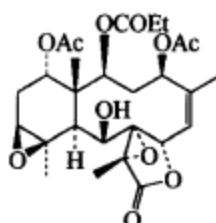
4. Rodriguez J, et al. J Nat Prod, 1998, 61: 313

5. Hanson J R. Nat Prod Rep, 2000, 17: 165

6. Mancini I, et al. Helv Chim Acta, 2000, 83: 1561

B0030 Stecholid B

【结构式】



【分子式】 C₂₇H₃₆O₁₁

【相对分子质量】 536

【理化常数及谱学数据】 mp 123~127°C; $[\alpha]_D^{25} + 89.0^\circ$ (c 0.09); IR $\nu_{\max}$ (cm⁻¹): 3420(br), 1780, 1740; MS 536(M⁺, 6), 463(20), 420(21), 360(15), 342(16), 124(100); ¹H NMR(300MHz, CDCl₃) δ : 4.82(d, J = 6.6Hz, H-2), 3.10(dd, J = 16.0, 13.0Hz, H-3), 1.92(ddd, J = 16.0, 6.6, 5.7Hz, H-3'), 5.02(dd, J = 13.0, 12.7Hz, H-4), 5.48(bd, J = 10.0Hz, H-6), 5.59(d, J = 10.0Hz, H-7), 4.46(dd, J = 6.5, 3.7Hz, H-9), 2.30(d, J = 3.7Hz, H-10), 3.07(bd, J = 5.2Hz, H-12), 2.17(ddd, J = 15.8, 5.2, 3.0Hz, H-13), 2.08(dd, J = 15.8, 1.0Hz, H-13'), 4.69(bs, H-14), 1.19(s, H-15), 2.20(bs, H-16), 1.68(s, H-18), 1.35(s, H-20), 2.86(d, J = 6.5Hz, 9-OH); acetate methyles: 2.05(s), 1.99(s); other esters: 2.31(t), 1.11(t); ¹³C NMR(75MHz, CDCl₃) δ : 45.9(C-1), 72.3(C-2), 38.2(C-3), 72.4(C-4), 145.2(C-5), 122.5(C-6), 73.7(C-7), 71.0(C-8), 72.6(C-9), 42.6(C-10), 63.6(C-11), 61.4(C-12), 25.2(C-13), 73.5(C-14), 16.0(C-15), 25.4(C-16), 9.4(C-18), 24.5(C-20); acetate methyles: 21.1, 21.1; other esters: 27.6, 8.8; ester carbonyls: 173.8, 170.1, 170.1.

【来源】 柳珊瑚 *Solenopodium stechei*

【分析方法】 氯仿-甲醇 (2:1) 粗提物经硅胶柱色谱法、正相高效液相色谱法 [hexane-acetone(9:1)~(2:1)], 反相高效液相色谱法 [MeOH-H₂O(85:15)~(65:35)] 分离, 纯化, 获得活性成分 Stecholid B。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 P388 的生长。

【参考文献】 1. Bloor S J, et al. J Org Chem, 1992, 57: 1205

2. Schmitz F J, et al. J Nat Prod, 1993, 56: 1339

3. Sheu J, et al. J Nat Prod, 1996, 59: 935

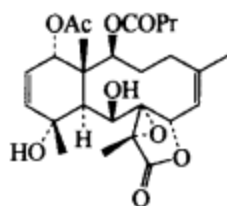
4. Rodriguez J, et al. J Nat Prod, 1998, 61: 313

5. Hanson J R. Nat Prod Rep, 2000, 17: 165

6. Mancini I, et al. Helv Chim Acta, 2000, 83: 1561

B0031 Stecholid H

【结构式】



【分子式】 $C_{26}H_{35}O_9$

【相对分子质量】 491

【理化常数及谱学数据】 白色粉末; mp $84 \sim 88^\circ\text{C}$; $[\alpha]_D^{25} - 57.2^\circ (c\ 0.32)$; IR $\nu_{\max} (\text{cm}^{-1})$: 3500 (br), 1786, 1730; MS 362 $[M^+ - (C_4H_8O_2 + C_2H_2O), 1]$, 344 (2), 329 (1), 301 (1); ^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) δ : 4.82 (d, $J = 9.7\text{ Hz}$, H-2), 2.33 (m, H-3), 1.66 (dd, $J = 15.8, 9.0\text{ Hz}$, H-3), 2.44 (dd, $J = 14.6, 9.0\text{ Hz}$, H-4), 5.41 (s, H₂-6), 5.41 (s, H₂-7), 4.13 (dd, $J = 10.7, 6.4\text{ Hz}$, H-9), 2.96 (d, $J = 6.4\text{ Hz}$, H-10), 5.49 (d, $J = 10.1\text{ Hz}$, H-12), 5.81 (dd, $J = 10.1, 5.5\text{ Hz}$, H-13), 4.90 (d, $J = 5.5\text{ Hz}$, H-14), 1.24 (s, H-15), 1.85 (bs, H-16), 1.67 (s, H-18), 1.46 (s, H-20); acetate methyles: 2.07 (s); butyrate: 2.52 (t), 1.76 (m), 1.03 (t); ^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3) δ : 45.8 (s, C-1), 72.9 (d, C-2), 24.1 (t, C-3), 24.9 (t, C-4), 144.0 (s, C-5), 121.0 (d, C-6), 73.4 (d, C-7), 71.5 (s, C-8), 68.4 (d, C-9), 40.9 (d, C-10), 72.6 (s, C-11), 141.3 (d, C-12), 120.4 (s, C-13), 81.8 (d, C-14), 22.4 (q, C-15), 25.1 (q, C-16), 61.5 (s, C-17), 9.7 (q, C-18), 170.9 (s, C-19), 27.0 (q, C-20); acetate methyles: 21.3; butyrate: 36.4, 18.3, 13.7; ester carbonyls: 173.1, 172.1.

【来源】 柳珊瑚 *Solenopodium stechei*

【分析方法】 氯仿-甲醇 (2:1) 粗提物经硅胶柱色谱法、正相高效液相色谱法 [hexane-acetone (9:1) ~ (2:1)]、反相高效液相色谱法 [MeOH- H_2O (85:15) ~ (65:35)] 分离, 纯化, 获得活性成分 Stecholidide H。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 P388 的生长。

【参考文献】 1. Bloor S J, et al. J Org Chem, 1992, 57: 1205

2. Schmitz F J, et al. J Nat Prod, 1993, 56: 1339

3. Sheu J, et al. J Nat Prod, 1996, 59: 935

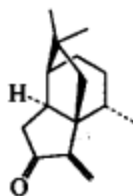
4. Rodriguez J, et al. J Nat Prod, 1998, 61: 313

5. Hanson J R. Nat Prod Rep, 2000, 17: 165

6. Mancini I, et al. Helv Chim Acta, 2000, 83: 1561

B0032 Suberosenone

【结构式】



【分子式】 $C_{15}H_{22}O$

【相对分子质量】 218

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} + 55.7^\circ (c\ 0.78, \text{CHCl}_3)$; UV (MeOH) $\lambda_{\max} (\epsilon)$: 233 (11100) nm; IR (film) $\nu_{\max} (\text{cm}^{-1})$: 2932, 1724, 1636, 1455, 1388, 1160, 1115, 928; ^1H NMR (500 MHz, CDCl_3) δ : 5.95 (1H, d, 0.8, H-6), 4.97 (1H, d, 0.8, H-6), 2.64 (1H, dd, 19.5, 12.0, H-3), 2.44 (1H, dd, 19.5, 9.5, H-3), 2.30 (1H, ddd, 11.5, 9.5, 0.5, H-2), 2.12 (1H, m, H-8), 2.06 (1H, m, H-9), 1.87 (1H, m, H-11), 1.79 (1H, d, 14.0, H-12), 1.69 (1H, d, 14.5, H-12), 1.67 (1H, m, H-10), 1.59 (1H, m, H-10), 1.32 (1H, m, H-9), 1.19 (3H, s, H-15), 1.15 (3H, s, H-14), 0.88 (3H, d, 7.0, H-7); ^{13}C NMR (125 MHz, CDCl_3) δ : 57.8 (C-1), 45.1 (C-2), 41.8 (C-3), 208.6 (C-4), 151.8 (C-5), 115.2 (C-6), 17.2 (C-7), 36.3 (C-8), 26.4 (C-9), 27.8

(C-10), 49.6 (C-11), 54.2 (C-12), 40.2 (C-13), 26.9 (C-14), 34.9 (C-15); HRFABMS, m/z ($M + H$)⁺ 219.1748, calcd for $C_{15}H_{23}O$ 219.1750^[1]。

【来源】 柳珊瑚 *Subergorgia suberosa*^[1]

【分析方法】 样品用 EtOH 提取, hexane 萃取部分 BioBeads SX-8 分子排阻柱层析 (hexane-CH₂Cl₂-EtOAc 2:4:1), 正相 HPLC (hexane-EtOAc 19:1) 得到纯化合物^[1]。

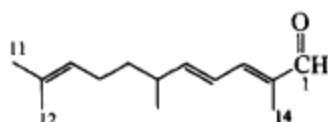
【生物活性与毒性】 抗实体瘤细胞毒活性, lg IC₅₀: Leukemia HL-60—4.15; K562—4.15; Non small cell lung Hop62—4.60; NCIH226—5.96; Melanoma Loximvi—5.64; SK-MEL-28—5.34; Ovarian ovc3—6.01; ovc3—5.68; Renal A498—5.68; SN12C—5.66; Breast MCF7—5.55; MDA-N—6.07^[1]。

【参考文献】 1. Bokesch H R, et al. Tetrahedron Lett, 1996, 37: 3259

2. Lee H L, et al. Org Lett, 2000, 2: 1951

B0033 (2E,4E)-2,6,10-Trimethylundeca-2,4,9-trienal

【结构式】



【分子式】 $C_{14}H_{22}O$

【相对分子质量】 206

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} + 40.0^\circ$ (c 0.05, CHCl₃); UV(OH) λ_{max} : 238nm; IR(KBr) ν_{max} (cm⁻¹): 1687(C=O), 1634(C=C); ¹H NMR(CDCl₃) δ : 9.42(s, H-1), 6.83(d, $J = 11.2$, H-3), 6.48(ddd, $J = 14.8, 11.2, 0.8$, H-4), 6.12(dd, $J = 14.8, 8.0$, H-5), 1.69(d, $J = 1.2$, H-11), 1.59(s, H-12), 1.08(d, $J = 6.8$, H-13), 1.84(d, $J = 1.2$, H-14); ¹³C NMR(CDCl₃) δ : 195.1(d, C-1), 138.4(s, C-2), 151.4(d, C-3), 124.1(d, C-4), 149.5(d, C-5), 36.6(d, C-6), 37.2(t, C-7), 25.8(t, C-8), 124.2(d, C-9), 131.8(s, C-10), 25.7(q, C-11), 14.1(q, C-12), 20.0(q, C-13), 13.0(q, C-14); HREIMS m/z 206.1643 (calcd for $C_{14}H_{22}O$, 206.1671)。

【来源】 加勒比海柳珊瑚 *Plexaurella grisea*

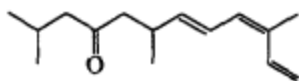
【分析方法】 软珊瑚的 MeOH 提取物悬浮于含水甲醇中, 依次用正己烷和氯仿萃取, 正己烷溶解部分经过硅胶柱层析, 以 hexane/Et₂O 梯度洗脱。活性部分采用正相 HPLC 进行分离纯化, 选用的溶剂为正己烷或 hexane/EtOAc, 得到化合物 (2E,4E)-2,6,10-Trimethylundeca-2,4,9-trienal。

【生物活性与毒性】 抗肿瘤细胞株的 IC₅₀ 值分别为 (μ g/mL): P-388 (2.5), A-549 (2.5), HT-29 (2.5), MEL-28 (2.5)

【参考文献】 1. Ana Rueda, et al. J Nat Prod, 2001, 64: 401

B0034 (3Z,5E)-3,7,11-Trimethyl-9-oxododeca-1,3,5-triene

【结构式】



【分子式】 $C_{15}H_{24}O$

【相对分子质量】 220

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} + 18.1^\circ$ (c 0.27, CHCl₃); UV(OH) λ_{max} (nm): 280(16300), 270(21200), 260(16400); IR(KBr) ν_{max} (cm⁻¹): 3088(olefinic C—H), 1712(C=O), 1622(C=C); ¹H NMR(CDCl₃) δ : 5.12(dt, $J = 10.8, 1.6$, H-1), 5.22(dd, $J = 17.2, 1.2$, H-1), 6.92(dd, $J = 17.2, 10.8$, H-2), 5.92(d, $J = 11.2$, H-4), 6.49(ddd, $J = 15.2, 11.2, 1.2$, H-5), 5.58(dd, $J = 15.2, 7.6$, H-6), 2.34(dd, $J = 16.0, 7.2$, H-8), 2.44(dd, $J = 16.0, 6.8$, H-8), 2.25(d, $J = 6.8$, H-10), 0.90(d, $J = 6.4$, H-12), 0.90

(d, $J = 6.4$, H-13), 1.04(d, $J = 6.8$, H-14), 1.86(s, H-15); ^{13}C NMR(CDCl_3) δ : 114.0(t, C-1), 133.3(d, C-2), 132.7(s, C-3), 129.6(d, C-4), 124.0(d, C-5), 138.6(d, C-6), 32.7(d, C-7), 50.3(t, C-8), 209.8(s, C-9), 52.5(t, C-10), 24.5(d, C-11), 22.6(q, C-12), 22.6(q, C-13), 20.2(q, C-14), 19.8(q, C-15); HREIMS m/z 220.1729(calcd for $\text{C}_{15}\text{H}_{24}\text{O}$, 220.1827)。

【来源】 加勒比海柳珊瑚 *Plexaurella grisea*

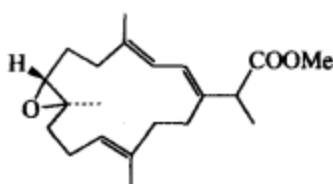
【分析方法】 软珊瑚的 MeOH 提取物悬浮于含水甲醇中, 依次用正己烷和氯仿萃取, 正己烷溶解部分经过硅胶柱层析, 以 hexane/ Et_2O 梯度洗脱。活性部分采用正相 HPLC 进行分离纯化, 选用的溶剂为正己烷或 hexane/ EtOAc , 得到化合物 (3Z, 5E)-3, 7, 11-Trimethyl-9-oxododeca-1, 3, 5-triene。

【生物活性与毒性】 抗肿瘤细胞株的 IC_{50} 值分别为 ($\mu\text{g/mL}$): P-388 (0.5), A-549 (2.5), HT-29 (2.5), MEL-28 (2.5)。

【参考文献】 1. Ana Rueda, et al. J Nat Prod, 2001, 64: 401

B0035 2-(4, 10, 14-Trimethyl-15-oxa-bicyclo [12.1.0] pentadeca-4, 6, 10-trien-7-yl)-propionic acid methyl ester

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{21}\text{H}_{32}\text{O}_3$

【相对分子质量】 332

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} + 56^\circ$ (c 0.008, CHCl_3); UV(EtOH) λ_{max} (lg ϵ): 256(4.2) nm; IR (film) ν_{max} (cm^{-1}): 2925, 1735, 1450, 1435, 1240, 1195, 1170, 845; ^1H NMR(300MHz, CDCl_3) δ : 6.19(1H, d, 10.9, H-2), 5.19(1H, dq, 10.9, 1.2, H-3), 5.06(1H, dd, 6.4, H-11), 3.65(3H, s, CH_3O), 3.20(1H, q, 7.2, H-15), 2.82(1H, dd, 5.3, 5.7, H-7), 2.75(2H, m, H-5), 2.33(2H, m, H-14), 2.23(1H, m, H-13), 2.01(2H, m, H-10), 1.99(1H, m, H-13), 1.91(1H, m, H-9), 1.75(2H, m, H-6), 1.57(1H, m, H-9), 1.77(3H, s, H-18), 1.58(3H, s, H-20), 1.31(3H, d, 7.2, H-17), 1.26(3H, s, H-19); ^{13}C NMR(75MHz, CDCl_3) δ : 139.7(C-1), 122.9(C-2), 121.0(C-3), 136.6(C-4), 35.9(C-5), 25.7(C-6), 61.3(C-7), 60.0(C-8), 36.9(C-9), 22.3(C-10), 126.1(C-11), 135.3(C-12), 38.2(C-13), 29.0(C-14), 46.3(C-15), 175.3(C-16), 16.8(C-17), 172(C-18), 18.1(C-19), 17.1(C-20), 51.8(MeO); EIMS m/z 332 [M^+] (12), 300(4), 272(4), 245(12), 121(100); HREIMS m/z 332.2365(calcd for $\text{C}_{21}\text{H}_{32}\text{O}_3$, 332.2352)^[1]。

【来源】 软珊瑚 *Lobophytum crassum*^[1]

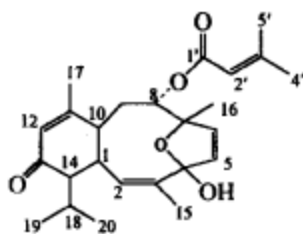
【分析方法】 样品分别用甲醇、二氯甲烷提取, 甲醇提取部分 $\text{H}_2\text{O}-\text{CH}_2\text{Cl}_2$ 萃取, CH_2Cl_2 部分合并, VLC (hexane-MeOH-EtOAc)、正相 HPLC (EtOAc-hexane 97:3) 得到纯化化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 抗真菌活性, 抑制 *Ustilago violacea* 生长 $50\mu\text{g}/\text{mm}^2$ ^[1]。

【参考文献】 1. Matthee G F, et al. J Nat Prod, 1998, 61: 237

B0036 Valdivone A

【结构式】



【分子式】 $C_{25}H_{34}O_5$

【相对分子质量】 414

【理化常数及谱学数据】 无色针晶; mp $89\sim 91^\circ\text{C}$; $[\alpha] + 94.4^\circ (c\ 0.39, \text{CHCl}_3)$; HRFABMS m/z 415.2465 $[M+H]^+$; LRFABMS m/z (rel. int.) 415(87), 397(42), 314(19), 297(26), 83(100); IR(KBr) $\nu_{\max}(\text{cm}^{-1})$: 3420, 2950, 1720, 1652, 1450; UV(CHCl_3) $\lambda_{\max}$: 254nm; $^1\text{H NMR}(\text{CHCl}_3)$ δ : 6.09(2H, brs, H-5, H-6), 5.71(H, brs, H-12), 5.68(H, brs, H-2'), 4.98(H, brd, $J = 9.5\text{Hz}$, H-2), 4.65(H, brd, $J = 7\text{Hz}$, H-8), 4.28(H, ddd, $J = 9.5, 4.5, 2.5\text{Hz}$, H-1), 3.07(H, brd, $J = 12\text{Hz}$, H-10), 2.18(3H, s, H-5'), 1.90(3H, s, H-4'), 1.89(2H, m, H-14, H-18), 1.75(3H, s, H-17), 1.75(3H, s, H-15), 1.63(H, brd, $J = 15\text{Hz}$, H-9), 1.44(H, ddd, $J = 15, 12, 7\text{Hz}$, H-9), 1.43(3H, s, H-16), 1.06(3H, d, $J = 7\text{Hz}$, H-19), 0.87(3H, d, $J = 7\text{Hz}$, H-20); $^{13}\text{C NMR}(\text{CHCl}_3)$: 37.6(C-1), 127.6(C-2), 135.6(C-3), 113.0(C-4), 131.1(C-5), 134.0(C-6), 90.2(C-7), 80.3(C-8), 31.2(C-9), 40.9(C-10), 160.0(C-11), 126.3(C-12), 203.1(C-13), 59.4(C-14), 21.7(C-15), 25.8(C-16), 22.9(C-17), 26.9(C-18), 21.4(C-19), 22.2(C-20), 165.9(C-1'), 115.7(C-2') 158.2(C-3'), 27.5(C-4'), 20.3(C-5').

【来源】 南非软珊瑚 *Alcyonium valdivae*

【分析方法】 软珊瑚的甲醇超声提取物用水和有机溶剂分配, 有机相用正己烷-乙酸乙酯在硅胶柱中梯度洗脱, 混合物再用硅胶柱进一步纯化得到纯品。结构通过 (HR) MS、UV、IR 和 NMR ($^1\text{H NMR}$, $^{13}\text{C NMR}$ 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 给药每只耳朵 $50\mu\text{g}$ 时能 93% 地抑制小鼠耳朵上化学诱导的炎症。

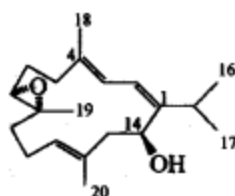
【参考文献】 1. Lin Y, et al. Tetrahedron, 1993, 49 (36): 7977

2. Nicolaou K C, et al. J Am Chem Soc, 1997, 119: 11353

3. Chen X T, et al. Angew Chem Int Ed Eng, 1998, 37: 185

B0037 (7R,8R,14S,1E,3E,11E)-7,8-Epoxy-1,3,11-triene-14-hydroxycembranoid

【结构式】



【分子式】 $C_{20}H_{32}O_2$

【相对分子质量】 379

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha] + 87^\circ (c\ 1.11, \text{CHCl}_3)$; HREIMS m/z 304.2397 $[M]^+$; EIMS m/z 304 $[M]^+$ (2%), 286(5), 161(5), 150(7), 137(100), 105(19); UV(MeOH) $\lambda_{\max}$: 50nm; IR(CH_2Cl) $\nu_{\max}(\text{cm}^{-1})$: 3549, 1250; $^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ δ : 6.14(H, d, $J = 11.4\text{Hz}$, H-2), 5.97(H, d, $J = 11.4\text{Hz}$, H-3), 2.14, 2.24(2H, m, H-5), 1.64, 1.74(2H, m, H-6), 2.76(H, t, $J = 5.8\text{Hz}$, H-7), 1.73, 1.80(2H, m, H-9), 1.90(2H, m, H-10), 5.08(H, brt, $J = 6\text{Hz}$, H-11), 2.15, 2.37(2H, m, H-13), 4.78(H, dd, $J = 8.8, 4.1\text{Hz}$, H-14), 2.61(H, qq, $J = 6.9, 6.9\text{Hz}$, H-15), 1.09(3H, d, $J = 6.8\text{Hz}$, H-16), 1.11(3H, d, $J = 7.0\text{Hz}$, H-17), 1.76(3H, s, H-18), 1.25(3H, s, H-19), 1.51(3H, s, H-20); $^{13}\text{C NMR}(\text{CDCl}_3)$: 148.7(C-1), 118.2(C-2), 119.7(C-3), 133.7(C-4), 35.1(C-5), 24.7(C-6), 59.4(C-7), 59.2(C-8), 35.8(C-9), 21.2(C-10), 128.0(C-11), 132.3(C-12), 46.7(C-13), 70.8(C-14), 26.8(C-15), 24.7(C-16), 23.7(C-17), 16.5(C-18), 18.0(C-19), 17.3(C-20).

【来源】 软珊瑚 *Sarcophyton trocheliophorum*

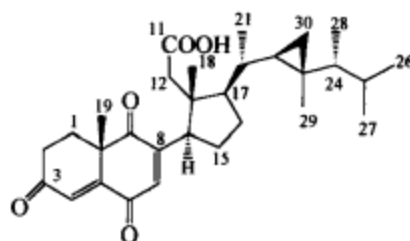
【分析方法】 软珊瑚的二氯甲烷提取物经过反复的硅胶柱层析 (石油醚、二氯甲烷、乙酸乙酯) 得到纯品。平面结构通过 (HR) MS、IR、UV 和 NMR ($^1\text{H NMR}$, $^{13}\text{C NMR}$ 和 2D-NMR) 等方法确定。立体结构通过 Mosher 法确定。

【生物活性与毒性】 对鼠科 P388 白血病细胞、A594 人肺癌细胞、HT29 人结肠癌细胞和 MEL28 人黑瘤细胞细胞毒作用, IC_{50} ($\mu\text{g/mL}$) 分别为 2.5、5、10 和 10。

【参考文献】 1. Greenland G J et al. Aust J Chem, 1994, 47: 2013

B0038 9,11-Secosterol-4,7-diene-3,6,9-trione-11-acid

【结构式】



【分子式】 $C_{30}H_{43}O_5$

【相对分子质量】 482

【理化常数及谱学数据】 黄色粉末; $[\alpha] -42.6^\circ$ (c 1.4, MeOH); HRFABMS m/z 483.3103 $[M+H]^+$; IR(neat) $\nu_{\max}$ (cm^{-1}): 3320, 1688, 1665; UV(MeOH) $\lambda_{\max}$ (nm): 367, 271, 221; ^1H NMR(500MHz, CDCl_3) δ : 2.60, 2.38(2H, m, H-1), 2.60, 2.27(2H, m, H-2), 6.53(H, s, H-4), 6.88(H, s, H-7), 2.62, 2.25(2H, d, J = 16.5Hz, H-12), 3.85(H, t, J = 9.5Hz, H-14), 1.85, 1.68(2H, m, H-15), 2.22, 1.58(2H, m, H-16), 2.37(H, m, H-17), 0.84(3H, s, H-18), 1.56(3H, s, H-19), 1.08(H, m, H-20), 1.08(3H, brs, H-21), 0.28(H, m, H-22), 0.30(H, m, H-24), 1.59(H, m, H-25), 0.96(3H, d, J = 6.5Hz, H-26), 0.87(3H, d, J = 6.5Hz, H-27), 0.95(3H, d, J = 7.5Hz, H-28), 0.93(3H, s, H-29), 0.51(H, dd, J = 8.5, 4.5Hz, H-30a), -0.09(H, dd, J = 7, 4.5Hz, H-30b); ^{13}C NMR(125MHz, CD_3OD): 30.9(C-1), 34.6(C-2), 200.0(C-3), 128.2(C-4), 154.6(C-5), 187.2(C-6), 139.6(C-7), 156.0(C-8), 200.5(C-9), 48.6(C-10), 174.6(C-11), 43.3(C-12), 48.3(C-13), 46.2(C-14), 28.7(C-15), 28.9(C-16), 53.2(C-17), 17.6(C-18), 25.7(C-19), 36.1(C-20), 21.3(C-21), 33.3(C-22), 27.0(C-23), 52.1(C-24), 33.3(C-25), 22.6(C-26), 21.9(C-27), 15.9(C-28), 14.7(C-29), 22.3(C-30)。

【来源】 柳珊瑚 *Pseudopterogorgia* sp.

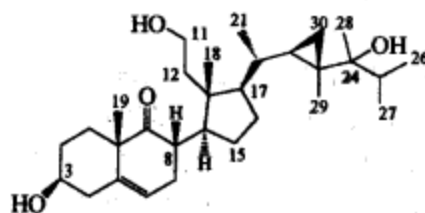
【分析方法】 海绵的甲醇提取物在水和甲醇-氯仿 (1:2) 间分配, 有机层上 Sephadex LH-20 (甲醇), PKC 抑制实验有活性的馏分合并后, 用硅胶柱分段 (正己烷-乙酸乙酯) 后用反相 HPLC (甲醇-水) 纯化得到。结构通过 (HR) MS、IR、UV 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 1. 对 MCF-1 人乳腺肿瘤细胞的增生和正常人表皮角质细胞增生的抑制 (IC_{50} , $\mu\text{mol/L}$): 2.6 ± 0.2 和 0.6 ± 0.2 。2. 抑制分离的人体表血液中嗜中性粒细胞过氧化物的产生和全身血液中自由基的产生 (IC_{50} , $\mu\text{mol/L}$): 0.5 ± 0.1 和 15.3 ± 2.7 。

【参考文献】 1. He H et al. Tetrahedron, 1995, 51 (1): 51

B0039 24(ξ)-3 β ,11,24-Trihydroxy-9,11-secosterol-4-ene-9-one

【结构式】



【分子式】 $C_{30}H_{50}O_4$

【相对分子质量】 474

【理化常数及谱学数据】 白色粉末; $[\alpha] + 1.5^\circ (c 1.2, \text{MeOH})$; HRFABMS m/z 497.3615 $[M + Na]^+$; IR(neat) $\nu_{\max} (\text{cm}^{-1})$: 3390, 2965, 1707; ^1H NMR (500MHz, CDCl_3) δ : 1.77, 1.43 (2H, m, H-1), 1.87, 1.48 (2H, m, H-2), 3.42 (H, m, H-3), 2.35, 2.20 (2H, m, H-4), 5.54 (H, brd, $J = 6.5\text{Hz}$, H-6), 2.39, 2.20 (2H, m, H-7), 3.00 (H, dt, $J = 12, 6.5\text{Hz}$, H-8), 3.77, 3.66 (2H, m, H-11), 1.72, 1.27 (2H, m, H-12), 2.55 (H, m, H-14), 1.49, 1.28 (2H, m, H-15), 1.96, 1.28 (2H, m, H-16), 1.67 (H, brq, $J = 9\text{Hz}$, H-17), 0.66 (3H, s, H-18), 1.33 (3H, s, H-19), 1.06 (H, m, H-20), 1.02 (3H, brd, $J = 6.0\text{Hz}$, H-21), 0.68 (H, dd, $J = 9, 6.5\text{Hz}$, H-22), 1.86 (H, qq, $J = 6.5, 6.5\text{Hz}$, H-25), 0.86 (3H, d, $J = 6.5\text{Hz}$, H-26), 0.86 (3H, d, $J = 6.5\text{Hz}$, H-27), 1.14 (3H, s, H-28), 0.95 (3H, s, H-29), 0.81 (H, dd, $J = 4.5, 9\text{Hz}$, H-30a), -0.27 (H, brdd, $J = 6.5, 4.5\text{Hz}$, H-30b); ^{13}C NMR (125MHz, CDCl_3): 31.1 (C-1), 30.5 (C-2), 71.0 (C-3), 40.4 (C-4), 140.4 (C-5), 121.2 (C-6), 32.5 (C-7), 43.0 (C-8), 217.7 (C-9), 48.3 (C-10), 58.8 (C-11), 40.3 (C-12), 45.6 (C-13), 41.6 (C-14), 24.1 (C-15), 27.8 (C-16), 50.2 (C-17), 17.3 (C-18), 22.9 (C-19), 34.6 (C-20), 20.4 (C-21), 26.0 (C-22), 28.6 (C-23), 74.5 (C-24), 34.7 (C-25), 17.2 (C-26), 17.0 (C-27), 23.9 (C-28), 16.9 (C-29), 16.1 (C-30)。

【来源】 柳珊瑚 *Pseudopterogorgia* sp.

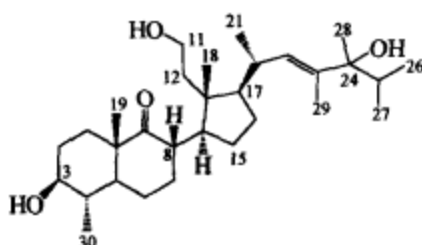
【分析方法】 海绵的甲醇提取物在水和甲醇-氯仿 (1:2) 间分配, 有机层上 Sephadex LH-20 (甲醇), PKC 抑制实验有活性的馏分合并后, 用硅胶柱分段 (正己烷-乙酸乙酯) 后用反相 HPLC (甲醇-水) 纯化得到。结构通过 (HR) MS、IR、UV 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 对 MCF-1 人乳腺癌细胞的增生和正常人表皮角质细胞增生的抑制 (IC_{50} , $\mu\text{mol/L}$): 7.8 ± 1.1 和 1.1 ± 0.2 。

【参考文献】 1. He H, et al. Tetrahedron, 1995, 51 (1): 51

B0040 22(E), 4(S), 24(ξ)-3 β , 11, 24-Trihydroxy-4, 23, 24-trimethyl-9, 11-seco-sterol-22 (23)-ene-9-one

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{30}\text{H}_{52}\text{O}_4$

【相对分子质量】 476

【理化常数及谱学数据】 白色粉末; $[\alpha] + 6.8^\circ (c 2.7, \text{MeOH})$; HRFABMS m/z 499.3755 $[M + Na]^+$; IR(neat) $\nu_{\max} (\text{cm}^{-1})$: 3380, 2958, 1697; ^1H NMR (500MHz, CDCl_3) δ : 1.70, 1.54 (2H, m, H-1), 1.91, 1.47 (2H, m, H-2), 3.05 (H, dt, $J = 5, 10.5\text{Hz}$, H-3), 1.46 (H, m, H-4), 1.08 (H, ddd, $J = 12.5, 12, 3.5\text{Hz}$, H-5), 1.08, 1.50 (2H, m, H-6), 1.05, 1.21 (2H, m, H-7), 2.08 (H, dt, $J = 13, 6\text{Hz}$, H-8), 3.77, 3.65 (2H, m, H-11), 1.66, 1.36 (2H, m, H-12), 2.51 (H, m, H-14), 1.48, 1.28 (2H, m, H-15), 1.71, 1.68 (2H, m, H-16), 1.72 (H, m, H-17), 0.63 (3H, s, H-18), 1.18 (3H, s, H-19), 2.44 (H, m, H-20), 0.95 (3H, d, $J = 6.5\text{Hz}$, H-21), 5.39 (H, brd, $J = 10\text{Hz}$, H-22), 1.86 (H, qq, $J = 6.5, 6.5\text{Hz}$, H-25), 0.85 (3H, d, $J = 6.5\text{Hz}$, H-26), 0.78 (3H, d, $J = 6.5\text{Hz}$, H-27), 1.18 (3H, s, H-28), 1.58 (3H, brs, H-29), 0.97 (3H, d, $J = 6.5\text{Hz}$, H-30); ^{13}C NMR (125MHz, CDCl_3): 30.9 (C-1), 30.5 (C-2), 75.6 (C-3), 38.8 (C-4), 51.8 (C-5), 24.5 (C-6), 32.7 (C-7), 44.3 (C-8), 217.9 (C-9), 49.0 (C-10), 59.1 (C-11), 40.6 (C-12), 45.3 (C-13), 42.2 (C-14), 23.9 (C-15), 24.8 (C-16), 50.3 (C-17), 17.6 (C-18), 16.6 (C-19), 33.0 (C-20), 21.0 (C-21), 128.6 (C-22), 136.8 (C-23), 77.4 (C-24), 33.9 (C-25), 16.9 (C-26, C-27), 23.8 (C-28), 13.1 (C-29), 15.1 (C-30)。

【来源】 柳珊瑚 *Pseudopterogorgia* sp.

【分析方法】 海绵的甲醇提取物在水和甲醇-氯仿 (1:2) 间分配, 有机层上 Sephadex LH-20 (甲醇), PKC 抑制实验有活性的馏分合并后, 用硅胶柱分段 (正己烷-乙酸乙酯) 后用反相 HPLC (甲醇-水) 纯化得到。结构通过 (HR) MS、IR、UV 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 对 MCF-1 人乳腺肿瘤细胞的增生和正常人表皮角质细胞增生的抑制 (IC_{50} , $\mu\text{mol/L}$): 6.1 ± 1.2 和 2.2 ± 1.1 。

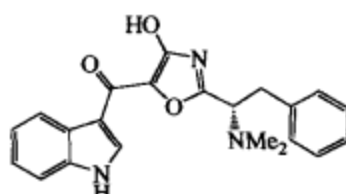
【参考文献】 1. He H, et al. Tetrahedron, 1995, 51 (1): 51

鄧平舫
PDG

C 海藻天然产物

C0001 Almazole D

【结构式】



【分子式】 $C_{22}H_{21}N_3O_3$

【相对分子质量】 375

【理化常数及谱学数据】 无色强荧光粉末固体; $[\alpha]_D^{20} + 20^\circ (c\ 0.07, \text{MeOH})$; UV (MeOH) $\lambda_{\max} (\epsilon) (\text{nm})$: 206(16200), 272(5300), 310(5900), 398(580); $^1\text{H NMR}$ (300MHz, $\text{CH}_3\text{OH}-d_4$) δ : 8.73(1H, s, H-2), 8.02(1H, ddd, 8.0, 2.1, 0.8, H-4), 7.05~7.20(7H, m, H-5, 6, 4'', 5'', 6'', 7'', 8), 7.42(1H, ddd, 8.0, 2.0, 0.8, H-7), 4.03(1H, dd, 10.5, 4.9, H-1''), 3.41(1H, dd, 12.8, 10.5, H-2''), 3.30(1H, dd, 12.8, 4.9, H-2''), 2.44(6H, s, NMe₂); $^{13}\text{C NMR}$ (75MHz, $\text{CH}_3\text{OH}-d_4$) δ : 130.2(C-2), 105.1(C-3), 126.7(C-3a), 121.5(C-4), 121.7(C-5), 123.2(C-6), 112.7(C-7), 137.6(C-7a), 158.5(C-2''), 170.4(C-4''), 152.2(C-5''), 66.4(C-1''), 38.3(C-2''), 139.0(C-3''), 130.1(C-4'', 8''), 129.5(C-5'', 7''), 127.5(C-6''), 42.7(NMe); HRFABMS m/z 496.2683, $(M+H)^+$, calcd for $C_{29}H_{38}NO_6$, 496.2699^[1].

【来源】 红藻, 未鉴定种属^[1]

【分析方法】 样品 MeOH 提取, $\text{H}_2\text{O}-\text{EtOAc}$ 萃取, H_2O 层浓缩, RP-18 硅胶闪柱层析 ($\text{CH}_3\text{CN}-\text{H}_2\text{O}$) 得到纯化合物^[1].

【生物活性与毒性】 抗菌活性, 抗革兰阴性菌 *Serratia marcescens*, *Salmonella typhi* XLD^[1].

【参考文献】 1. N'Diaye, et al. Tetrahedron Lett, 1996, 37: 3049

2. Ndiaye I, et al. Tetrahedron Lett, 1994, 35: 4827

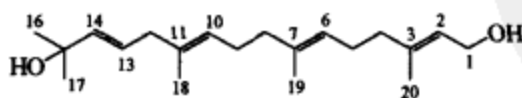
3. Guella G, et al. Helv Chim Acta, 1994, 77: 1999

4. Lewis J R. Nat Prod Rep, 1998, 15: 371

5. Khalafy J, et al. Aust J Chem, 1999, 52: 31

C0002 Bifurcanol

【结构式】



【分子式】 $C_{20}H_{34}O_2$

【相对分子质量】 306

【理化常数及谱学数据】 油状物; $[\alpha]_D^{20} 0^\circ$; IR $\nu_{\max} (\text{cm}^{-1})$: 3400, 1685, 1625, 1015; UV $\lambda_{\max} (\text{nm})$: 285, 245; HRMS of the TMSi ether; 360.2855 $[M - \text{TMSiOH}]^+$; EIMS (70eV) m/z (rel. int.): 288 $[M - \text{H}_2\text{O}]^+$ (1), 257 (1), 147 (11), 135 (31), 109 (36), 93 (57), 81 (100), 43 (77); $^1\text{H NMR}$ (400MHz, CDCl_3) δ : 4.15 (H, d, $J = 6.8\text{Hz}$, H-1), 5.42 (H, t, $J = 6.8\text{Hz}$, H-2), 2.00 (2H, m, H-4), 2.07 (2H, m, H-5), 5.11 (H, t, $J = 6.8\text{Hz}$, H-6), 2.00 (2H, m, H-8), 2.07 (2H, m, H-9), 5.13 (H, t, $J = 6.8\text{Hz}$, H-10), 2.67 (2H, d, $J = 5.6\text{Hz}$, H-12), 5.57 (H, dt,

$J = 15.6, 5.6\text{Hz}$, H-14), 1.32(3H, s, H-16), 1.32(3H, s, H-17), 1.57(3H, s, H-18), 1.60(3H, s, H-19), 1.68(3H, s, H-20); ^{13}C NMR(100.5MHz, CDCl_3): 59.4(C-1), 123.4(C-2), 139.7(C-3), 39.6(C-4), 26.3(C-5), 123.9(C-6), 135.3(C-7), 39.6(C-8), 26.7(C-9), 125.2(C-10), 133.7(C-11), 42.4(C-12), 125.4(C-13), 139.2(C-14), 70.7(C-15), 29.8(C-16), 29.8(C-17), 16.0(C-18), 16.0(C-19), 16.3(C-20)。

【来源】 摩洛哥大西洋沿岸紫藻 *Bifurcaria bifurcata*

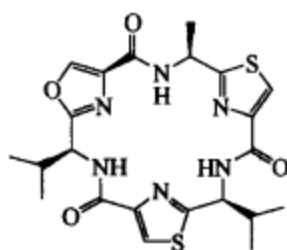
【分析方法】 硅胶柱分段后, 正相高效液相色谱(正己烷-乙醚, 2:3)纯化得到。结构通过(HR) MS、UV、IR 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 对海胆蛋细胞分裂有抑制作用, $\text{ED}_{50} = 4\mu\text{g/mL}$ 。

【参考文献】 1. Vall R, et al. Phytochemistry, 1993, 34 (6): 1585

C0003 Bistratamide C

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{22}\text{H}_{26}\text{N}_6\text{O}_4\text{S}_2$

【相对分子质量】 502

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D^{25} - 6.5^\circ$ (c 0.42, CHCl_3); UV(CH_2Cl_2) λ_{max} : 234nm(17000); IR(film) ν_{max} (cm^{-1}): 3392, 2968, 1676, 1538, 738; HRFAB⁺ m/z : 503.153, $\text{C}_{22}\text{H}_{26}\text{N}_6\text{O}_4\text{S}_2$; ^1H NMR (500MHz, CDCl_3) δ : 8.60(d, $J = 6.8\text{Hz}$, N1H), 5.46(dq, $J = 6.8, 6.8\text{Hz}$, H-1), 1.73(d, $J = 6.8\text{Hz}$, H-2), 8.13(s, H-5), 8.35(d, $J = 9.2\text{Hz}$, N3H), 5.38(dd, $J = 6.8, 9.2\text{Hz}$, H-7), 2.30(m, H-8), 1.11(d, $J = 6.8\text{Hz}$, H-9), 1.01(d, $J = 6.8\text{Hz}$, H-10), 8.07(s, H-13), 8.44(d, $J = 8.8\text{Hz}$, N5H), 5.28(dd, $J = 4.4, 8.8\text{Hz}$, H-15), 2.36(m, H-16), 1.04(d, $J = 6.6\text{Hz}$, H-17), 1.01(d, $J = 6.9\text{Hz}$, H-18), 8.20(s, H-21); ^{13}C NMR (500MHz, CDCl_3) δ : 47.5(d, C-1), 24.8(q, C-2), 171.2(s, C-3), 148.5(s, C-4), 124.3(d, C-5), 159.6(s, C-6), 55.8(d, C-7), 35.3(d, C-8), 18.8(q, C-9), 18.9(q, C-10), 168.3(s, C-11), 149.5(s, C-12), 123.2(d, C-13), 160.1(s, C-14), 52.8(d, C-15), 33.6(d, C-16), 18.6(q, C-17), 17.9(d, C-18), 163.7(s, C-19), 135.4(s, C-20), 141.4(d, C-21), 159.1(s, C-22)。

【来源】 蓝绿藻 *Lissoclinum bistratum*

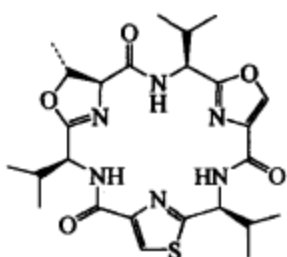
【分析方法】 甲醇提取物氯仿萃取部分用氯仿-甲醇系统梯度洗脱, 经硅胶柱层析分离, 正相高效液相色谱法(25% acetone/hexane)纯化获得活性成分 Bistratamide C。

【生物活性与毒性】 对小鼠的中枢神经有抑制作用。

【参考文献】 1. Aguilar E, et al. J Org Chem, 1992, 57: 6671

C0004 Bistratamide D

【结构式】



【分子式】 $C_{25}H_{34}N_6O_5S$

【相对分子质量】 530

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D^{25} - 31^\circ$ (c 0.33, $CHCl_3$); UV (CH_2Cl_2) λ_{max} : 232nm (13000); IR (film) ν_{max} (cm^{-1}): 3392, 2964, 1683, 1520, 753; HRFAB⁺ m/z : 531.239, $C_{25}H_{34}N_6O_4S_2$; 1H NMR (500MHz, $CDCl_3$) δ : 7.89(d, $J = 7.6$ Hz, N1H), 4.96(dd, $J = 7.6, 5.2$ Hz, H-1), 2.22(m, H-2), 0.96(d, $J = 6.9$ Hz, H-3), 0.89(d, $J = 6.9$ Hz, H-4), 8.16(s, H-7), 8.62(d, $J = 7.4$ Hz, N3H), 5.27(dd, $J = 7.4, 4.4$ Hz, H-9), 2.38(m, H-10), 1.03(d, $J = 6.9$ Hz, H-11), 0.93(d, $J = 6.9$ Hz, H-12), 8.10(s, H-15), 8.03(d, $J = 9.9$ Hz, N5H), 4.99(dd, $J = 9.9, 2.1, 2.4$ Hz, H-17), 2.42(m, H-18), 1.06(d, $J = 6.9$ Hz, H-19), 0.95(d, $J = 6.9$ Hz, H-20), 4.10(dd, $J = 9.0, 6.3$ Hz, H-22), 4.77(dq, $J = 9.0, 6.3$ Hz, H-23), 1.58(d, $J = 6.3$ Hz, H-24); ^{13}C NMR (500MHz, $CDCl_3$) δ : 53.1(d, C-1), 33.2(d, C-2), 18.2(q, C-3), 17.6(q, C-4), 163.4(s, C-5), 135.8(s, C-6), 140.9(d, C-7), 159.2(s, C-8), 56.4(d, C-9), 34.5(d, C-10), 18.2(q, C-11), 17.8(q, C-12), 167.6(s, C-13), 148.6(s, C-14), 123.6(d, C-15), 160.0(s, C-16), 51.9(d, C-17), 31.2(d, C-18), 19.0(q, C-19), 16.3(q, C-20), 169.4(s, C-21), 74.1(d, C-22), 82.5(d, C-23), 21.8(q, C-24), 170.5(s, C-25)。

【来源】 蓝绿藻 *Lissoclinum bistratum*

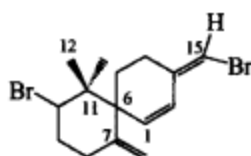
【分析方法】 甲醇提取物氯仿萃取部分用氯仿-甲醇系统梯度洗脱, 经硅胶柱层析分离, 正相高效液相色谱法 (25% acetone/hexane) 纯化获得活性成分 Bistratamide D。

【生物活性与毒性】 对小鼠的中枢神经有抑制作用。

【参考文献】 1. Aguilar E, et al. J Org Chem, 1992, 57: 6671

C0005 (+)-3-(Z)-Bromomethylidene-10 β -bromo- β -chamigrene

【结构式】



【分子式】 $C_{15}H_{20}Br_2$

【相对分子质量】 358

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} + 9.0^\circ$ (c 1.4, $CHCl_3$); IR (KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 2970, 1636, 1451, 1431, 1387, 1369, 1304, 746; 1H NMR ($CDCl_3$) δ : 6.00(d, $J = 10.4$, H-1), 6.65(d, $J = 10.4$, H-2), 1.98(dm, $J = 13$, H-4), 1.75(td, $J = 13, 3.6$, H-4), 2.45(tm, $J = 14.2$, H-8), 4.57(dd, $J = 12.6, 4.6$, H-10), 1.16(3H, s, H-12), 1.08(3H, s, H-13), 5.01(s, H-14), 4.7(s, H-14), 5.9(s, H-15); ^{13}C NMR ($CDCl_3$) δ : 137.3(C-1), 127.1(C-2), 137.8(C-3), 26.5(C-4), 27.8(C-5), 52.4(C-6), 147.0(C-7), 32.8(C-8), 35.2(C-9), 64.1(C-10), 42.7(C-11), 18.5(C-12), 26.3(C-13), 115.7(C-14), 101.6(C-15); EIMS m/z 362/360/358[M]⁺; HREIMS m/z 357.9964(calcd for $C_{15}H_{20}^{79}Br_2$, 357.9932, M)。

【来源】 红藻 *Laurencia scoparia*

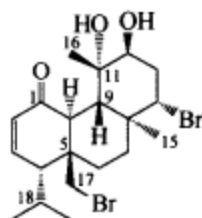
【分析方法】 红藻的二氯甲烷提取物经硅胶 G60 快速柱层析, 活性部位经 Sephadex LH-20 柱层析, 洗脱溶剂为 *n*-hexane- $CHCl_3$ -MeOH (1:1:1), 再经反复硅胶柱层析得到化合物 (+)-3-(Z)-Bromomethylidene-10 β -bromo- β -chamigrene。

【生物活性与毒性】 表现中等体外抗蠕虫活性。

【参考文献】 1. Davyt D, et al. J Nat Prod, 2001, 64: 1552

C0006 Bromosphaerone

【结构式】



【分子式】 $C_{20}H_{30}O_3Br_2$

【相对分子质量】 478

【理化常数及谱学数据】 无色粉末; $[\alpha]_D^{25} - 71^\circ$ (c 0.1, CH_2Cl_2); UV(OH) ν_{max} (nm): 205(3.64), 224(3.50); IR(KBr) λ_{max} : 3450 cm^{-1} , 1680 cm^{-1} ; 1H NMR($CDCl_3$) δ : 6.16(d, 1H, $J = 10$, H-2), 6.69(dd, 1H, $J = 5, 10$, H-3), 2.12(d, 1H, $J = 10$, H-9), 3.40(1H, d, $J = 10$, H-10), 3.67(dd, 1H, $J = 3, 4$, H-12), 4.35(dd, 1H, $J = 5, 11$, H-14), 1.28(s, 3H, H-15), 1.16(s, 3H, H-16), 3.42(d, 1H, $J = 11$, H-17), 3.75(d, 1H, $J = 11$, H-17), 1.05(d, 3H, $J = 7$, H-19), 1.11(d, 3H, $J = 7$, H-20); ^{13}C NMR($CDCl_3$) δ : 204.5(C-1), 131.4(C-2), 145.6(C-3), 48.1(C-4), 43.2(C-5), 25.5(C-6), 36.1(C-7), 41.2(C-8), 45.3(C-9), 47.8(C-10), 74.6(C-11), 76.4(C-12), 37.5(C-13), 62.1(C-14), 18.0(C-15), 29.3(C-16), 39.8(C-17), 28.1(C-18), 19.0(C-19), 23.6(C-20); HRFABMS m/z 479.0616(calcd for $C_{20}H_{30}O_3^{79}Br^{81}Br$, 479.0611).

【来源】 红藻 *Sphaerococcus coronopifolius*

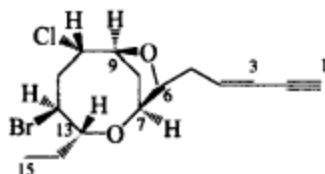
【分析方法】 海藻的甲醇/二氯甲烷提取物经过硅胶柱层析, 洗脱溶剂为正己烷/二氯甲烷、二氯甲烷/丙酮以及甲醇。由二氯甲烷/丙酮(9:1)洗脱部分得到化合物 bromosphaerone。

【生物活性与毒性】 抗革兰阳性菌株 *S. aureus*, 最小抑制浓度为 0.104 $\mu mol/L$ 。

【参考文献】 1. Etahiri S, et al. J Nat Prod, 2001, 64: 1024

C0007 (3Z)-Chlorofucin

【结构式】



【分子式】 $C_{15}H_{20}BrClO_2$

【相对分子质量】 347

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} - 11.3^\circ$ (c 0.58, $CHCl_3$); IR(KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3210, 1220, 1180, 1130, 1101, 1042, 928, 898; 1H NMR($CDCl_3$) δ : 3.11(d, $J = 2.0$, H-1), 5.57(dd, $J = 10.7, 2.0$, H-3), 6.20(ddd, $J = 10.7, 7.3, 7.3$, H-4), 2.72(ddd, $J = 7.3, 6.8, 6.3$, H-5), 2.81(ddd, $J = 7.3, 6.8, 6.3$, H-5), 3.80(ddd, $J = 7.3, 6.8, 2.0$, H-6), 2.07(ddd, $J = 6.3, 4.9, 3.4$, H-8), 4.31(ddd, $J = 3.5, 9.4, 9.4$, H-9), 4.22(ddd, $J = 10.4, 5.4, 4.9$, H-10), 2.50(ddd, $J = 10.4, 4.9, 4.4$, H-11), 3.29(ddd, $J = 9.3, 6.8, 4.4$, H-11), 4.51(dd, $J = 9.3, 9.3$, H-12), 3.99(ddd, $J = 9.3, 4.4, 3.0$, H-13), 1.72(dqd, $J = 11.8, 7.8, 3.0$, H-14), 1.99(dqd, $J = 11.8, 7.8, 4.4$, H-14), 1.08(dd, $J = 7.8, 7.8$, H-15); ^{13}C NMR($CDCl_3$) δ : 82.1(C-2), 80.1(C-1), 110.5(C-3), 141.2(C-4), 30.1(C-5), 84.1(C-6), 71.0(C-7), 33.3(C-8), 79.3(C-9), 62.2(C-10), 38.4(C-11), 52.4(C-12), 83.0(C-13), 23.1(C-14), 11.9(C-15); EIMS m/z 346 $[M]^+$; HREIMS m/z 346.0310(calcd for $C_{15}H_{20}^{79}BrClO_2$, 346.0335, M).

【来源】 马来西亚海藻 *Laurencia pannosa*

【分析方法】 海藻的 MeOH 提取物分配于水和乙醚中, 乙醚溶解部分用水反复清洗, Na_2SO_4 干燥。经硅胶柱层析, 正己烷: 乙酸乙酯梯度洗脱。hexanes-EtOAc (9:1) 洗脱部分经制备 TLC 得到化合物 (3Z)-Chlorofucin。

【生物活性与毒性】 抗 *Chromobacterium violaceum* 菌最小抑制浓度 100 μ g/disk。

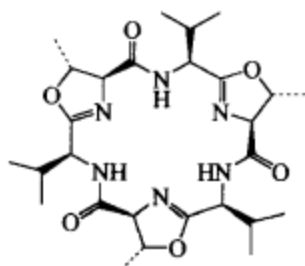
【参考文献】 1. Suzuki M, et al. J Nat Prod, 2001, 64: 597

2. Howard B M, et al. Tetrahedron, 1980, 36: 1747

3. Crimmins MT, et al. Synthesis, 2000: 899

C0008 Cycloxazoline

【结构式】



【分子式】 $C_{27}H_{42}N_6O_6$

【相对分子质量】 546

【理化常数及谱学数据】 1H NMR(400MHz, $CDCl_3$) δ : 4.22(dd, $J = 8.7, 2.1$ Hz, H-2), 4.80(dq, $J = 8.7, 6.1$ Hz, H-3), 1.59(d, $J = 6.1$ Hz, H-4), 4.64(ddd, $J = 7.9, 3.1, 2.1$ Hz, H-6), 2.30(dqq, $J = 7.0, 7.0, 3.1$ Hz, H-7), 0.82(d, $J = 7.0$ Hz, H-8), 0.89(d, $J = 7.0$ Hz, H-9), 7.77(d, $J = 7.9$ Hz, NH); ^{13}C NMR(400MHz, $CDCl_3$) δ : 170.5(C-1), 73.8(C-2), 82.9(C-3), 21.9(C-4), 168.5(C-5), 52.4(C-6), 31.5(C-7), 18.6(C-8), 16.9(C-9)。

【来源】 蓝绿藻 *Lissoclinum bistratum*

【分析方法】 粗提物通过 Whatman Partisil ODS-3 高效液相色谱分离, 纯化, 富集获得活性成分 Cycloxazoline。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 KB 的生长。

【参考文献】 1. Hambley T W, et al. Tetrahedron, 1992, 48: 341

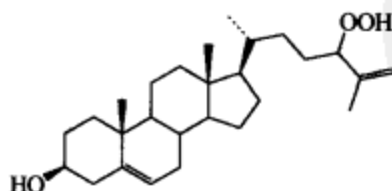
2. Watters D J, et al. Cancer Chemother Pharmacol, 1994, 33: 399

3. Hambley T W, et al. J Nat Prod, 1992, 55: 140

4. Hambley T W, et al. J Am Chem Soc, 1992, 114: 10975

C0009 24-Hydroperoxycholesta-5,25-dien-3-ol

【结构式】



【分子式】 $C_{27}H_{44}O_3$

【相对分子质量】 416

【理化常数及谱学数据】 白色粉末; mp 186~188 $^{\circ}C$; $[\alpha]_D^{24} - 38'$ (c 0.20, $CHCl_3$); IR(KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3400, 1056; 1H NMR(300MHz, $CDCl_3$) δ : 0.67(3H, s, H-18), 0.92(3H, d, 6.3, H-21), 1.01(3H, s, H-19), 1.73(3H, s, H-27), 3.53(1H, m, H-3), 4.27(1H, t, 6.3, H-24), 5.01(1H, s, Ha-26), 5.02(1H, s, Hb-26), 5.35(1H, d, 4.8, H-6), 7.83(1H, brs, —OOH); ^{13}C NMR(75MHz, $CDCl_3$) δ : 37.3(C-1), 31.9(C-2), 71.8(C-3), 42.3(C-4), 140.8(C-5), 121.7(C-6), 31.7(C-7), 35.5(C-8), 50.1(C-9), 36.5(C-10), 21.1(C-11), 39.8(C-12), 42.4(C-13), 56.7(C-14), 24.3(C-15), 28.2(C-16), 55.8(C-17), 11.9(C-18), 19.4(C-19), 31.7(C-20), 18.6(C-21), 27.0(C-22), 29.7(C-23), 90.4(C-24), 143.7(C-25), 114.6(C-

26), 16.9 (C-27); EIMS m/z $[M]^+$ 416 (1.4), 400 (6.2), 398 (9.8), 382 (9.5), 330 (10.3), 273 (10.9), 271 (98.5), 255 (20.3), 253 (11.41), 213 (36.7), 145 (69.91), 105 (100.0); HRMS found 416.3284, calcd 416.3292 for $C_{27}H_{44}O_3$ [1].

【来源】红藻 *Galaxaura marginata* [1]

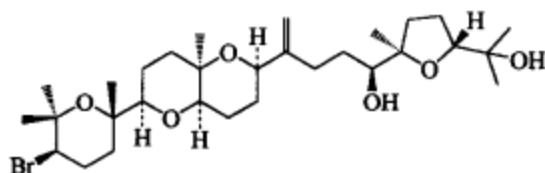
【分析方法】样品 EtOAc 提取, hexane 萃取部分硅胶柱层析 (梯度 hexane-EtOAc) 得到纯化合物 [1].

【生物活性与毒性】细胞毒活性, ED_{50} ($\mu\text{g/mL}$): P-388 0.26; KB 0.33; A-549 0.64; HT-29 0.43 [1].

【参考文献】1. Sheu J H, et al. J Nat Prod, 1996, 59: 23

C0010 Isodehydrothysiferol

【结构式】



【分子式】 $C_{30}H_{51}BrO_6$

【相对分子质量】586

【理化常数及谱学数据】无色油状物; $[\alpha]_D^{25} + 6.5^\circ$ (c 0.23, CHCl_3); IR (CHCl_3) ν_{max} (cm^{-1}): 3490, 2956, 2857, 1725, 1462, 1381; ^1H NMR (400MHz, CDCl_3) δ : 5.04 (1H, s, H-28), 4.88 (1H, s, H-28), 4.30 (1H, dd, 4.3, 7.0, H-14), 3.90 (1H, dd, 12.3, 4.2, H-3), 3.43 (1H, dd, 11.5, 5.9, H-11), 3.15 (1H, dd, 10.7, 1.7, H-22), 3.13 (1H, dd, 10.6, 1.7, H-18), 3.08 (1H, dd, 11.2, 2.6, H-7), 2.42 (1H, m, H-16), 2.25 (1H, m, H-4), 2.13 (1H, m, H-16), 2.12 (1H, m, H-4), 2.09 (2H, m, H-21), 2.06 (1H, m, H-13), 1.88 (1H, m, H-20), 1.88 (1H, m, H-17), 1.85 (1H, m, H-13), 1.82 (1H, m, H-5), 1.81 (1H, m, H-9), 1.80 (1H, m, H-12), 1.78 (1H, m, H-8), 1.60 (1H, m, H-12), 1.55 (1H, m, H-5), 1.55 (1H, m, H-20), 1.51 (1H, m, H-9), 1.50 (1H, m, H-17); ^{13}C NMR (100MHz, CDCl_3) δ : 31.4 (C-1), 75.4 (C-2), 59.5 (C-3), 28.7 (C-4), 37.5 (C-5), 74.8 (C-6), 80.1 (C-7), 23.3 (C-8), 39.1 (C-9), 73.3 (C-10), 79.4 (C-11), 22.3 (C-12), 26.7 (C-13), 72.7 (C-14), 151.7 (C-15), 29.9 (C-16), 27.3 (C-17), 84.1 (C-18), 70.2 (C-19), 40.2 (C-20), 25.0 (C-21), 84.4 (C-22), 72.1 (C-23), 24.4 (C-23), 24.0 (C-25), 20.5 (C-26), 19.8 (C-27), 110.4 (C-28), 20.6 (C-29), 26.8 (C-30); EIMS m/z 572, 570, 506, 473, 445, 443, 403, 363, 332, 25, 143; HREIMS m/z 572.2552, calcd for $C_{29}H_{47}^{81}\text{BrO}_6$, 572.2535 $[M - \text{CH}_3]^+$; 570.2540, calcd for $C_{29}H_{47}^{79}\text{BrO}_6$, 570.2556 $[M - \text{CH}_3]^+$; 506.3613, calcd for $C_{30}H_{50}O_6$, 506.3607 $[M - \text{HBr}]^+$ [1].

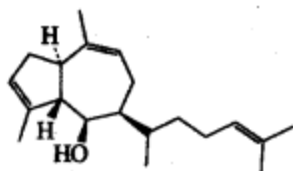
【来源】红藻 *Laurencia viridis* [1]

【生物活性与毒性】细胞毒活性, 抗 P-388、A-549、HT-29、MEL-28 的 IC_{50} ($\mu\text{g/mL}$) 分别为 0.01、2.5、2.5、2.5 [1].

【参考文献】1. Norte M, et al. Tetrahedron Lett, 1996, 37: 2671

C0011 Isopachydictyol A

【结构式】



【分子式】 $C_{20}H_{32}O$

【相对分子质量】288

【理化常数及谱学数据】无色油状物; $[\alpha]_D^{25} - 25.7^\circ$ (c 0.28, CHCl_3); IR (film) ν_{max} (cm^{-1}): 3450,

1639; ^1H NMR (400MHz, CDCl_3) δ : 5.50 (1H, brd, 8.6, H-9), 5.36 (1H, brs, H-3), 5.12 (1H, brt, 7.1, H-14), 3.92 (1H, m, H-6), 2.68 (1H, m, H-1), 2.55 (1H, m, H-5), 2.35 (1H, m, H-2a), 2.27 (1H, m, H-8a), 2.16 (1H, m, H-2b), 2.04 (1H, m, H-13a), 1.94 (1H, m, H-13b), 1.85 (3H, s, H-17), 1.79 (1H, m, H-8b), 1.71 (3H, d, 1.5, H-18), 1.69 (3H, s, H-16), 1.64 (1H, m, H-7), 1.61 (3H, s, H-20), 1.54 (1H, m, H-12), 1.49 (1H, m, H-11), 1.21 (1H, m, H-12), 0.97 (3H, d, 6.6, H-19); ^{13}C NMR (100MHz, CDCl_3) δ : 46.0 (C-1), 35.4 (C-2), 124.3 (C-3), 142.8 (C-4), 57.4 (C-5), 74.5 (C-6), 46.9 (C-7), 24.5 (C-8), 126.0 (C-9), 138.7 (C-10), 33.6 (C-11), 34.7 (C-12), 25.4 (C-13), 124.7 (C-14), 131.5 (C-15), 25.7 (C-16), 16.2 (C-17), 23.1 (C-18), 17.5 (C-19), 17.7 (C-20); EIMS (70 eV) m/z (rel. int.) 288 (M^+ , 17), 270 ($\text{M}^+ - \text{H}_2\text{O}$, 10), 255 ($\text{M}^+ - \text{H}_2\text{O} - \text{CH}_3$, 9), 227 (6), 175 (19), 159 (71), 157 (60), 145 (36), 131 (41), 109 (52), 107 (100), 105 (66), 95 (63), 81 (66), 69 (75), 55 (75); HREIMS m/z M^+ Obsd. 288.2444, $\text{C}_{20}\text{H}_{32}\text{O}$, requires 288.2453.

【来源】藻类 *Dictyota dichotoma*^[1]

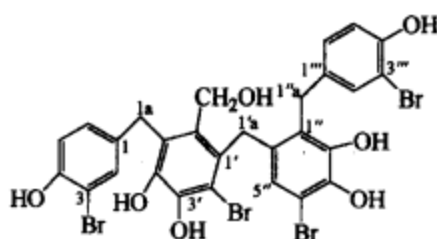
【分析方法】样品丙酮提取, 水-乙醚萃取, 乙醚部分硅胶柱层析 (梯度 hexane-Et₂O), 正相 HPLC (hexane-EtOAc 98:2) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】具有细胞毒活性, 抗小鼠的淋巴瘤细胞 P-388、人肺癌细胞 A-549、人结肠癌细胞 HT-29、人黑肿瘤细胞 MEL-28 ED₅₀ 5 $\mu\text{g}/\text{mL}$ ^[1]。

【参考文献】1. Duran R, et al. Tetrahedron, 1997, 53: 8675

C0012 Isorawsonol

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{28}\text{H}_{22}\text{Br}_4\text{O}_7$

【相对分子质量】709 ($\text{C}_{28}\text{H}_{22}^{79}\text{Br}_2^{81}\text{Br}_2\text{O}_7$)

【理化常数及谱学数据】无色固体; mp 194°C; $[\alpha] + 15.4^\circ$ (c 0.35, CHCl_3); HRFABMS (-) m/z 788.7980 [$\text{C}_{28}\text{H}_{22}^{79}\text{Br}_2^{81}\text{Br}_2\text{O}_7 - \text{H}$]⁻; LRFABMS (-) m/z (rel. int.) 785 (6), 787 (16), 789 (25), 791 (15), 793 (2); IR (neat) ν_{max} (cm^{-1}): 3450, 2930, 2880, 2800, 1640, 1500, 1290; UV (MeOH) λ_{max} (nm): 224, 286; ^1H NMR (300MHz, $\text{Me}_2\text{CO}-d_6$) δ : 7.40 (H, d, $J = 1.9\text{Hz}$, H-2''), 7.31 (H, d, $J = 1.6\text{Hz}$, H-2), 7.14 (H, dd, $J = 8.3, 1.9\text{Hz}$, H-6''), 7.00 (H, d, $J = 8.2, 1.6\text{Hz}$, H-6), 6.91 (H, d, $J = 8.3\text{Hz}$, H-5), 6.87 (H, d, $J = 8.2\text{Hz}$, H-5), 6.14 (H, s, H-1'a), 4.36 (2H, s, $-\text{CH}_2\text{OH}$), 4.17 (4H, s, H-1a, H-1a'), 4.14 (2H, s, H-1''a); ^{13}C NMR (75MHz, $\text{Me}_2\text{CO}-d_6$): 134.65 (C-1), 133.22 (C-2), 110.17 (C-3), 152.72 (C-4), 116.97 (C-5), 129.20 (C-6), 30.83 (C-1a), 127.67 (C-1'), 113.67 (C-2'), 142.87 (C-3'), 144.25 (C-4'), 130.28 (C-5'), 133.64 (C-6'), 59.56 ($-\text{CH}_2\text{OH}$), 35.28 (C-1'a), 126.03 (C-1''), 145.80 (C-2''), 141.21 (C-3''), 108.96 (C-4''), 122.11 (C-5''), 133.68 (C-6''), 30.88 (C-1''a), 133.52 (C-1''), 133.35 (C-2''), 110.17 (C-3''), 152.82 (C-4''), 117.05 (C-5''), 129.60 (C-6'').

【来源】绿藻 *Avrainvillea rawsonii*

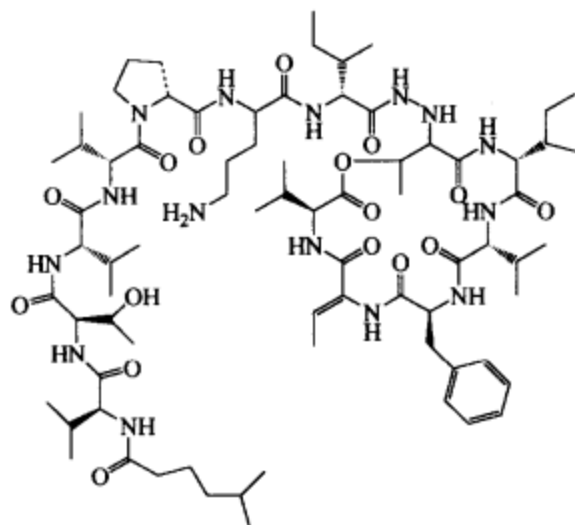
【分析方法】海藻的甲醇-氯仿 (1:1) 提取物用 flash 硅胶柱梯度洗脱, 极性较大部分 (70% 乙酸乙酯-正己烷到 30% 甲醇-乙酸乙酯) 进一步用硅胶柱分离得到纯品。结构通过 (HR) MS、UV、IR 和 NMR (^1H NMR, ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】IMP 脱氢酶 (IMPDH) 抑制剂, $\text{IC}_{50} = 7.4\mu\text{mol}/\text{L}$ 。

【参考文献】 1. Chen J L, et al. J Nat Prod, 1994, 57 (7): 947

C0013 Kahalalide F

【结构式】



【分子式】 $C_{75}H_{125}N_{15}O_{16}$

【相对分子质量】 1492

【来源】 绿微藻 *Bryopsis* sp. 和海洋软体动物 *Elysia rufescens*

【分析方法】 参见文献 [1,2]。

【生物活性与毒性】 已知其作用对象是细胞溶酶体, 具体抗肿瘤作用机制还不清楚, 因此该化合物能选择性作用于具高度溶酶活性的肿瘤细胞, 如前列腺肿瘤^[3]。对前列腺癌和乳腺癌的观察显示 kahalalide F 可能通过 oncosis 途径诱导细胞凋亡, 即首先作用于溶酶体外膜, 使之去极化。

【临床与实用价值】 2000 年 12 月在欧洲进入 I 期临床, 用于治疗男性性激素非依赖型的前列腺癌^[4]。最近开始的 II 期临床增加了对肝癌患者的观察^[5], 不影响干细胞及造血功能。

【参考文献】 1. Hamann M T, et al. J Am Chem Soc, 1993, 115: 5825

2. Hamann M T, et al. J Org Chem, 1996, 61: 6594

3. Garcia-Rocha M, et al. J Cancer Lett, 1996, 99: 43

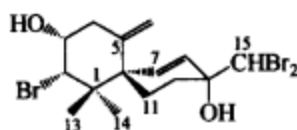
4. Lopez-Macia A, et al. J Am Chem Soc, 2001, 123: 11398

5. Anon. DailyDrugNews. com (Daily Essentials) 2003, June 3

6. Gomez S G, et al. Exp Hematol, 2003, 31: 1104

C0014 Ma'iliohydrin

【结构式】



【分子式】 $C_{15}H_{21}Br_3O_2$

【相对分子质量】 473

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} - 9.6^\circ (c 0.26, CHCl_3)$; IR (KBr) $\lambda_{max} (cm^{-1})$: 3447, 3076, 2925, 1457, 1371, 1075, 1032, 750, 698; 1H NMR ($CDCl_3$) δ : 4.59 (d, 2.9, H-2), 2.56 (dd, 2.4, 15.1, H-4), 2.70 (dm, 15.0, H-4), 6.07 (d, 10.5, H-7), 5.92 (d, 10.6, H-8), 4.84 (brs, H-12), 5.09 (brs, H-12), 1.01 (s, H-13), 1.21 (s, H-14), 5.57 (s, H-15); ^{13}C NMR ($CDCl_3$) δ : 42.7 (C-1), 70.0 (C-2), 71.9 (C-3), 37.9 (C-4), 142.5 (C-5), 51.5 (C-6), 137.7 (C-7), 128.9 (C-8), 72.2 (C-9), 29.0 (C-10), 22.6 (C-11), 117.5 (C-12),

26.6(C-13), 21.5(C-14), 57.3(C-15); EIMS m/z 474 $[M+4]$, 472 $[M+2]$, 470 $[M+]$; HREIMS m/z 471.9095 (calcd for $C_{15}H_{21}O_2^{79}Br^{81}Br$, 471.9072), 473.9064 (calcd for $C_{15}H_{21}O_2^{79}Br^{81}Br_2$, 473.9052)。

【来源】 海藻 *Laurencia* sp.

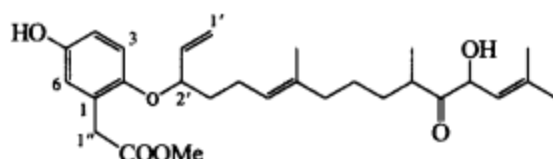
【分析方法】 冻干的海藻用水提取 3 次, 每次 4h, 残渣用甲醇提取, 合并提取液。提取物悬浮于 MeOH-H₂O (9:1) 中, 用正己烷萃取。甲醇层重新分配于水和 CCl₄ 之间, 四氯甲烷层经过 Sephadex LH-20 柱层析后, 洗脱溶剂为 hexanes-CH₂Cl₂-MeOH (2:5:1)。经反复 PTLC 制备得到化合物 Ma'iliohydrin。

【生物活性与毒性】 对乳腺癌的 GI₅₀ 值为 10^{-8} mol/L。

【参考文献】 1. Elena M, et al. J Nat Prod, 2001, 64: 790

C0015 Nahocol A

【结构式】



【分子式】 $C_{28}H_{40}O_6$

【相对分子质量】 472

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} - 168.7$ (c 0.99); UV λ_{max} (lg ϵ) (nm): 205(4.3), 225(3.8), 293(3.3); IR ν_{max} (cm⁻¹): 3450, 1730, 1610, 1590, 1495, 1460, 1410, 1380, 1360, 1220, 1200, 1165, 1100, 920; ¹H NMR (400MHz, CDCl₃) δ : 6.91(1H, d, 8.8, H-3), 6.68(1H, d, 3.4, H-6), 6.57(1H, dd, 3.4, 8.8, H-4), 6.04(1H, dd, 11.2, 17.6, H-2'), 5.18(1H, dd, 17.6, 0.9, H-1'), 5.17(1H, dd, 11.2, 0.9, H-1'), 5.09(1H, t, 7.0, H-6'), 4.98(1H, ddd, 1.5, 9.8, 1.0, H-14'), 4.86(1H, dd, 9.8, 3.9, H-13'), 3.68(3H, s, MeO), 3.61(1H, d, 16.2, H-1''), 3.55(1H, d, 16.2, H-1''), 2.68(1H, m, H-11'), 2.07(2H, m, H-5'), 1.72(1H, m, H-4'), 1.58(1H, m, H-10'), 1.55(3H, s, H-18'), 1.36(3H, s, H-16'), 1.32(3H, m, H-9', 10'), 1.05(3H, d, 6.8, H-19'); ¹³C NMR (100MHz, CDCl₃) δ : 127.2(C-1), 148.9(C-2), 119.7(C-3), 114.1(C-4), 149.9(C-5), 117.7(C-6), 114.2(C-1'), 143.6(C-2'), 81.7(C-3'), 42.0(C-4'), 22.3(C-5'), 126.4(C-6'), 134.6(C-7'), 39.4(C-8'), 25.3(C-9'), 33.6(C-10'), 41.3(C-11'), 214.6(C-12'), 74.3(C-13'), 121.1(C-14'), 139.9(C-15'), 25.9(C-16'), 22.5(C-17'), 15.7(C-18'), 16.1(C-19'), 18.6(C-20'), 36.4(C-1''), 172.3(C-2'') 51.8(CH₃O); HREIMS m/z 486.3001(M)⁺, $\Delta = +1.9$ mmu。

【来源】 棕藻 *Sargassum autumnale*^[1]

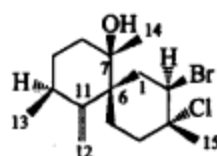
【分析方法】 样品甲醇提取, hexane-含 10% 甲醇水萃取, 甲醇水萃取部分硅胶柱层析 (梯度 hexane-EtOAc), HPLC (MeOH-H₂O 4:6), RP-18 柱层析 (MeOH-H₂O) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 Endothelin 拮抗活性, ET_A (Bovine Aorta) 76.1 μ mol/L, ET_B (porcine lung) 21.6 μ mol/L^[1]。

【参考文献】 1. Tsuchiya N, et al. Phytochemistry, 1998, 48: 1003

C0016 Pannosanol

【结构式】



【分子式】 $C_{15}H_{24}BrClO$

【相对分子质量】 335

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} + 4.97$ (c 0.52, CHCl₃); IR (KBr) λ_{max} (cm⁻¹): 3450, 1621,

1295, 1190, 1105, 1083, 1052, 1030, 978, 910, 810; ^1H NMR(CDCl_3) δ : 1.96(dd, $J = 13.2, 13.2$, H-1) 2.68(ddd, $J = 13.2, 3.4, 3.4$, H-1) 4.18(dd, $J = 13.2, 3.4$, H-2) 2.24(ddd, $J = 13.7, 3.4, 3.4$, H-4) 2.43(ddd, $J = 13.7, 10.3, 3.4$, H-4) 5.01(s, H-12) 5.34(s, H-12) 1.10(d, $J = 6.3$, H-13) 1.21(s, H-14) 1.75(s, H-15); ^{13}C NMR(CDCl_3) δ : 40.7(C-1), 61.2(C-2), 72.9(C-3), 39.5(C-4), 25.1(C-5), 53.1(C-6), 75.7(C-7), 34.2(C-8), 35.9(C-9), 32.8(C-10), 152.2(C-11), 113.1(C-12), 19.9(C-13), 23.2(C-14), 24.6(C-15); EIMS m/z 316 $[\text{M} - \text{H}_2\text{O}]^+$; HREIMS m/z 316.0584(calcd for $\text{C}_{15}\text{H}_{24}^{79}\text{Br}^{35}\text{ClO}$, 316.0593, $\text{M} - \text{H}_2\text{O}$).

【来源】 马来西亚海藻 *Laurencia pannosa*

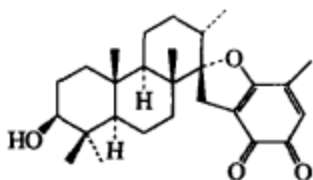
【分析方法】 海藻的 MeOH 提取物分配于水和乙醚中, 乙醚溶解部分用水反复清洗, Na_2SO_4 干燥。经硅胶柱层析, 正己烷: 乙酸乙酯梯度洗脱。hexanes-EtOAc (9:1) 洗脱部分经制备 TLC 得到化合物 Pannosanol。

【生物活性与毒性】 抗 *Proteus mirabilis* 菌, 最小抑制浓度 $60\mu\text{g}/\text{disk}$, 抗 *Chromobacterium* 菌最小抑制浓度 $100\mu\text{g}/\text{disk}$ 。

【参考文献】 1. Suzuki M, et al. J Nat Prod, 2001, 64: 597

C0017 Stypoldione

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{27}\text{H}_{38}\text{O}_4$

【相对分子质量】 480

【理化常数及谱学数据】 mp 170°C ; $[\alpha]_D - 65.1^\circ$ (c 0.46, CHCl_3); UV(MeOH) λ_{max} (nm): 475(882), 270(2470); IR(CHCl_3) ν_{max} (cm^{-1}): 1675, 1650; HRMS(70eV) m/z : 482.2924($\text{M}^+ + 2$, $\text{C}_{27}\text{H}_{40}\text{O}_4$, 38%); ^1H NMR(220MHz, CDCl_3) δ : 2.90(d, $J = 16.0\text{Hz}$, H-1), 2.59(d, $J = 16.0\text{Hz}$, H-1), 3.11(dd, $J = 10.0, 4.0\text{Hz}$, H-14), 0.97(s, H₃-17), 0.96(H₃-18), 0.85(H₃-19), 0.73(H₃-20), 0.74(d, $J = 6.0\text{Hz}$, H-16), 5.99(m, $J = 1.0\text{Hz}$, H-4'), 2.14(d, $J = 1.0\text{Hz}$, H-7); ^{13}C NMR(CDCl_3): 182.7(s), 174.5(s), 170.3(s), 143.2(s), 128.7(d), 114.5(s), 103.8(s), 78.7(d), 55.3(d), 51.6(d), 42.5(s), 38.8(d), 38.4(s), 37.1(t), 37.1(s), 33.0(t), 30.9(t), 30.5(t), 28.0(q), 27.3(t), 20.2(t), 17.7, 17.0, 16.8, 16.3, 15.4, 15.4(q)。

【来源】 褐藻 *Stypopodium zonale*

【分析方法】 甲醇提取物经氯仿萃取, 硅胶柱层析分离 (10% EtOAc/ CH_2Cl_2), 并通过乙醚重结晶获得活性成分 Stypoldione。

【生物活性与毒性】 毒鱼作用。

【参考文献】 1. Gerwick W H, et al. Tetrahedron Lett, 1979, 145

2. Mori K, et al. Liebigs Ann Chem, 1991, 769

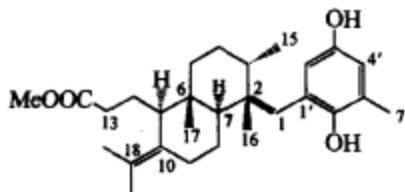
3. O'Brien E T, et al. Hydrobiologia, 1984, 116: 141

4. Fish P V, et al. Tetrahedron Lett, 1988, 29: 3857

5. Koga Y, et al. Tennen Yuki Kagobutsu Toronkai Koen Yosh, 1990, 32: 358

C0018 Stypopodium acid C

【结构式】



【分子式】 $C_{28}H_{42}O_4$

【相对分子质量】 442

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} + 52.1^\circ (c\ 0.05, CHCl_3)$; IR (film) $\lambda_{max} (cm^{-1})$: 3446, 2936, 1724, 1648, 1437; 1H NMR: 2.21(d, $J = 14.1$), 2.81(d, $J = 14.1$), 1.46(dd, $J = 3.9, 13.5$), 1.37(dd, $J = 6.1, 12$), 2.39(dd, $J = 8.9, 13.2$), 1.13(d, $J = 6.9$), 0.92(s), 1.01(s), 6.47(d, $J = 2.9$), 6.60(d, $J = 2.9$), 2.18(s), 3.65(s); ^{13}C NMR: 35.2, 40.5, 35.1, 25.3, 36.5, 38.9, 41.8, 22.4, 23.4, 133.0, 53.1, 25.2, 33.1, 174.8, 15.8, 20.4, 17.9, 123.3, 20.4, 20.7, 126.9, 146.7, 124.3, 114.9, 148.3, 115.2, 16.5, 51.4; EIMS m/z 442 $[M]^+$; HREIMS $[M]^+$ 442.307 (calcd for $C_{28}H_{42}O_4$, 442.308)。

【来源】 褐藻 *Stypopodium zonale*

【分析方法】 海绵的二氯甲烷提取物经过快速硅胶柱层析迅速分成8个部分, 其中 hexane-EtOAc (1:1) 洗脱部分进行甲基化, 由正相 HPLC (Jaigel-sil column 20mm $\times$ 50mm, $CHCl_3$) 纯化得到化合物 *Stypopodium acid C*。

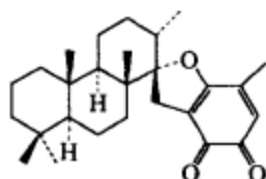
【生物活性与毒性】 对人结肠癌细胞 HT-29、H-116 和人肺癌细胞 A-549 显示较强的体外活性, IC_{50} 值均小于 2.5 $\mu g/mL$ 。

【参考文献】 1. E. Dorta, et al. J Nat Prod, 2002, 65: 1727

2. Wessels M, et al. J Nat Prod, 1999, 62: 927

C0019 Stypotriol

【结构式】

【分子式】 $C_{27}H_{38}O_3$

【相对分子质量】 464

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D - 10.0^\circ (c\ 0.82, CHCl_3)$; UV (MeOH) λ_{max} : 291nm (2990); IR ($CHCl_3$) ν_{max} : 3500 (cm^{-1}); 1H NMR (220MHz, $CDCl_3$) δ : 3.18(d, $J = 16.0$ Hz, H-1), 2.76(d, $J = 16.0$ Hz, H-1), 3.24(dd, $J = 10.0, 4.0$ Hz, H-14), 0.97(s, H₃-17), 0.92(s, H₃-18), 0.85(s, H₃-19), 0.76(s, H₃-20), 0.68(d, $J = 6.0$ Hz, H-16), 6.44(s, H-4'), 2.10(s, H-7)。

【来源】 褐藻 *Stypopodium zonale*

【分析方法】 甲醇提取物经氯仿萃取, 硅胶柱层析, 用 $Et_2O : C_6H_6$ (1:1) 为流动相, 并通过乙醚重结晶获得活性成分 *Stypotriol*。

【生物活性与毒性】 毒鱼作用。

【参考文献】 1. Gerwick W H, et al. Tetrahedron Lett, 1979, 145

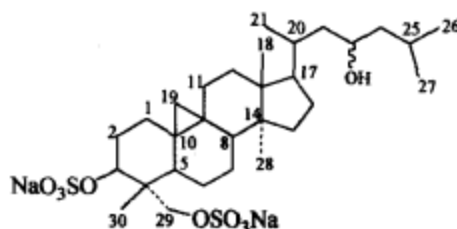
2. Gerwick W H, et al. J Org Chem, 1981, 46: 22

3. Rovirosa J, et al. Phytochemistry, 1992, 31: 2679

4. Rovirosa J, et al. Fitoterapia, 1997, 68: 473

C0020 Cycloartan-3,23,29-trihydroxy-3,29-disulfate sodium

【结构式】



【分子式】 $C_{30}H_{50}O_9S_2Na_2$

【相对分子质量】 664

【理化常数及谱学数据】 无色固体; mp 203~204°C; $[\alpha] + 20.5^\circ (c\ 0.05)$; HRFABMS(-) m/z 641.2794 $[M-Na]^-$; IR ν_{max} (cm^{-1}): 3453, 1464, 1376, 1224~1247; 1H NMR (500MHz, CD_3OD) δ : 1.55, 1.28(2H, m, H-1), 2.26, 1.75(2H, m, H-2), 4.46(H, dd, $J = 13, 5$ Hz, H-3), 1.83(H, dd, $J = 7, 2$ Hz, H-5), 1.73, 0.85(2H, m, H-6), 1.55, 1.24(2H, m, H-7), 1.52(H, dd, $J = 13, 5$ Hz, H-8), 2.02, 1.12(2H, m, H-11), 2.26(2H, m, H-12), 2.04, 1.70(2H, m, H-13), 1.84, 1.30(2H, m, H-14), 1.53(H, m, H-17), 1.04(3H, s, H-18), 0.58, 0.39(2H, d, $J = 2.5$ Hz, H-19), 1.70(H, m, H-20), 0.91(3H, d, $J = 7$ Hz, H-21), 1.36, 1.13(2H, m, H-22), 3.72(H, m, H-23), 1.50, 0.95(2H, m, H-24), 1.30(H, m, H-25), 0.91(6H, d, $J = 7$ Hz, H-26, H-27), 0.94(3H, s, H-28), 4.02, 3.76(2H, d, $J = 11$ Hz, H-29), 0.85(3H, s, H-30); ^{13}C NMR (125MHz, CD_3OD): 32.6(C-1), 27.6(C-2), 80.8(C-3), 44.6(C-4), 42.1(C-5), 21.5(C-6), 29.7(C-7), 49.6(C-8), 21.2(C-9), 26.6(C-10), 26.8(C-11), 36.7(C-12), 46.7(C-13), 50.1(C-14), 34.3(C-15), 28.2(C-16), 54.5(C-17), 18.7(C-18), 30.8(C-19), 33.7(C-20), 18.9(C-21), 49.3(C-22), 67.7(C-23), 46.0(C-24), 25.8(C-25), 23.6(C-26), 22.7(C-27), 19.8(C-28), 69.8(C-29), 11.7(C-30)。

【来源】 绿藻 *Tydemania expeditionis*

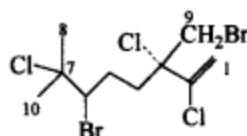
【分析方法】 海绵的氯仿-甲醇提取物在甲醇-水和正己烷间分配, 甲醇-水层再用氯仿萃取, 剩下的甲醇-水浓缩后用反相 HPLC (甲醇-水 7:3) 分离得到纯品。结构通过 (HR) MS、IR 和 NMR (1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 对蛋白酪氨酸激酶 PP60^{v-src} 抑制作用, $IC_{50} = 100\mu mol/L$ 。

【参考文献】 1. Govindan M, et al. J Nat Prod, 1994, 57 (1): 74

C0021 6(R)-Bromo-3(S)-(bromomethyl)-7-trichloro-2,3,7-methyloct-1-ene

【结构式】



【分子式】 $C_{10}H_{15}Br_2Cl_3$

【相对分子质量】 402 ($C_{28}H_{22}^{79}Br_2^{35}Cl^{37}Cl_2$)

【理化常数及谱学数据】 mp 49~50°C; $[\alpha] + 206^\circ (c\ 1.08, CH_2Cl_2)$, HREIMS(-) m/z 401.8583 $[C_{28}H_{22}^{79}Br_2^{35}Cl^{37}Cl_2]^+$, 399.8637 $[C_{28}H_{22}^{79}Br_2^{35}Cl_3]^+$; LRCIMS(NH_3) m/z (rel. int.) 416(30)/418(100)/420(100)/422(50)/424(10) $[M+NH_4]^+$; 在甲醇中析出单晶; 1H NMR (500MHz, $CDCl_3$) δ : 5.61, 5.84(2H, d, $J = 2.4$ Hz, H-1), 2.53(H, ddd, $J = 13.2, 10.2, 1.9$ Hz, H-4a), 2.14(H, t, $J = 10.2$ Hz, H-4b), 2.48(H, ddd, $J = 13.2, 11.5, 1.5$ Hz, H-5a), 1.97(H, ddd, $J = 11.5, 11.2, 10.2$ Hz, H-5b), 4.02(H, dd, $J = 12.5, 1.5$ Hz, H-6), 1.66(3H, s, H-8), 3.83, 3.77(2H, d, $J = 10.7$ Hz, H-9), 1.77(H, s, H-10); ^{13}C NMR (125MHz, $CDCl_3$): 118.5(C-1), 139.7(C-2), 73.8(C-3), 37.8(C-4), 30.1(C-5), 64.6(C-6), 71.6(C-7), 27.1(C-8), 38.6(C-9), 33.1(C-10)。X-Ray 数据见文献[1]。

【来源】 红藻 *Portieria hornemannii*

【分析方法】 海藻的甲醇-二氯甲烷 (1:1) 提取物在甲醇-水 (9:1) 和二氯甲烷间分配, 二氯甲烷萃取层上 Sephadex LH-20 (甲醇-二氯甲烷 1:1), 得到的馏分重结晶即得。结构通过 (HR) MS、NMR (1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 和 X-Ray 等方法确定。

【生物活性与毒性】 对脑肿瘤、肾区肿瘤和结肠肿瘤细胞有很强的细胞毒活性。

【临床与实际应用】 已被美国 NCI 选中, 并作进一步的药物开发。

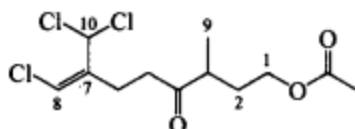
【参考文献】 1. Fuller R W, et al. J Med Chem, 1992, 35: 3007

2. Fuller R W, et al. J Med Chem, 1994, 37: 4407

D 其他海洋天然产物

D0001 (7Z)-1-Acetoxy-8-chloro-7-(dichloromethyl)-3-methyloct-7-en-4-one

【结构式】



【分子式】 $C_{12}H_{17}Cl_3O_3$

【相对分子质量】 316

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} - 5.0^\circ (c 1.3, CHCl_3)$; IR (film) $\nu_{max} (cm^{-1})$: 2963, 2927 (CH, aliphatic), 1747 (CdO), 1690 (CdC), 1454, 1380 (CH_3), 1236, 1057 (CO), 746 (CCl); 1H NMR (400MHz, $CDCl_3$) δ : 6.92(1H, d, 0.4, H-10), 6.03(1H, td, 1.2, 0.4, H-8), 4.08(1H, ddd, 11.0, 6.9, 6.0, H-1a), 4.01(1H, ddd, 11.0, 6.9, 6.0, H-1b), 2.86(1H, ddd, 17.5, 7.5, 6.7, H-5a), 2.80(1H, ddd, 17.5, 7.5, 6.7, H-5b), 2.73(2H, m, H-6), 2.65(1H, m, H-3), 2.04(1H, m, H-2a), 2.02(3H, s, 7.5, CH_3CO), 1.65(1H, dq, 12.8, 6.0, H-2b), 1.12(3H, d, 7.0, H-9); ^{13}C NMR (100MHz, $CDCl_3$) δ : 62.2 (C-1), 31.3 (C-2), 43.1 (C-3), 211.6 (C-4), 39.8 (C-5), 23.6 (C-6), 138.4 (C-7), 117.5 (C-8), 16.6 (C-9), 68.1 (C-10), 170.9, 20.9 (CH_3CO); EIMS (70eV) m/z (rel int): 314, 316, 318, 320 (3.2, 3.2, 1.1, 0.1), 255, 257, 259, 261 (8.3, 7.7, 2.5, 0.6), 219, 221, 223 (34.5, 23.1, 4.1), 199, 201, 203, 205 (51.0, 51.5, 18.5, 4.8), 135, 137, 139 (100.0, 57.2, 15.0); HREIMS m/z 256.0002, 254.0032; calcd for $C_{10}H_{13}O^{35}Cl_2^{37}Cl$ 256.0001, for $C_{10}H_{13}O^{35}Cl_3$ 254.0026^[1].

【来源】 海兔 *Aplysia punctata*^[1]

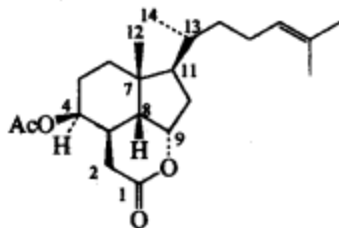
【分析方法】 样品丙酮提取, 水-乙醚萃取, 乙醚部分硅胶柱层析 (梯度 hexane- Et_2O), 正相 HPLC (hexane- $EtOAc$ 99:1) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 具有细胞毒活性, ED_{50} : P-388 2.5 $\mu g/mL$; HT-29 2.5 $\mu g/mL$; A-549 1.5 $\mu g/mL$; MEL-28 1.5 $\mu g/mL$ ^[1]。

【参考文献】 1. Ortega M J, et al. J Nat Prod, 1997, 60: 482

D0002 4-Acetylapykurodin B

【结构式】



【分子式】 $C_{22}H_{34}O_4$

【相对分子质量】 362

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D^{20} - 26.1^\circ (c 0.74, CHCl_3)$; IR ($CHCl_3$) ν_{max} : 1730 cm^{-1} ; HREIMS m/z : $[M]^+$ 362.2411 ($C_{22}H_{34}O_4$ require 362.2457), 302, 287, 191; 1H NMR (500MHz, $CDCl_3$) δ : 2.12 (dd, $J =$

17.4, 10.8 Hz, H-2), 2.47 (dd, $J = 17.4, 3.0$ Hz, H-2), 1.95 (m, H-3), 4.98 (m, H-4), 0.93 (m, H-5), 1.10 (m, H-5), 1.55 (m, H-6), 1.85 (m, H-6), 2.05 (m, H-8), 4.98 (m, H-9), 2.12 (m, H-10), 1.87 (m, H-11), 0.97 (s, H-12), 1.40 (m, H-13), 0.94 (d, $J = 6.5$ Hz, H-14), 1.08 (m, H-15), 1.40 (m, H-15), 1.86 (m, H-16), 2.03 (m, H-16), 5.06 (bt, H-17), 1.68 (bs, H-19), 1.60 (bs, H-20), 2.08 (s, MeCO); ^{13}C NMR (250 MHz, CDCl_3) δ : 171.0 (s, C-1), 33.3 (t, C-2), 32.0 (d, C-3), 69.6 (d, C-4), 24.8 (t, C-5), 29.6 (t, C-6), 43.1 (s, C-7), 43.8 (d, C-8), 80.4 (d, C-9), 37.6 (t, C-10), 48.4 (d, C-11), 23.0 (q, C-12), 35.2 (d, C-13), 18.6 (q, C-14), 36.3 (t, C-15), 25.7 (t, C-16), 124.4 (d, C-17), 131.5 (s, C-18), 25.6 (q, C-19), 17.7 (q, C-20), 21.0 (q, MeCO), 170.3 (s, MeCO).

【来源】 地中海软体动物 *A. fasciata*

【分析方法】 丙酮粗提物分配于水中, 乙醚萃取的部分经硅胶柱层析, 石油醚-乙醚 (2:8) 分离得到活性成分 4-Acetylaplykurodin B。

【生物活性与毒性】 毒鱼作用。

【参考文献】 1. Spinella A, et al. *J Nat Prod*, 1992, 55: 989

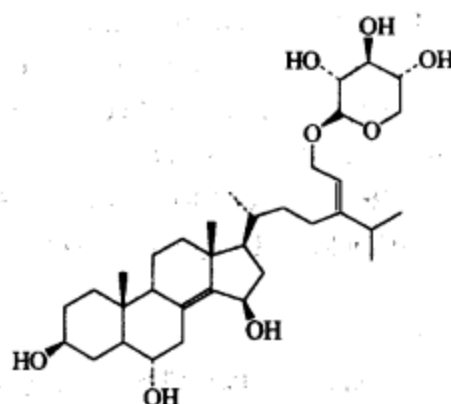
2. Miyamoto T, et al. *Tetrahedron Lett*, 1986, 27: 1153

3. De Riccardis F, et al. *Tetrahedron Lett*, 1995, 36: 4303

4. Izzo I, et al. *Eur J Org Chem*, 2000, 439

D0003 Acodontasteroside I

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{34}\text{H}_{56}\text{O}_8$

【相对分子质量】 592

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{24} - 20.8^\circ$ (c 1.0, MeOH); ^1H NMR (500 MHz, CD_3OD) δ : 5.36 (1H, t, 7.0, H-28), 4.62 (1H, t, 7.6, H-15), 4.32 (1H, dd, 10.5, 7.0, H-29a), 4.19 (1H, dd, 10.5, 6.8, H-29b), 3.52 (1H, m, H-3), 3.40 (1H, dt, 10.5, 5.1, H-6), 3.11 (1H, dd, 12.9, 5.1, H-7 β), 2.30 (1H, m, H-25), 2.21 (1H, m, H-20), 2.20 (1H, m, H-16a), 1.95 (1H, dd, H-9), 1.65 (1H, brd, H-7 α), 1.41 (1H, m, H-16b), 1.07 (3H, d, 7.0, H-26), 1.06 (3H, d, 7.0, H-27), 1.06 (3H, s, H-18), 1.02 (3H, d, 7.0, H-21), 0.79 (3H, s, H-19), 4.25 (1H, d, 7.6, H-1'), 3.89 (1H, dd, 10.0, 5.0, H-5'eq), 3.50 (1H, m, H-4'), 3.30 (1H, t, 9.5, H-3'), 3.20 (1H, dd, 9.5, 7.6, H-2'), 3.16 (1H, t, 10.0, H-5'ax), ^{13}C NMR (125 MHz, CD_3OD) δ : 38.7 (C-1), 31.9 (C-2), 71.7 (C-3), 33.4 (C-4), 50.3 (C-5), 70.2 (C-6), 39.5 (C-7), 133.0 (C-8), 52.3 (C-9), 37.9 (C-10), 20.7 (C-11), 38.1 (C-12), 44.3 (C-13), 147.0 (C-14), 70.5 (C-15), 40.0 (C-16), 55.5 (C-17), 19.4 (C-18), 13.9 (C-19), 36.7 (C-20), 19.0 (C-21), 36.9 (C-22), 27.2 (C-23), 152.5 (C-24), 35.9 (C-25), 22.6 (C-26), 22.5 (C-27), 119.2 (C-28), 66.5 (C-29), 103.8 (C-1'), 75.0 (C-2'), 78.0 (C-3'), 71.0 (C-4'), 67.0 (C-5'); FABMS [m/z 591 ($\text{M} - \text{H}$) $^-$ and m/z 459 ($\text{M} - 132$) $^-$] [1].

【来源】 海星 *Acodontaster conspicuus* [1]

【分析方法】 样品水浸提取, 提取物离心后上树脂柱 Amberlite XAD-2 (H_2O -MeOH), 甲醇洗脱部分

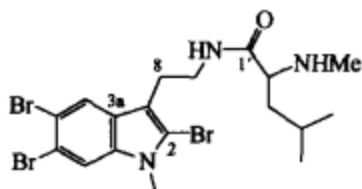
水-正丁醇萃取, 正丁醇部分 Sephadex LH-60 柱层析 (MeOH-H₂O 2:1), DCCC (CHCl₃-MeOH-H₂O 7:13:8), 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 具有抗菌活性, 对 McM13.3 和 McM32.2 具有活性^[1]。

【参考文献】 1. De Marina S, et al. J Nat Prod, 1997, 60: 959

D0004 Alternatamide A

【结构式】



【分子式】 C₁₈H₂₄Br₃N₃O

【相对分子质量】 538

【理化常数及谱学数据】 无色无定形固体; $[\alpha]_D^{25} - 121.7^\circ$ (c 0.34, CHCl₃); UV (MeOH) $\lambda_{\max}$ (nm): 236 (ϵ 52000), 296 (ϵ 10700), 306 (ϵ 9400); IR (CHCl₃) $\nu_{\max}$ (cm⁻¹): 3350, 1600, 1518, 1462, 1425, 1369, 1308, 1093, 867; ¹H NMR (500MHz, CDCl₃) δ : 7.78 (1H, s, H-4), 7.52 (1H, s, H-7), 7.29 (1H, s, NH), 3.67 (3H, s, H-11), 3.52 (1H, m, H-9a), 3.46 (1H, m, H-9b), 2.91 (2H, dd, 6.8, 6.8, H-2), 2.91 (1H, m, H-2'), 2.24 (3H, s, H-7'), 1.62 (1H, m, H-4'), 1.51 (1H, m, H-3'a), 1.25 (1H, m, H-3'b), 0.93 (3H, d, 6.4, H-6'), 0.88 (3H, d, 6.4, H-5'); ¹³C NMR (125MHz, CDCl₃) δ : 115.8 (C-2), 111.6 (C-3), 127.9 (C-3a), 122.4 (C-4), 117.1 (C-5), 115.0 (C-6), 114.1 (C-7), 136.2 (C-7a), 25.4 (C-8), 38.6 (C-9), 31.7 (C-11), 174.8 (C-1'), 63.4 (C-2'), 42.6 (C-3'), 25.1 (C-4'), 21.7 (C-5'), 23.2 (C-6'), 35.5 (C-7'); HRFABMS (M+H)⁺ obsd 535.9553, calcd 535.9548 for C₁₈H₂₅N₃O⁷⁹Br₃, obsd 537.9556, calcd 537.9527 for C₁₈H₂₅⁷⁹Br₂⁸¹BrN₃O; obsd 539.9542, calcd 539.9507 for C₁₈H₂₅⁷⁹Br⁸¹Br₂N₃O; LREIMS (base) 538/540 (M⁺, 54), 458/460 (15), 380 (9.2), 257 (4.0), 100 (100), 83/81 (44); CD (MeOH) $[\theta]_{236\text{nm}} + 24700$, $[\theta]_{232\text{nm}} - 10500$, $[\theta]_{222\text{nm}} - 16200$, $[\theta]_{206\text{nm}} - 22200$, $[\theta]_{202\text{nm}} + 20100$ ^[1]。

【来源】 苔藓虫类 *Amathia alternata*^[1]

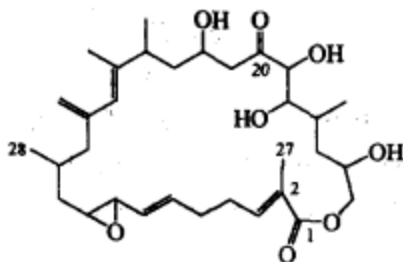
【分析方法】 样品 CHCl₃-MeOH 1:1 提取, 硅胶闪柱层析 (CHCl₃-MeOH), Sephadex LH-20 柱层析 (MeOH), 反复硅胶柱层析 (CHCl₃-MeOH-isopropylamine), RP-18 (isopropanol-MeCN-MeOH-H₂O 3:6:1:10, 0.1% CF₃COOH) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 具有中等强度的抗菌活性, 抗 *Staphylococcus aureus* (NCCLS), *taphylococcus epidermidis*, *Staphylococcus haemolyticus*, *Bacillus subtilis*, *Enterococcus faecalis*, *Enterococcus faecium* 和 *Streptococcus pyogenes* MIC 值 4~32 $\mu\text{g}/\text{mL}$ ^[1]。

【参考文献】 1. Lee N K, et al. J Nat Prod, 1997, 60: 697

D0005 Amphidinolide G

【结构式】



【分子式】 C₃₂H₅₀O₈

【相对分子质量】 563

【理化常数及谱学数据】 无色粉末; $[\alpha]_D^{22} - 60.1^\circ$ (c 0.15, CHCl_3); UV (MeOH) $\lambda_{\max}$: 222nm (11000); IR (film) $\nu_{\max}$ (cm^{-1}): 3400, 1705, 1280, 1260, 1120; FABMS m/z : 563 ($M+1$)⁺; HRFABMS m/z : 668.4377 ($M + \text{DEA} + \text{H}$), calcd for $\text{C}_{36}\text{H}_{62}\text{NO}_{10}$ 668.4374; ^1H NMR (CDCl_3) δ : 6.70 (brt, $J = 6.4\text{Hz}$, H-3), 2.36 (m, H-4a), 2.21 (m, H-4b), 2.34 (m, H-5a), 2.20 (m, H-5b), 5.81 (ddd, $J = 15.4, 8.9, 4.6\text{Hz}$, H-6), 5.18 (dd, $J = 15.4, 8.4\text{Hz}$, H-7), 3.03 (dd, $J = 8.4, 2.2\text{Hz}$, H-8), 2.91 (dt, $J = 8.6, 2.2\text{Hz}$, H-9), 1.46 (m, H-10a), 1.18 (m, H-10b), 1.60 (m, H-11), 2.20 (m, H-12a), 1.86 (m, H-12b), 5.50 (s, H-14), 2.18 (m, H-16), 1.79 (m, H-17a), 1.41 (m, H-17b), 3.94 (m, H-18), 2.68 (dd, $J = 16.3, 8.3\text{Hz}$, H-19a), 2.64 (dd, $J = 16.3, 3.1\text{Hz}$, H-19b), 4.33 (brs, H-21), 3.92 (m, H-22), 2.08 (m, H-23), 1.99 (m, H-24a), 1.32 (m, H-24b), 3.89 (m, H-25), 4.20 (dd, $J = 11.4, 3.3\text{Hz}$, H-26a), 4.11 (dd, $J = 11.4, 3.1\text{Hz}$, H-26b), 1.81 (s, H-27), 0.87 (d, $J = 6.4\text{Hz}$, H-28), 4.97 (s, H-29a), 4.80 (s, H-29b), 1.71 (s, H-30), 1.04 (d, $J = 6.7\text{Hz}$, H-31), 1.09 (d, $J = 6.8\text{Hz}$, H-32); ^{13}C NMR (CDCl_3) δ : 167.7 (s, C-1), 128.3 (s, C-2), 141.1 (d, C-3), 30.9 (t, C-4), 27.0 (t, C-5), 135.7 (d, C-6), 128.8 (d, C-7), 59.8 (d, C-8), 59.3 (d, C-9), 39.8 (t, C-10), 29.3 (d, C-11), 46.8 (t, C-12), 143.9 (s, C-13), 125.8 (d, C-14), 141.6 (s, C-15), 40.7 (d, C-16), 40.5 (t, C-17), 66.6 (d, C-18), 44.1 (t, C-19), 211.5 (s, C-20), 77.8 (d, C-21), 74.3 (d, C-22), 36.0 (d, C-23), 36.9 (t, C-24), 69.0 (d, C-25), 68.7 (t, C-26), 12.8 (q, C-27), 18.3 (q, C-28), 114.9 (t, C-29), 12.7 (q, C-30), 20.6 (q, C-31), 17.7 (q, C-32).

【来源】 腰鞭毛虫 *Aphidinium* sp.

【分析方法】 甲苯-甲醇 (1:3) 提取物的甲苯可溶部分经硅胶柱层析 (CHCl_3 -MeOH 95:5) 分离, 高效液相色谱法 (MeOH- H_2O 88:12) 纯化, 获得活性成分 Amphidinolide G.

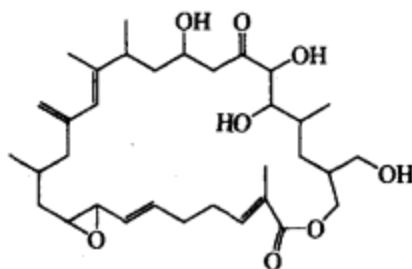
【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 L1210 和 KB 的生长。

【参考文献】 1. Kobayashi J, et al. *J Antibiot*, 1991, 44: 1259

2. Kobayashi J, et al. *J Org Chem*, 1991, 56: 5221

D0006 Amphidinolide H

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{32}\text{H}_{50}\text{O}_8$

【相对分子质量】 563

【理化常数及谱学数据】 无色粉末; $[\alpha]_D^{18} - 32.3^\circ$ (c 0.2, CHCl_3); UV (MeOH) $\lambda_{\max}$: 222nm (10000); IR (film) $\nu_{\max}$ (cm^{-1}): 3400, 1700, 1255, 1130; HRFABMS m/z : 668.4407 ($M + \text{DEA} + \text{H}$), calcd for $\text{C}_{36}\text{H}_{62}\text{NO}_{10}$ 668.4374; ^1H NMR (CDCl_3) δ : 6.81 (brt, $J = 7.2\text{Hz}$, H-3), 2.43 (m, H-4a), 2.24 (m, H-4b), 2.34 (m, H-5a), 2.08 (m, H-5b), 5.88 (ddd, $J = 15.5, 9.0, 4.7\text{Hz}$, H-6), 5.13 (dd, $J = 15.5, 8.2\text{Hz}$, H-7), 3.12 (dd, $J = 8.2, 2.3\text{Hz}$, H-8), 2.94 (dt, $J = 9.7, 2.3\text{Hz}$, H-9), 1.48 (m, H-10a), 1.16 (m, H-10b), 1.56 (m, H-11), 2.12 (dd, $J = 8.2, 4.8\text{Hz}$, H-12a), 1.84 (m, H-12b), 5.57 (s, H-14), 2.23 (m, H-16), 1.79 (m, H-17a), 1.42 (m, $J = 8.8, 16.6\text{Hz}$, H-17b), 3.92 (m, H-18), 2.73 (dd, $J = 15.8, 8.6\text{Hz}$, H-19a), 2.61 (dd, $J = 15.8, 1.6\text{Hz}$, H-19b), 4.30 (m, H-21), 3.72 (m, H-22), 1.85 (m, H-23), 2.02 (m, H-24a), 1.26 (m, H-24b), 5.07 (ddd, $J = 11.4, 5.7, 3.0\text{Hz}$, H-25), 3.73 (m, H-26a), 3.65 (dd, $J = 11.4, 5.7\text{Hz}$, H-26b), 1.82 (s, H-27), 0.84 (d, $J = 6.4\text{Hz}$, H-28), 4.97 (s, H-29a), 4.80 (s, H-29b), 1.71 (s, H-30), 1.05 (d, $J = 6.7\text{Hz}$, H-31), 1.00 (d, $J =$

6.7 Hz, H-32); ^{13}C NMR (CDCl_3) δ : 168.7 (s, C-1), 27.8 (s, C-2), 141.0 (d, C-3), 30.9 (t, C-4), 26.9 (t, C-5), 135.8 (d, C-6), 128.6 (d, C-7), 60.3 (d, C-8), 59.5 (d, C-9), 39.7 (t, C-10), 29.0 (d, C-11), 47.1 (t, C-12), 144.1 (s, C-13), 126.1 (d, C-14), 141.7 (s, C-15), 40.7 (d, C-16), 40.8 (t, C-17), 67.5 (d, C-18), 45.2 (t, C-19), 212.1 (s, C-20), 77.7 (d, C-21), 75.4 (d, C-22), 32.9 (d, C-23), 33.4 (t, C-24), 73.4 (d, C-25), 66.1 (t, C-26), 12.5 (q, C-27), 17.9 (q, C-28), 114.7 (t, C-29), 13.1 (q, C-30), 20.2 (q, C-31), 15.5 (q, C-32)。

【来源】 腰鞭毛虫 *Aphidinium* sp.

【分析方法】 甲苯-甲醇 (1:3) 提取物的甲苯可溶部分经硅胶柱层析 (CHCl_3 -MeOH 95:5) 分离, 高效液相色谱法 (MeOH- H_2O 88:12) 纯化, 获得活性成分 Amphidinolide H。

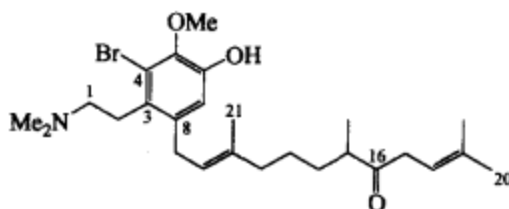
【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 L1210 和 KB 的生长。

【参考文献】 1. Kobayashi J, et al. *J Antibiot*, 1991, 44: 1259

2. Kobayashi J, et al. *J Org Chem*, 1991, 56: 5221

D0007 Aplaminone

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{26}\text{H}_{40}\text{BrNO}_3$

【相对分子质量】 493

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} - 2.9^\circ$ (c 1.18, MeOH); UV (MeOH) λ_{max} : 224 nm (11000), 285 nm (2900); IR (CHCl_3) ν_{max} (cm^{-1}): 3530, 3380 (br), 1705, 1665, 1595; EIMS m/z : 495 [$\text{M}^+ + 2$], 493 [M^+], 414, 58; HREIMS m/z : 493.2174, $\text{C}_{26}\text{H}_{40}\text{BrNO}_3$; ^1H NMR (270 MHz, Acetone- d_6) δ : 2.37 (m, H-1), 2.28 (s, NMe_2), 2.92 (m, H-2), 3.77 (s, OMe), 6.75 (s, H-7), 3.34 (d, $J = 6.9$ Hz, H-9), 5.22 (m, H-10), 2.03 (m, H-12), 1.37 (m, H-13), 1.43 (m, H-13), 1.30 (m, H-14), 1.67 (m, H-14), 2.64 (m, H-15), 3.17 (d, $J = 6.9$ Hz, H-17), 5.29 (m, H-18), 1.70 (brs, H-20), 1.60 (brs, H-21), 1.02 (d, $J = 6.9$ Hz, H-22), 1.70 (brs, H-23); ^{13}C NMR (67.8 MHz, Acetone- d_6) δ : 59.2 (t, C-1), 45.3 (q, NMe_2), 30.5 (t, C-2), 129.1 (s, C-3), 121.1 (s, C-4), 144.3 (s, C-5), 60.3 (q, OMe), 150.0 (s, C-6), 117.6 (d, C-7), 137.8 (s, C-8), 32.6 (t, C-9), 124.0 (d, C-10), 136.7 (s, C-11), 40.2 (t, C-12), 26.1 (t, C-13), 33.2 (t, C-14), 45.9 (d, C-15), 211.9 (s, C-16), 41.4 (t, C-17), 117.5 (d, C-18), 135.0 (s, C-19), 25.7 (q, C-20), 18.1 (q, C-21), 16.8 (q, C-22), 16.3 (C-23)。

【来源】 软体动物 *Aplysia kurodai*

【分析方法】 甲醇粗提物的乙酸乙酯可溶部分用甲醇-水 (8:2) 萃取, 经硅胶柱色谱法及氧化铝柱色谱法, 乙酸乙酯-乙酸乙酯/甲醇 (9:1) 梯度洗脱进行分离, 硅胶柱层析以环己烷-乙酸乙酯-甲醇 (3:3:1) 纯化获得活性成分 Aplaminone。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 HeLa 的生长。

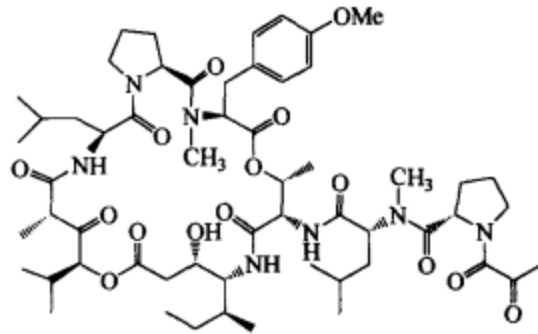
【参考文献】 1. Kigoshi H, et al. *Tetrahedron Lett*, 1990, 31: 4911

2. Kigoshi H, et al. *Tetrahedron Lett*, 1992, 33: 4195

D0008 Aplidine

【异名】 Dehydrididemnin B

【结构式】



【分子式】 $C_{57}H_{87}N_7O_{15}$

【相对分子质量】 1109

【来源】 海鞘 *Trididemnum solidum*

【生物活性与毒性】 广谱抗肿瘤。

【临床与实用价值】 1999 年进入 I 期临床, 用于治疗实体瘤和非霍奇金淋巴瘤。如今在欧洲、加拿大进入 II 期临床, 治疗头颈部、肾脏、结肠及脊髓甲状腺癌^[3~7]。2003 年 7 月由 COMP/EMEA 批准作为孤儿药, 用于治疗急性淋巴细胞白血病^[8]。

【参考文献】 1. Rinehart K L, et al. In Chem Abs, 1991, 115: 248086q; G B Patent 22026, 1990

2. Sakai R, et al. J Med Chem, 1996, 39: 2819

3. Anthony A, et al. Proc Am Soc Clin Oncol, 2000, 19 (Suppl): 734

4. Bowman A, et al. Proc Am Soc Clin Oncol, 2001, 20 (Suppl): 476

5. Armand J P, et al. Proc Am Soc Clin Oncol, 2001, 20: 477

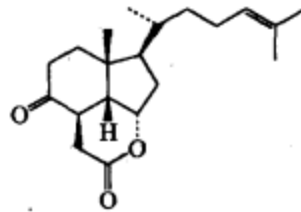
6. Gil E M C, et al. Proc Am Soc Clin Oncol, 2002, 21: 422

7. Maroun J A, et al. Proc Am Soc Clin Oncol, 2001, 20: 2082

8. Anon. Daily Drug News. com (Daily Essentials), 2003, July 18

D0009 Aplykurodinone B

【结构式】



【分子式】 $C_{20}H_{30}O_3$

【相对分子质量】 318

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D^{20} -198.0^\circ (c\ 0.73, CHCl_3)$; IR($CHCl_3$) ν_{max} (cm^{-1}): 1736, 1726; HREIMS m/z : $[M]^+$ 318. 2173 ($C_{20}H_{30}O_3$ require 318. 2195), 300, 259, 205; 1H NMR (500MHz, $CDCl_3$) δ : 2.06 (dd, $J = 17.3, 12.9$ Hz, H-2), 2.90 (dd, $J = 17.3, 2.8$ Hz, H-2), 2.67 (ddd, $J = 13.3, 12.9, 2.8$ Hz, H-3), 2.34 (m, H-5), 2.44 (m, H-5), 2.02 (m, H-6), 1.92 (m, H-6), 1.95 (m, H-8), 4.85 (m, H-9), 2.00 (m, H-10), 2.27 (m, H-10), 1.95 (m, H-11), 1.01 (s, H-12), 1.50 (m, H-13), 0.98 (d, $J = 6.5$ Hz, H-14), 1.16 (m, H-15), 1.45 (m, H-15), 1.90 (m, H-16), 2.03 (m, H-16), 5.06 (bt, H-17), 1.68 (bs, H-19), 1.60 (bs, H-20); ^{13}C NMR (250MHz, $CDCl_3$) δ : 171.2 (s, C-1), 30.0 (t, C-2), 41.9 (d, C-3), 209.8 (s, C-4), 35.5 (t, C-5), 35.1 (t, C-6), 44.5 (s, C-7), 51.7 (d, C-8), 79.3 (d, C-9), 38.5 (t, C-10), 50.9 (d, C-11), 21.3 (q, C-12), 33.9 (d, C-13), 18.4 (q, C-14), 36.1 (t, C-15), 24.7 (t, C-16), 124.3 (d, C-17), 131.5 (s, C-18), 25.6 (q, C-19), 17.7 (q, C-20).

【来源】 地中海软体动物 *A. fasciata*

【分析方法】 丙酮粗提物分配于水中, 乙醚萃取的部分经硅胶柱层析, 石油醚-乙醚 (2:8) 分离得到

活性成分 Aplykurodin B。

【生物活性与毒性】 毒鱼作用。

【参考文献】 1. Ortega M J, et al. J Nat Prod, 1992, 55: 989

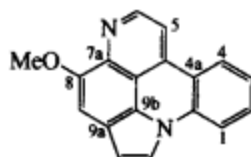
2. Ortega M J, et al. J Nat Prod, 1997, 60: 488

3. Izzo I, et al. Eur J Org Chem, 2000, 439

4. Izzo I, et al. Tetrahedron Lett, 1986, 27: 1153

D0010 Arnoamine B

【结构式】



【分子式】 $C_{18}H_{12}N_2O$

【相对分子质量】 272

【理化常数及谱学数据】 黄色玻璃状物; UV (0.5% TFA in MeOH) λ_{max} (nm) (lg ϵ): 280 (4.15), 398 (3.15), 467 (3.22); (in 50mmol/L KOH in MeOH) λ_{max} (nm) (lg ϵ): 254 (4.14), 309 (3.88), 400 (3.17); IR (film) ν_{max} (cm^{-1}): 3094, 1681, 1200; 1H NMR (500MHz, TFA- d /CDCl $_3$) δ : 8.92 (1H, brs, H-6), 8.74 (1H, d, 7.8, H-4), 8.57 (1H, brs, H-11), 8.47 (1H, brs, H-5), 8.35 (1H, d, 8.1, H-1), 8.16 (1H, s, H-9), 8.15 (1H, t, 7.8, H-2), 7.82 (1H, t, 7.5, H-3), 7.60 (1H, brs, H-10), 4.27 (3H, s, MeO); ^{13}C NMR (125MHz, TFA- d /CDCl $_3$) δ : 116.4 (C-1), 135.9 (C-2), 126.2 (C-3), 127.4 (C-4), 118.1 (C-4a), 142.0 (C-4b), 110.6 (C-5), 137.8 (C-6), 126.6 (C-7a), 113.5 (C-7b), 143.8 (C-8), 110.4 (C-9), 119.5 (C-9a), 119.3 (C-9b), 110.7 (C-10), 121.3 (C-11), 136.0 (C-11b), 57.0 (MeO); EIMS m/z (rel int) 272 (M^+ , 83), 271 (100), 257 (19), 242 (66), 229 (52); HREIMS calcd for $C_{18}H_{12}N_2O$ 272.0947, found 272.0946.

【来源】 海鞘 *Cystodytes* sp. [1]

【分析方法】 样品甲醇提取, 分别用 hexane、CCl $_4$ 、CHCl $_3$ 萃取, CCl $_4$ 萃取部分硅胶柱层析 (hexane-EtOAc, EtOAc-MeOH), 苯基键合相硅胶柱层析 (MeOH-H $_2$ O) 得到纯化合物 [1]。

【生物活性与毒性】 抗 MCF-7、A-549 和 HT-29 细胞的 GI_{50} 值分别为 5.0 $\mu g/mL$ 、2.0 $\mu g/mL$ 和 3.0 $\mu g/mL$ [1]。

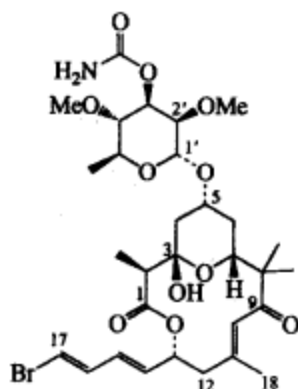
【参考文献】 1. Plubrukarn A, et al. J Org Chem, 1998, 63: 1657

2. Delfourne E, et al. J Org Chem, 2000, 65: 5476

3. Delfourne E, et al. Med Res Rev, 2003, 23: 234

D0011 Auriside B

【结构式】



【分子式】 $C_{30}H_{44}BrNO_{11}$

【相对分子质量】 674

【理化常数及谱学数据】 无色无定形固体; $[\alpha]_D^{25} - 30^\circ$ (c 0.09, MeOH); UV (MeCN) $\lambda_{\max} (\epsilon)$: 245 (35000) nm; IR (CCl₄) $\nu_{\max}$: (cm^{-1}) 3560, 3510, 3460, 3440, 1740, 1715, 1680, 1620, 1580; ¹H NMR (500MHz, C₆D₆) δ : 6.40 (1H, dd, 13.6, 11.0, H-16), 6.35 (1H, s, H-10), 5.91 (1H, d, 13.6, H-17), 5.64 (1H, dd, 15.4, 11.0, H-15), 5.57 (1H, m, H-13), 5.54 (1H, dd, 9.5, 3.3, H-3'), 5.20 (1H, dd, 15.4, 6.6, H-14), 5.04 (1H, d, 2.0, H-1'), 4.92 (1H, d, 2.6, OH), 4.25 (1H, m, H-5), 3.99 (1H, dq, 6.2, 9.5, H-5'), 3.93 (1H, dd, 2.0, 11.7, H-7), 3.82 (1H, dd, 2.0, 3.3, H-2'), 3.66 (2H, brs, NH₂), 3.51 (1H, t, 9.5, H-4'), 3.36 (3H, s, MeO-4'), 3.23 (3H, s, MeO-2'), 2.49 (1H, q, 7.3, H-2), 0.89 (3H, d, 6.9, H-28), 2.29 (3H, s, H-21), 1.98 (1H, t, 12.3, H-12), 1.81 (2H, m, H-6, 12), 1.37 (3H, d, 6.2, H-6'), 1.24 (1H, q, 11.7, H-6), 1.16 (3H, s, H-20), 1.06 (3H, s, H-19), 0.97 (3H, d, 7.3, H-18), 0.96 (1H, td, 11.7, 2.6, H-4); ¹³C NMR (125MHz, CDCl₃) δ : 176.5 (C-1), 48.1 (C-2), 98.5 (C-3), 39.6 (C-4), 71.4 (C-5), 31.4 (C-6), 74.7 (C-7), 49.4 (C-8), 203.5 (C-9), 126.4 (C-10), 147.5 (C-11), 47.5 (C-12), 71.3 (C-13), 131.7 (C-14), 129.3 (C-15), 136.5 (C-16), 110.8 (C-17), 12.5 (C-18), 21.6 (C-19), 18.7 (C-20), 19.4 (C-21), 96.4 (C-1'), 80.0 (C-2'), 75.0 (C-3'), 81.4 (C-4'), 68.6 (C-5'), 18.1 (C-6'), 58.7 (MeO-2'), 156.2 (CONH₂), 60.4 (MeO-4'); FABMS m/z (relative intensity) 698/696 (MNa⁺, 100; 93), 413 (29); HRFABMS calcd for C₃₀H₄₄⁷⁹BrNNaO₁₁ m/z 696.1995 (MNa⁺), found 696.2001^[1].

【来源】 海兔 *Dolabella auricularia*^[1]

【分析方法】 样品 MeOH 提取, 90% MeOH 水萃取部分硅胶柱层析 (toluene-EtOAc), ODS MPLC (MeOH-H₂O), HPLC (MeCN-H₂O 7:3) 得到纯化合物^[1].

【生物活性与毒性】 细胞毒活性, 对 HeLa S3 IC₅₀ 1.2 $\mu\text{g/mL}$ ^[1].

【参考文献】 1. Sone H, et al. J Org Chem, 1996, 61: 8956

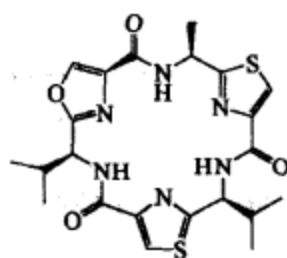
2. Suenaga K, et al. Tennen Yuki Kagobutsu Toronkai Koen Yosh, 1996, 38: 55

3. Sone H, et al. Chem Lett, 1998, 85

4. Trost B M, et al. Angew. Chem Int Ed Eng, 2002, 41: 841

D0012 Bistratamides C

【结构式】



【分子式】 C₂₂H₂₆N₆O₄S₂

【相对分子质量】 503

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D^{25} - 65^\circ$ (c 0.42, CHCl₃); HRFAB⁺ (M + H)⁺ 503.153; IR (film) $\nu_{\max}$ (cm^{-1}): 3392, 2968, 1676, 1538, 738; UV $\lambda_{\max}$ (CH₂Cl₂): 234 nm (17000); ¹H NMR (500MHz, CDCl₃) δ : 8.60 (d, J = 6.8, N₁H), 5.46 (dq, J = 6.8, 6.8, H-1), 1.73 (d, J = 6.8, H-2), 8.13 (s, H-5), 8.35 (d, J = 9.2, N₃H), 5.38 (dd, J = 6.8, 9.2, H-7), 2.30 (m, H-8), 1.11 (d, J = 6.8, H-9), 1.01 (d, J = 6.8, H-10), 8.07 (s, H-13), 8.44 (d, J = 8.8, N₅H), 5.28 (dd, J = 4.3, 8.8, H-15), 2.36 (m, H-16), 1.04 (d, J = 6.6, H-17), 1.01 (d, J = 6.9, H-18), 8.20 (s, H-21); ¹³C NMR (500MHz, CDCl₃) δ : 47.5 (d, C-1), 24.8 (q, C-2), 171.2 (s, C-3), 148.5 (s, C-4), 124.3 (d, C-5), 159.6 (s, C-6), 55.8 (d, C-7), 35.3 (d, C-8), 18.8 (q, C-9), 18.9 (q, C-10), 168.3 (s, C-11), 149.5 (s, C-12), 123.2 (d, C-13), 160.1 (s, C-14), 52.8 (d, C-15), 33.6 (d, C-16), 18.6 (q, C-17), 17.9 (d, C-18), 163.7 (s, C-19), 135.4 (s, C-20), 141.4 (d, C-21), 159.1 (s, C-22).

【来源】 海鞘 *Lissoclinum bistratum*

【分析方法】 甲醇粗提物分配于环己烷-氯仿中，氯仿可溶部分经硅胶柱色谱法 (CHCl_3 -MeOH 100%~60%)，正相高效液相色谱法 (25% acetone-hexane) 分离，纯化获得活性成分 Bistratamides C。

【生物活性与毒性】 神经抑制作用。

【参考文献】 1. Foster M P, et al. *J Org Chem*, 1992, 57: 6671

2. Degnan B M, et al. *J Med Chem*, 1989, 32: 1354

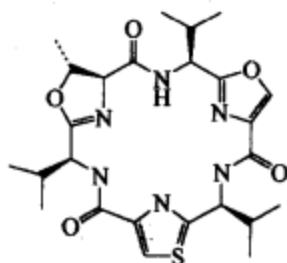
3. Downing S V, et al. *J Org Chem*, 1999, 64: 826

4. Perez L J, et al. *J Nat Prod*, 2003, 66: 247

5. You S, et al. *Chem Eur J*, 2004, 10: 71

D0013 Bistratamide D

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{25}\text{H}_{34}\text{N}_6\text{O}_5\text{S}$

【相对分子质量】 531

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D^{25} - 31^\circ$ (c 0.33, CHCl_3); HRFAB⁺ ($\text{M} + \text{H}$)⁺ 531.239; IR (film) ν_{max} (cm^{-1}): 3392, 2964, 1683, 1520, 753; UV λ_{max} (CH_2Cl_2): 232nm (13000); ¹H NMR (500MHz, CDCl_3) δ : 7.89 (d, $J = 7.6\text{Hz}$, N_1H), 4.96 (dd, $J = 7.6, 5.2\text{Hz}$, H-1), 2.22 (m, H-2), 0.96 (d, $J = 6.89\text{Hz}$, H-3), 0.89 (d, $J = 6.88\text{Hz}$, H-4), 8.16 (s, H-7), 8.62 (d, $J = 7.4\text{Hz}$, N_3H), 5.27 (dd, $J = 7.4, 4.4\text{Hz}$, H-9), 2.38 (m, H-10), 1.03 (d, $J = 6.9\text{Hz}$, H-11), 0.93 (d, $J = 6.9\text{Hz}$, H-12), 8.10 (s, H-15), 8.03 (d, $J = 9.9\text{Hz}$, N_5H), 4.99 (dd, $J = 9.9, 2.1, 2.4\text{Hz}$, H-17), 2.42 (m, H-18), 1.06 (d, $J = 6.9\text{Hz}$, H-19), 0.95 (d, $J = 6.9\text{Hz}$, H-20), 4.10 (dd, $J = 9.0, 2.1\text{Hz}$, H-22), 4.77 (dq, $J = 9.0, 6.3\text{Hz}$, H-23), 1.58 (d, $J = 6.3\text{Hz}$, H-24); ¹³C NMR (500MHz, CDCl_3) δ : 53.1 (d, C-1), 33.2 (d, C-2), 18.2 (q, C-3), 17.6 (q, C-4), 163.4 (s, C-5), 135.8 (s, C-6), 140.9 (d, C-7), 159.2 (s, C-8), 56.4 (d, C-9), 34.5 (d, C-10), 18.2 (q, C-11), 17.8 (q, C-12), 167.6 (s, C-13), 148.6 (s, C-14), 123.6 (d, C-15), 160.0 (s, C-16), 51.9 (d, C-17), 31.2 (d, C-18), 19.0 (q, C-19), 16.3 (q, C-20), 169.4 (s, C-21), 74.1 (d, C-22), 82.5 (d, C-23), 21.8 (q, C-24), 170.5 (s, C-25).

【来源】 海鞘 *Lissoclinum bistratum*

【分析方法】 甲醇粗提物分配于环己烷-氯仿中，氯仿可溶部分经硅胶柱色谱法 (CHCl_3 -MeOH 100%~60%)，正相高效液相色谱法 (25% acetone-hexane) 分离，纯化获得活性成分 Bistratamides D。

【生物活性与毒性】 神经抑制作用。

【参考文献】 1. Foster M P, et al. *J Org Chem*, 1992, 57: 6671

2. Degnan B M, et al. *J Med Chem*, 1989, 32: 1354

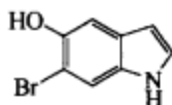
3. Downing S V, et al. *J Org Chem*, 1999, 64: 826

4. Perez L J, et al. *J Nat Prod*, 2003, 66: 247

5. You S, et al. *Chem Eur J*, 2004, 10: 71

D0014 6-Bromo-5-hydroxyindole

【结构式】



【分子式】 C_8H_5BrNO

【相对分子质量】 212

【理化常数及谱学数据】 无色无定形固体; mp $190^{\circ}C$; UV(EtOH) λ_{max} (nm) (ϵ) 312(4480), 296(6300), 282(7800), 218(24300); IR ($CHCl_3$) ν_{max} (cm^{-1}): 5570, 3520, 1580, 1460, 1355, 1220, 1150, 990; 1H NMR (400MHz, $CDCl_3$) δ : 7.48(1H, s, H-4), 7.24(1H, s, H-7), 7.15(1H, t, 2.9, H-2), 6.42(1H, d, 2.9, H-3), 5.49(1H, s, OH); ^{13}C NMR(100MHz, $CDCl_3$) δ : 126.0(C-2), 102.4(C-3), 128.8(C-3a), 105.7(C-4), 145.9(C-5), 106.3(C-6), 113.8(C-7), 131.5(C-7a); EIMS m/z 213(99), 211(100); HREIMS m/z 212.9623 [M^+] (calcd for $C_8H_5^{81}BrON$, 212.9612), 210.9633 [M^+] (calcd for $C_8H_5^{79}BrON$, 210.9632)。

【来源】 腹足动物 *Drupella fragum*^[1]

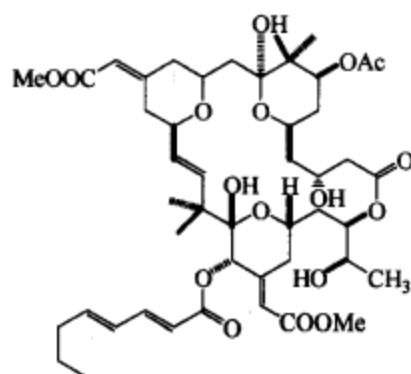
【分析方法】 样品甲醇提取, hexane、 CH_2Cl_2 、BuOH 萃取, CH_2Cl_2 萃得部分 Sephadex LH-20 柱层析 (MeOH), 硅胶柱层析 (Me_2CO -Hexane 3:7), HPLC (MeOH- H_2O 3:7) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 抗氧化活性, POV 方法 1 评价 0.036 POV_{sa}/POV_{cb} (mmol/kg)^[1]。

【参考文献】 1. Ochi M, et al. J Nat Prod, 1998, 61: 1043

D0015 Bryostatin 1

【结构式】



【分子式】 $C_{47}H_{68}O_{17}$

【相对分子质量】 904

【来源】 苔藓虫 *Bugula neritina*

【生物活性与毒性】 能与蛋白激酶 C (PKC) 同工酶结合, 但是不具有刺激肿瘤细胞生长作用^[1~3]。研究显示, 该类化合物的结合位点为人 PKC- α 的半胱氨酸富集区 2 (CRD2)。由于这种结合极度降低了多数肿瘤细胞的调控能力, 导致肿瘤细胞生长抑制、变异甚至凋亡^[4]。

【临床与实用价值】 I 期及 II 期临床显示, 如果与其他生物毒素 (长春花碱或核苷类化合物) 联合使用具有较好效果^[5]。

【参考文献】 1. Mutter R, et al. Bioorg Med Chem, 2000, 8: 1841

2. Hale K J, et al. Nat Prod Rep, 2002, 19: 413

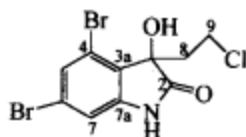
3. Pettit G R, et al. In Baguley B C, Kerr D J. Anticancer Drug Development. San Diego CA: Academic Press, 2002: 203

4. Hale K J, et al. Org Lett, 2003, 5: 499

5. Clamp A, et al. Anti-Cancer Drugs, 2002, 13: 673

D0016 Convolutamydine B

【结构式】



【分子式】 $C_{10}H_8NO_2ClBr_2$

【相对分子质量】 367/369/371/373

【理化常数及谱学数据】 无色无定形固体; mp 225~227°C; $[\alpha] + 18.1^\circ (c\ 0.42, \text{MeOH})$; EIMS m/z 349/351/353/355 (3 : 7 : 5 : 1) $[M - H_2O]^+$; CD (MeOH): $\lambda_{\text{ext}}\ 225.0 (\Delta\epsilon - 2.79)$; UV (MeOH) λ_{max} (nm): 220, 225, 262.5, 265.5, 287, 294; IR (CHCl₃) ν_{max} (cm⁻¹): 3300~3400, 1723, 1615; ¹H NMR (500MHz, CDCl₃ : CD₃OD 10 : 1) δ : 2.69 (2H, m, H-8), 3.40 (2H, m, H-9), 7.00 (H, brd, $J = 1.5\text{Hz}$, H-7), 7.34 (H, brd, $J = 1.5\text{Hz}$, H-5); ¹³C NMR (125MHz, CDCl₃ : CD₃OD 10 : 1): 37.8 (C-8), 38.8 (C-9), 76.7 (C-3), 113.1 (C-7), 120.2 (C-6), 123.9 (C-4), 127.9 (C-3a), 129.1 (C-5), 144.5 (C-7a), 179.1 (C-2)。

【来源】 苔藓虫 *Amathia convoluta*

【分析方法】 苔藓虫的乙醇提取物在甲醇和正己烷间分配, 甲醇层继续用乙酸乙酯萃取, 乙酸乙酯层逐步上硅胶柱 (正己烷-丙酮 1/1), Sephadex LH-20 (甲醇-二氯甲烷-正己烷 10/10/1), ODS (75% 甲醇-水) 和短 SiO₂ 柱 (正己烷-丙酮 1/1) 分离得到纯品。结构通过 (HR) MS、IR、UV、CD 和 NMR (¹H NMR、¹³C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 在 12.5~25 $\mu\text{g/mL}$ 浓度内能导致 HL-60 细胞的分化。

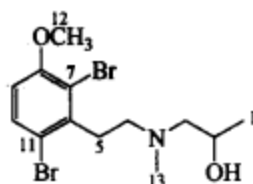
【参考文献】 1. Zhang H P et al. Tetrahedron, 1995, 51 (19): 5523

2. Kamano Y, et al. Tetrahedron Lett, 1995, 36: 2783

3. Garden S J, et al. Tetrahedron Lett, 1997, 38: 1501

D0017 Convolutamine B

【结构式】



【分子式】 $C_{13}H_{19}O_2Br_2N$

【相对分子质量】 379

【理化常数及谱学数据】 HREIMS m/z 378.9784 $[C_{13}H_{19}O_2^{79}Br_2N]^+$; EIMS m/z 334/336/338 (1 : 2 : 1) $[C_{11}H_{14}OBr_2N]^+$, 290/292/294 (1 : 2 : 1), 275/277/279 (1 : 2 : 1), 103, 89; UV (MeOH) λ_{max} : 211.5nm; IR (CH₃Cl) ν_{max} (cm⁻¹): 3420, 2970, 2910, 1570, 1460, 1420, 1070, 936; ¹H NMR (400MHz, CDCl₃) δ : 1.13 (3H, d, $J = 6.3\text{Hz}$, H-1), 2.35 (H, dd, $J = 12.2, 10.7\text{Hz}$, H-3a), 2.43 (3H, s, H-13), 2.44 (H, dd, $J = 12.2, 2.9\text{Hz}$, H-3b), 2.59 (H, ddd, $J = 12.7, 11.2, 5.4\text{Hz}$, H-4a), 2.72 (H, ddd, H-4b), 3.16, 2.59 (2H, ddd, $J = 12.7, 11.2, 5.4\text{Hz}$, H-5), 3.79 (H, dqd, $J = 10.3, 6.3, 2.9\text{Hz}$, H-2), 3.86 (3H, s, H-12), 6.65 (H, d, $J = 8.8\text{Hz}$, H-9), 7.45 (H, d, $J = 8.8\text{Hz}$, H-10); ¹³C NMR (100MHz, CDCl₃): 19.6 (C-1), 63.0 (C-2), 64.7 (C-3), 55.1 (C-4), 34.4 (C-5), 139.8 (C-6), 115.1 (C-7), 155.6 (C-8), 110.9 (C-9), 131.8 (C-10), 110.9 (C-11), 56.5 (C-12), 41.9 (C-13)。

【来源】 佛罗里达苔藓虫 *Amathia convoluta*

【分析方法】 苔藓虫的乙酸乙酯提取物经过反复的硅胶柱层析, ODS, Sephadex LH-20 得到纯品。结构通过 (HR) MS、IR、UV 和 NMR (¹H NMR、¹³C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

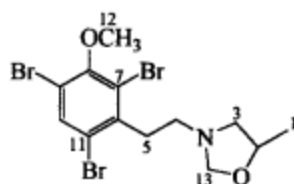
【生物活性与毒性】 对鼠科 P388 淋巴白血病细胞生长的抑制作用, $IC_{50} = 4.8\mu\text{g/mL}$ 。

【参考文献】 1. Zhang H P et al. Chem Lett, 1994, 2271

2. Kamano Y, et al. Collect Czech Chem Commun, 1999, 64: 1147
3. Hashima H, et al. Bioorg Med Chem, 2000, 8: 1757
4. Narkowicz C K, et al. J Nat Prod, 2002, 65: 938

D0018 Convolutamine D

【结构式】



【分子式】 $C_{13}H_{16}O_2Br_3N$

【相对分子质量】 454/456/458/460

【理化常数及谱学数据】 EIMS m/z 454/456/458/460(1 : 3 : 3 : 1)[M]⁺; ¹H NMR(400MHz, CDCl₃) δ : 1.28(3H, d, J = 6.4Hz, H-1), 2.55(H, dd, J = 10.8, 7.8Hz, H-3a), 3.24(H, dd, J = 10.8, 6.4Hz, H-3b), 2.73(2H, m, H-4), 3.19(2H, m, H-5), 4.15(H, dqd, J = 7.8, 6.4Hz, H-2), 3.86(3H, s, H-12), 4.44, 4.41(2H, d, J = 4.9Hz, H-13), 7.74(H, s, H-10); ¹³C NMR(100MHz, CDCl₃): 20.0(C-1), 71.7(C-2), 59.5(C-3), 52.6(C-4), 37.3(C-5), 139.3(C-6), 121.8(C-7), 154.0(C-8), 116.1(C-9), 135.4(C-10), 119.8(C-11), 60.5(C-12), 86.3(C-13)。

【来源】 佛罗里达苔藓虫 *Amathia convoluta*

【分析方法】 苔藓虫的乙酸乙酯提取物经过反复的硅胶柱层析, ODS, Sephadex LH-20 得到纯品。结构通过 (HR) MS、IR、UV 和 NMR (¹H NMR、¹³C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 对鼠科 P388 淋巴白血病细胞生长的抑制作用, IC₅₀ = 8.6 μ g/mL。

【参考文献】 1. Zhang H P, et al. Chem Lett, 1994, 2271

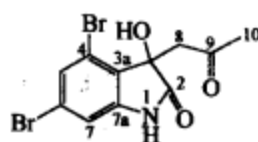
2. Kamano Y, et al. Collect Czech Chem Commun, 1999, 64: 1147

3. Hashima H, et al. Bioorg Med Chem, 2000, 8: 1757

4. Narkowicz C K, et al. J Nat Prod, 2002, 65: 938

D0019 Convolutamydine A

【结构式】



【分子式】 $C_{11}H_9NO_3Br_2$

【相对分子质量】 361/363/365

【理化常数及谱学数据】 白色无定形固体; mp 190~195°C; $[\alpha] + 27.4^\circ$ (c 0.06, MeOH); CD λ_{ext} (MeOH); 228.20nm ($\Delta\epsilon$ - 2.86); HREIMS m/z 360.8956 [$C_{11}H_9NO_3^{79}Br_2$]⁺; EIMS m/z (rel. int.) 361/363/365(1/2/1)[M]⁺; IR(CH₃Cl) ν_{max} cm⁻¹: 3330, 1740, 1716; ¹H NMR(CDCl₃) δ : 10.6(H, s, 1-NH), 6.19(H, s, 3-OH), 7.32(H, brd, J = 1.5Hz, H-5), 6.93(H, brd, J = 1.5Hz, H-7), 3.22, 3.68(2H, d, J = 17.7Hz, H-8), 2.09(3H, s, H-10); ¹³C NMR(CDCl₃): 177.7(C-2), 75.0(C-3), 126.7(C-3a), 124.2(C-4), 129.2(C-5), 119.6(C-6), 113.2(C-7), 144.2(C-7a), 47.6(C-8), 206.0(C-9), 30.6(C-10)。

【来源】 佛罗里达苔藓虫 *Amathia convoluta*

【分析方法】 海绵的乙醇提取物分别用正己烷和乙酸乙酯萃取, 乙酸乙酯层经过反复的硅胶层析和 Sephadex LH-20 后, 由反相 HPLC (75% 甲醇-水) 和硅胶柱 (氯仿-甲醇和正己烷-丙酮系统) 进一步纯化得到。结构通过 (HR) MS、IR、CD 和 NMR (¹H NMR、¹³C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

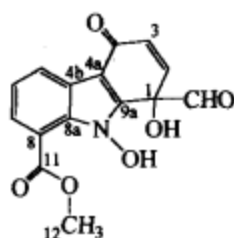
【生物活性与毒性】 在 0.1~25 $\mu\text{g/mL}$ 的浓度下能诱导 HL-60 细胞特性的改变。它能导致 HL-60 细胞变异的特性已得到证实。

【参考文献】 1. Kamano Y, et al. Tetrahedron Lett, 1995, 36 (16): 2783

2. Zhang H P, et al. Tetrahedron, 1995, 51: 5523
3. Garden S J, et al. Tetrahedron Lett, 1997, 38: 1501
4. Miah S, et al. J Chem Soc Perkin Trans 1, 1997, 2405
5. Kamano Y, et al. Collect Czech Chem Commun, 1999, 64: 1147
6. Jnaneshwara G K, et al. Synth. Commun, 1999, 29: 3627
7. Jnaneshwar G K, et al. J Chem Res Synop, 1999, 632
8. Lounasmaa M, et al. Nat Prod Rep, 2000, 17: 175
9. Hibino S, et al. Nat Prod Rep, 2001, 18: 66

D0020 Coproverdine

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{15}\text{H}_{11}\text{NO}_6$

【相对分子质量】 301

【理化常数及谱学数据】 黄色油状物; $[\alpha]_D^{20} - 8^\circ$ (c 0.36, EtOH); IR(CHCl₃) ν_{max} (cm^{-1}): 3690 (sharp), 3500 (br), 1665, 1603, 1556, 1290; UV(EtOH) λ_{max} (nm): 208 (20000), 270 (6700), 302 (4800), 382 (16000); ^1H NMR(CD_3OD , 300MHz): 7.01(d, $J = 10.2$, H-2), 6.25(d, $J = 10.2$, H-3), 7.39(dd, $J = 1.5, 8.0$, H-5), 7.28(dd, $J = 8.0, 8.0$, H-6), 7.84(dd, $J = 1.5, 8.0$, H-7), 10.13(s, H-10), 4.06(s, H-12), 8.50(bs, 1-OH), 8.50(bs, 9-OH); ^{13}C NMR(CD_3OD , 75MHz): 90.5(C-1), 143.6(C-2), 128.5(C-3), 186.6(C-4), 105.7(C-4a), 127.7(C-4b), 125.1(C-5), 126.4(C-6), 125.9(C-7), 118.3(C-8), 144.9(C-8a), 157.2(C-9a), 192.7(C-10), 168.2(C-11), 53.4(C-12); ESIMS(eV) (30V) m/z 300 $[\text{MH}]^-$, 272 $[(\text{MH}) - \text{CO}]^-$; HRFABMS m/z 302.0673($[\text{MH}]^+$, calculated for $\text{C}_{15}\text{H}_{12}\text{NO}_6$, 302.0665).

【来源】 海鞘类动物

【分析方法】 原料经 MeOH/DCM (3:1, 700mL) 提取, 脱盐后经过 Sephadex LH-20 柱层析, MeOH 洗脱, 活性部位以 RPHPLC 纯化, $\text{CH}_3\text{CN}/\text{H}_2\text{O}$ (30%~75%) 梯度洗脱, 得到化合物 Coproverdine。

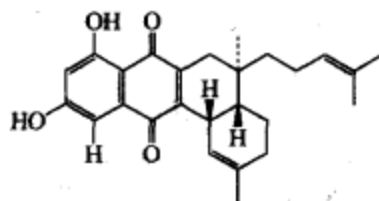
【生物活性与毒性】 体外试验显示, 对大鼠和人的肿瘤细胞系具有较强的细胞毒作用, 对 P388、A549、HT29、MEL28、DU145 的 IC_{50} 值 ($\mu\text{mol/L}$) 分别为 1.6, 0.3, 0.3, 0.3, 0.3。

【参考文献】 1. Urban S, et al. J Nat Prod, 2002, 65: 1371

2. Munro M H G, et al. PCT Int Appl, 2002, CA 137: 28284

D0021 Debromomarinone

【结构式】



【分子式】 $C_{25}H_{28}O_4$

【相对分子质量】 408

【理化常数及谱学数据】 红色固体; UV-Vis (MeOH) $\lambda_{\max}$ (nm): 488 (2280), 388 (2600), 299 (9200), 269 (10400), 226 (16600); IR (film) $\nu_{\max}$ (cm^{-1}): 3417 (br), 2924, 1631, 1589, 1544, 1469, 1380, 1228; HREIMS m/z : 408.1916, calcd. for $C_{25}H_{28}O_4$ 408.1924; 1H NMR (500MHz, CD_3OD) δ : 6.10 (d, $J = 2.5$ Hz, H-5), 6.83 (d, $J = 2.5$ Hz, H-7), 3.39 (bt, $J = 5.0$ Hz, H-11), 6.03 (bd, $J = 5.0$ Hz, H-12), 2.00 (m, H-14), 1.31 (dt, $J = 6.0, 12.0, 12.0$ Hz, H-15), 2.00 (m, H-15), 1.88 (ddd, $J = 3.0, 6.0, 12.0$ Hz, H-16), 1.63 (m, H-18), 2.00 (m, H-19), 5.08 (bt, $J = 7.0$ Hz, H-20), 1.60 (bs, H-22), 1.55 (bs, H-23), 1.49 (s, H-24), 1.66 (bs); 1H NMR (50MHz, CD_3OD) δ : 155.1 (s, C-1), 180.9 (s, C-2), 105.6 (s, C-3), 177.6 (s, C-4), 107.9 (d, C-5), 167.2 (s, C-6), 115.6 (d, C-7), 135.7 (s, C-8), 186.4 (s, C-9), 123.5 (s, C-10), 32.0 (d, C-11), 121.7 (d, C-12), 136.5 (s, C-13), 30.7 (t, C-14), 21.4 (t, C-15), 39.1 (d, C-16), 83.5 (s, C-17), 37.5 (t, C-18), 23.2 (t, C-19), 124.8 (d, C-20), 132.9 (s, C-21), 25.8 (q, C-22), 17.6 (q, C-23), 22.7 (q, C-24), 23.8 (q, C-25).

【来源】 由 CNB-632 分离得到的一种海洋微生物

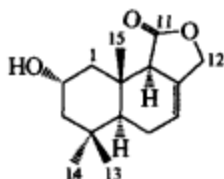
【分析方法】 微生物 (culture # CNB-632) 乙酸乙酯提取液, 减压浓缩后, 经硅胶柱层析分离, 其中 30% 乙酸乙酯/isooctane 洗脱部分进一步用正相高效液相色谱法和反相制备薄层色谱法 (70% MeOH/ H_2O) 纯化获得活性成分 Debromomarinone.

【生物活性与毒性】 抗菌。

【参考文献】 1. Fucina N. Tetrahedron Lett, 1992, 33: 7663

D0022 Dendocarin B

【结构式】



【分子式】 $C_{15}H_{22}O_3$

【相对分子质量】 250

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} - 88^\circ$ (c 0.03, $CHCl_3$); UV (OH) $\lambda_{\max}$: 220 nm; IR (KBr) $\nu_{\max}$ (cm^{-1}): 3460, 1650; 1H NMR ($CDCl_3$) δ : 0.97 and 2.90 (each 1H, m; H2-1), 3.57 (1H, m; H-2), 1.04 and 1.62 (each 1H, m; H2-3), 0.82 (1H, dd, $J = 11.8$ and 5.4 Hz; H-5), 1.50 and 1.72 (each 1H, m; H2-6), 5.02 (1H, brs; H-7), 2.20 (1H, brs; H-9), 4.03 (2H, m; H2-12), 0.68 (3H, s; H3-13), 0.66 (3H, s; H3-14), 0.77 (3H, s; H3-15); ^{13}C NMR ($CDCl_3$) δ : 47.8 (C-1), 63.6 (C-2), 51.1 (C-3), 34.2 (C-4), 48.7 (C-5), 23.2 (C-6), 120.3 (C-7), 149.9 (C-8), 53.3 (C-9), 35.5 (C-10), 99.6 (C-11), 69.0 (C-12), 32.9 (C-13), 22.2 (C-14), 14.7 (C-15); FABMS m/z 501 ($2M + H$)⁺, 251 ($M + H$)⁺; HRFABMS m/z 251.1627 [calcd for $C_{15}H_{23}O_3$, ($M + H$) 251.1647].

【来源】 裸鳃亚目动物

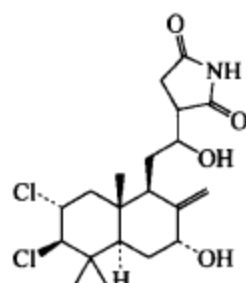
【分析方法】 海蛞蝓的乙醇提取物悬浮于水中, 乙酸乙酯萃取。乙酸乙酯层进行硅胶柱层析, 以 EtOAc/hexane [(1:6) ~ (3:1)] 洗脱, 各部分依次经 HPLC (Develosil ODSUG5, Nomura Chemical, 10mm × 250mm) 分离纯化得到化合物 Dendocarin B.

【生物活性与毒性】 细胞毒活性, P388/ADR (-) IC_{50} 值为 $7 \mu g/mL$ 。

【参考文献】 1. Sakio Y, et al. J. Nat. Prod., 2001, 64: 726

D0023 Dichlorolissoclimide

【结构式】



【分子式】 $C_{20}H_{29}Cl_2NO_4$

【相对分子质量】 418

【理化常数及谱学数据】 1H NMR(DMSO- d_6) δ : 2.23(dd, $J = 12.8, 4.3$ Hz, H-1), 1.57(dd, $J = 12.8, 11.7$ Hz, H-1), 4.45(dt, $J = 11.7, 4.3$ Hz, H-2), 3.91(d, $J = 11.7$ Hz, H-3), 1.49(dd, $J = 12.1, 1.8$ Hz, H-5), 1.92(bs, H-6), 1.21(q, $J = 12.1$ Hz, H-6), 3.80(bs, H-7), 1.55(dd, $J = 10.1, 3.5$ Hz, H-9), 1.67(dd, $J = 13.2, 3.5$ Hz, H-11), 1.37(dd, $J = 13.2, 10.1$ Hz, H-11), 3.99(bs, H-12), 2.82(bs, H-13), 2.55(dd, $J = 17.6, 4.9$ Hz, H-14), 2.47(dd, $J = 17.6, 9.0$ Hz, H-14), 5.24(d, $J = 1.65$ Hz, H-17), 4.82(d, $J = 1.65$ Hz, H-17), 1.09(s, H-18), 0.86(s, H-19), 0.66(s, H-20), 11.57(bs, NH), 5.02(d, $J = 4.90$ Hz, OH), 4.94(d, $J = 4.85$ Hz); ^{13}C NMR(DMSO- d_6) δ : 52.1(C-1), 65.7(C-2), 81.3(C-3), 45.4(C-4), 54.9(C-5), 37.9(C-6), 75.4(C-7), 153.7(C-8), 52.8(C-9), 44.0(C-10), 32.8(C-11), 70.6(C-12), 49.0(C-13), 33.6(C-14), 184.8(C-15), 182.6(C-16), 108.6(C-17), 33.4(C-18), 21.5(C-19), 18.2(C-20)。

【来源】 海鞘 *Lissoclinum voetzkowi*

【分析方法】 采用活性跟踪的方法, 经液-液分配法和高效液相色谱法分离, 纯化获得活性成分 Dichlorolissoclimide。

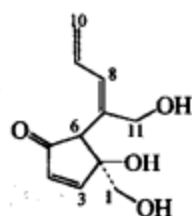
【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 KB 和 P388 的生长。

【参考文献】 1. Malochet-Grivois C, et al. Tetrahedron Lett, 1991, 32: 6701

2. Ueda K, et al. Tennen Yuki Kagobutsu Toronkai Koen Yosh, 2000, 42: 379

D0024 Didemnenone C

【结构式】



【分子式】 $C_{11}H_{14}O_4$

【相对分子质量】 210

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha] -25.3^\circ$ (c 0.08, MeOH); HREIMS m/z 210.0893 $[M]^+$; IR(CHCl₃) ν_{max} (cm⁻¹): 3600~3000, 1704; UV(MeOH) λ_{max} : 231nm; 1H NMR(CD₃OD) δ : 3.59(H, d, $J = 10.5$ Hz), 3.69(H, d, $J = 10.5$ Hz), 3.88(H, s), 3.96(H, d, $J = 12.6$ Hz), 4.24(H, d, $J = 12.6$ Hz), 5.21(H, d, $J = 10.6$ Hz), 5.31(H, d, $J = 16.5$ Hz), 7.51(H, d, $J = 6$ Hz); ^{13}C NMR(CD₃OD): 53.0, 65.3, 66.6, 82.2, 119.8, 133.5, 133.7, 135.0, 136.1, 166.4, 210.0。

【来源】 被囊动物 *Didemnum voeltzkowi*

【分析方法】 动物的甲醇提取物经过萃取和 Sephadex LH-20 (氯仿-甲醇, 1:1) 分离得到。结构通过 (HR) MS、IR、UV 和 NMR (1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】 对 L1210 鼠科白血病细胞的细胞毒, $IC_{50} = 5.6 \mu g/mL$ 。

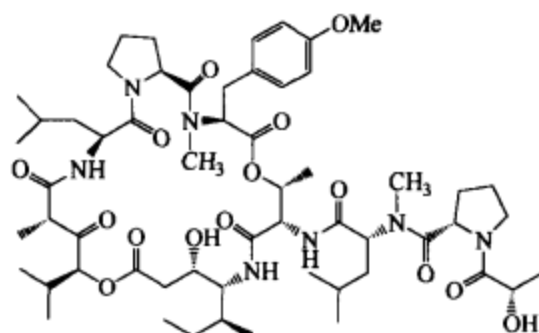
【参考文献】 1. Lindquist N, et al. J Am Chem Soc, 1988, 110: 1308

2. Forsyth C J, et al. J Am Chem Soc, 1988, 110: 5911

3. Forsyth C J, et al. *J Am Chem Soc*, 1990, 112: 3497
4. Sugahara T, et al. *J Chem Soc Perkin Trans 1*, 1990, 1824
5. Sugahara T, et al. *Chem Pharm Bull*, 1995, 43: 147

D0025 Didemnin B

【结构式】



【分子式】 $C_{57}H_{89}N_7O_{15}$

【相对分子质量】 1111

【来源】 海鞘 *Trididemnum solidum*

【生物活性与毒性】 浓度为 0.001mg/mL 时对 L1210 白血病细胞的抑制率即为 50%；在同样低的浓度下还能体外抑制病毒 DNA 和 RNA 的复制，体内抑制 P388 白血病细胞生长^[1]。体内实验显示还具有抗皮肤疱疹病毒作用^[2]。该化合物并非传统的 Na^+ 、 K^+ 载体，能快速而且不可逆地抑制蛋白和 DNA 的合成，其作用要强于对 RNA 合成的抑制^[3]。其主要机理是抑制通往肿瘤的血管，令癌肿缺乏营养而死亡。

【临床与实用价值】 1986 年作为抗肿瘤药进入 I 期临床^[4]，是第一个进入临床的海洋天然产物；1992 年进入 II 期临床，治疗范围扩大到上皮组织癌、乳腺癌、卵巢癌、子宫癌、肺癌、前列腺癌、中枢神经系统瘤、淋巴瘤、白血病等恶性肿瘤。为广谱抗肿瘤药物。但是由于具有较大的毒性，该化合物于 20 世纪 90 年代中期由 NCI 停止临床。

【参考文献】 1. Rinehart K L, et al. *Science*, 1981, 212 (4497): 933

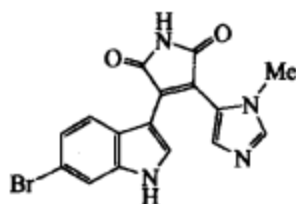
2. Weed S D, et al. *Antiviral Res*, 1983, 3 (4): 269

3. Li L H, et al. *Cancer Lett*, 1984, 23 (3): 279

4. Chun H G, et al. *Invest-New-Drugs*, 1986, 4 (3): 279

D0026 Didemnimide D

【结构式】



【分子式】 $C_{16}H_{11}BrN_4O_2$

【相对分子质量】 371

【理化常数及谱学数据】 橘红色针状晶体；mp > 250°C；UV (MeCN) λ_{max} (nm): 416 (ϵ 4500), 296 (ϵ 10700), 306 (ϵ 9400)；IR (KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3448, 3225, 2966, 2367, 1766, 1702, 1637, 1543, 1449, 1384, 1343, 1261, 1232, 1114, 1085, 1055, 1008, 914, 808, 756, 662, 503； 1H NMR (500MHz, DMSO- d_6) δ : 12.09 (1H, brs, H-1), 11.18 (1H, brs, H-10), 8.05 (1H, brs, H-2), 7.72 (1H, brs, H-16), 7.64 (1H, d, 1.8, H-7), 7.07 (1H, brs, H-14), 6.92 (1H, dd, 8.7, 1.8, H-5), 6.32 (1H, d, 8.7, H-4), 3.35 (3H, s, H-18)； ^{13}C NMR

(125MHz, DMSO- d_6) δ : 132.5 (C-2), 105.3 (C-3), 124.0 (C-3a), 121.6 (C-4), 123.5 (C-5), 115.3 (C-6), 115.1 (C-7), 137.6 (C-7a), 133.5 (C-8), 172.0 (C-9), 171.8 (C-11), 120.0 (C-12), 122.8 (C-13), 132.5 (C-14), 140.4 (C-16), 32.2 (C-18); EIMS m/z (rel intensity) 373 (21.0), 372 (94.5), 371 (41.9), 370 (100.0), 369 (20.1), 331 (19.3), 329 (27.1), 301 (15.1), 300 (10.5), 299 (16.1), 292 (17.1), 291 (35.8), 290 (40.8), 250 (10.5), 220 (18.1), 219 (13.8), 192 (13.1), 166 (14.5), 165 (15.4), 164 (11.2), 152 (16.0), 151 (16.3), 146 (10.4), 139 (14.1), 138 (10.5), 110 (11.2), 91 (11.2), 83 (13.9), 69 (14.1), 67 (10.0), 57 (22.1), 55 (28.6), 45 (15.4), 44 (34.8), 43 (42.0); HREIMS M^+ m/z 370.0078 ($C_{16}H_{11}N_4O_2^{79}Br$, $\Delta - 3.4$ mmu)。

【来源】 红树林海鞘 *Didemnum conchylatum*^[1]

【分析方法】 样品 CH_2Cl_2 -MeOH 1:1 提取, 提取物依次用 isooctane、 CH_2Cl_2 、EtOAc、isopropanol 萃取, isooctane、 CH_2Cl_2 、EtOAc 合并, 硅胶闪柱层析 (CH_2Cl_2 -MeOH), 反复硅胶柱层析 (MeOH- H_2O 7:3), 硅胶柱层析 (CH_2Cl_2 -MeOH 95:5), 反相 HPLC (CH_3CN - H_2O 3:7) 得到纯化化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 对红树林中的食肉鱼类有拒食作用^[1]。

【参考文献】 1. Vervoort H C, et al. J Org Chem, 1997, 62: 1486

2. Vervoort H C, et al. Mar Ecol Prog Ser, 1998, 164: 221

3. Terpin A, et al. Tetrahedron, 1998, 54: 1745

4. Hughes T V, et al. Tetrahedron Lett, 1998, 39: 9629

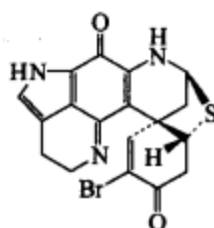
5. Vervoort H C, et al. J Nat Prod, 1999, 62: 389

6. Davis A R, et al. Recent Adv Mar Biotechnol, 1999, 3: 259

7. Lounasmaa M, et al. Nat Prod Rep, 2000, 17: 175

D0027 Discorhabdin A

【结构式】



【分子式】 $C_{18}H_{14}^{79}BrN_3O_2S$

【相对分子质量】 414

【理化常数及谱学数据】 绿色固体; mp > 360°C; $[\alpha]_D + 400^\circ$ (c 0.05, CH_3OH); UV (MeOH) λ_{max} (nm): 249 (29500), 351 (10500), 567 (900); UV (MeOH/KOH) λ_{max} : 335 nm (14000), 473 nm (1000); IR ν_{max} (cm^{-1}): 3700 ~ 2400, 1680, 1620, 1585, 1530, 1410, 1385; HREIMS m/z : M^+ 414.99751, calcd for $C_{18}H_{14}^{79}BrN_3O_2S$ 414.99908; 1H NMR δ : 7.58 (s, H-1), 2.88 (dd, $J = 6.5, 17.0$ Hz, H-4), 3.07 (dd, $J = 12.0, 17.0$ Hz, H-4), 4.53 (dd, $J = 6.5, 12.0$ Hz, H-5), 2.60 (dt, $J = 1.0, 1.0, 12.5$ Hz, H-7), 3.00 (dd, $J = 4.0, 12.5$ Hz, H-7), 5.38 (dd, $J = 1.0, 4.0$ Hz, H-8), 10.50 (s, H-9), 13.4 (s, H-13), 7.19 (t, $J = 0.5, 0.5$ Hz, H-14), 2.97 (m, H-16), 3.80 (dt, $J = 10.0, 10.0, 14.5$ Hz, H-17), 3.94 (dt, $J = 6.0, 6.0, 14.5$ Hz, H-17), 9.80 (s, H-18); ^{13}C NMR δ : 148.0 (C-1), 125.8 (C-2), 186.7 (C-3), 44.4 (C-4), 53.8 (C-5), 49.5 (C-6), 40.4 (C-7), 58.7 (C-8), 150.2 (C-10), 165.8 (C-11), 123.3 (C-12), 127.3 (C-14), 119.8 (C-15), 18.0 (C-16), 43.8 (C-17), 153.6 (C-19), 103.7 (C-20), 123.1 (C-20)。

【来源】 真菌 *Latrunculia*

【分析方法】 甲醇、二氯甲烷提取物经反相柱层析分离纯化, 流动相为 65% CH_3OH 、35% H_2O + 0.05% CF_3COOH , 获得活性成分 Discorhabdin A。

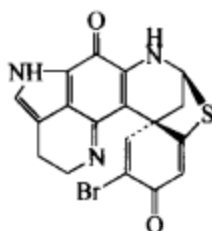
【生物活性与毒性】 有效抑制肿瘤细胞 P388 的生长及抗微生物作用。

【参考文献】 1. Perry N B, et al. Tetrahedron, 1988, 44: 1727

2. Kita Y, et al. J Am Chem Soc, 1992, 114: 2175

D0028 Discorhabdin B

【结构式】



【分子式】 $C_{18}H_{12}BrN_3O_2S$

【相对分子质量】 412

【理化常数及谱学数据】 绿色固体; mp > 360°C; $[\alpha]_D^{25} + 400^\circ$ (c 0.17, CH₃OH); UV (MeOH) λ_{max} (nm): 248 (30600), 309 (10800), 357 (10600), 567 (1100); UV (MeOH/NaOH) λ_{max} (nm): 231 (25500), 306 (14700); IR ν_{max} (cm⁻¹): 3700~2400, 1650, 1620, 1520, 1410; HREIMS m/z : M^+ 412.98529, calcd for $C_{18}H_{12}BrN_3O_2S$ 412.98343; ¹H NMR δ : 7.87 (s, H-1), 6.24 (s, H-4), 2.54 (dd, $J = 6.0, 3.5, 11.5$ Hz, H-7), 2.81 (d, $J = 11.5$ Hz, H-7), 5.72 (d, $J = 3.5$ Hz, H-8), 10.80 (s, H-9), 13.5 (s, H-13), 7.21 (s, H-14), 2.92 (dd, $J = 6.5, 9.0$ Hz, H-16), 3.83 (dt, $J = 9.0, 9.0, 14.0$ Hz, H-17), 3.94 (dt, $J = 6.5, 6.5, 14.5$ Hz, H-17), 8.70 (s, H-18); ¹³C NMR δ : 146.0 (C-1), 128.2 (C-2), 174.1 (C-3), 119.3 (C-4), 170.0 (C-5), 51.4 (C-6), 42.5 (C-7), 61.3 (C-8), 150.9 (C-10), 165.2 (C-11), 123.4 (C-12), 120.5 (C-15), 18.1 (C-16), 45.2 (C-17), 154.2 (C-19), 97.2 (C-20), 123.2 (C-20).

【来源】 真菌 *Latrunculia*

【分析方法】 甲醇提取物经反相柱层析分离 (Merk Lobar RP-8 column, 40% CH₃OH, 60% H₂O + 0.05% CF₃COOH), 纯化 (Alltech C₈ column, 75% CH₃OH, 25% H₂O + 0.05% CF₃COOH), 获得活性成分 Discorhabdin B。

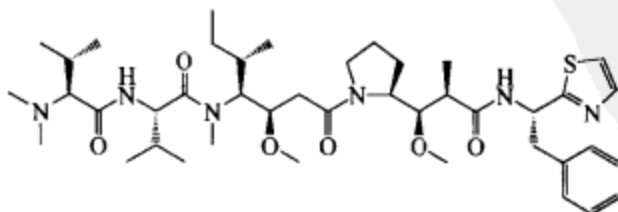
【生物活性与毒性】 有效抑制肿瘤细胞 P388 的生长及抗微生物作用。

【参考文献】 1. Perry N B, et al. Tetrahedron, 1988, 44: 1727

2. Kita Y, et al. J Am Chem Soc, 1992, 114: 2175

D0029 Dolastatin 10

【结构式】



【分子式】 $C_{42}H_{68}N_6O_6S$

【相对分子质量】 784

【来源】 海洋软体动物 *Dolabella auricularia*

【分析方法】 参见文献 [1~5]。

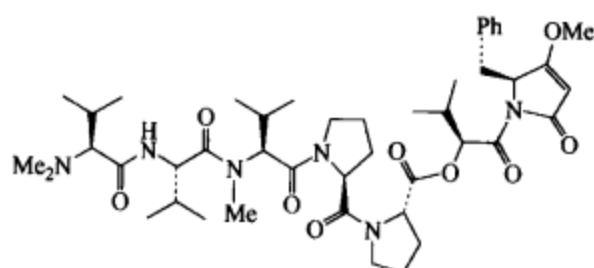
【生物活性与毒性】 作为微管蛋白长春花碱结合区域交换式结合剂^[6,7], 对多种肿瘤细胞显示抑制作用。

【临床与实用价值】 20 世纪 90 年代初进入 I 期临床, 但是 II 期临床实验观察显示, 对人前列腺癌和恶性黑色素瘤并无显著的抗肿瘤活性, 且在临床使用浓度显示细胞生长抑制^[8,9]。

- 【参考文献】 1. Bai R, et al. *Biochem Pharmacol*, 1990, 39: 1941
 2. Bai R, et al. *Biochem Pharmacol*, 1992, 43: 2637
 3. Pettit G R, et al. *J Am Chem Soc*, 1987, 109: 6883
 4. Pettit G R, et al. *J Org Chem*, 1989, 54: 6005
 5. Pettit G R. *Fortschr Chem Org Naturst*, 1997, 70: 1
 6. Bai R, et al. *J Biol Chem*, 1990, 265: 17141
 7. Hamel E. *Biopolymers*, 2002, 66: 142
 8. Vaishampayan H, et al. *Clin Canc Res*, 2000, 6: 4205~4208
 9. Margolin K, et al. *Invest New Drugs*, 2001, 19: 335

D0030 Dolastatin 15

【结构式】



【分子式】 $C_{45}H_{68}N_6O_9$

【相对分子质量】 836

【理化常数及谱学数据】 无定形粉末; mp 143~148°C; $[\alpha]_D^{26} - 26^\circ$ (c 0.01, CH₃OH); UV (MeOH) λ_{max} (nm): 220(3.11), 242(2.90); IR (NaCl) ν_{max} (cm⁻¹): 2960, 2930, 2860, 1730, 1690, 1665, 1630, 1440, 1305, 1245, 1180; HRSP-SIMS: $[M+H]^+$ 837.5135, calcd. 837.5136 for $C_{45}H_{68}N_6O_9$; ¹H and ¹³C NMR (400MHz, CD₂Cl₂) δ : dolapyrrolidone unit: ¹H 4.71(s, H-2), 3.74(s, H-3b), 4.77(dd, J = 4.8, 2.9Hz, H-4), 3.52(dd, J = 14.0, 4.5Hz, H-4a), 3.04(dd, J = 13.8, 3.5Hz, H-4a'), 7.14(m, H-4c), 7.20(m, H-4b), 7.18(m, H-4e); ¹³C 169.3(C-1), 94.7(C-2), 178.2(C-3), 59.9(C-4), 58.3(C-3b), 34.9(C-4a), 134.2(C-4b), 130.0(C-4c), 128.1(C-4d), 127.0(C-4e); 2-hydroxyisovaleric acid unit: ¹H 5.89(d, J = 2.7Hz, H-7), 2.19(dt, J = 2.7, 6.6Hz, H-7a), 0.91(d, J = 6.6Hz, H-7b), 1.07(d, J = 6.6Hz, H-7c); ¹³C 169.5(C-6), 77.8(C-7), 28.9(C-7a), 15.8(C-7b), 19.8(C-7c); proline-1 unit: ¹H 4.83(dd, J = 8.9, 2.7Hz, H-10), 2.38(m, H-11), 2.22(m, H-11'), 2.25(m, H-12), 2.03(m, H-12'), 3.75(dd, J = 14.8, 8.9Hz, H-13), 3.60(dd, J = 14.7, 6.9Hz, H-13'); ¹³C 171.4(C-9), 58.3(C-10), 28.5(C-11), 24.6(C-12), 46.4(C-13); proline-2 unit: ¹H 4.63(dd, J = 8.1, 4.8Hz, H-16), 2.13(m, H-17), 2.11(m, H-17'), 2.15(m, H-18), 1.85(m, H-18'), 3.90(dd, J = 16.7, 7.1Hz, H-19), 3.78(dd, J = 16.5, 7.0Hz, H-19'); ¹³C 170.8(C-15), 58.0(C-16), 28.4(C-17), 24.7(C-18), 47.8(C-19); N-methylvaline unit: ¹H 5.13(d, J = 11.1Hz, H-22), 2.27(dt, J = 11.2, 6.6Hz, H-22a), 0.77(d, J = 6.6Hz, H-22b), 1.03(d, J = 6.6Hz, H-22c), 3.17(s, H-23a); ¹³C 169.1(C-21), 59.2(C-22), 27.3(C-22a), 18.5(C-22b), 19.1(C-22c), 30.7(C-23a); valine unit: ¹H 4.79(dd, J = 9.3, 6.8Hz, H-25), 1.98(oct, J = 6.7Hz, H-25a), 0.93(d, J = 6.6Hz, H-25b, H-25c), 6.87(d, J = 9.2Hz, H-26); ¹³C 173.0(C-24), 53.6(C-25), 31.1(C-25a), 18.0(C-25b), 19.6(C-25c); N,N-dimethylvaline unit: ¹H 2.44(d, J = 6.6Hz, H-28c), 2.24(s, H-29a, H-29b); ¹³C 171.8(C-27), 76.5(C-28), 27.7(C-28a), 17.6(C-28b), 20.2(C-28c), 43.0(C-29a, C-29b)。

【来源】 海兔 *Dolabella auricularia*

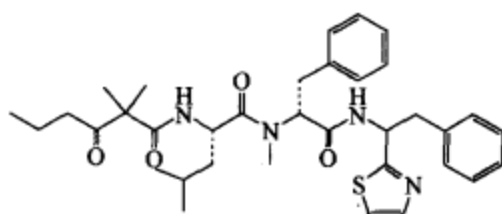
【分析方法】 二氯甲烷-甲醇提取物经硅胶柱色谱法、高效液相色谱法 (50% MeOH/H₂O, 100% MeOH) 分离, 纯化获得活性成分 Dolastatin 15。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 P388 的生长。

- 【参考文献】 1. Pettit G R, et al. J Org Chem, 1989, 54: 6005
 2. Kamano Y, et al. Tennen Yuki Kagobutsu Toronkai Koen Yosh, 1989, 31: 641
 3. Pettit G R, et al. J Org Chem, 1990, 55: 2989

D0031 Dolastatin 18

【结构式】



【分子式】 $C_{35}H_{46}N_4O_4S$

【相对分子质量】 618

【理化常数及谱学数据】 无色粉末; $[\alpha]_D^{25} -2.3^\circ (c\ 0.094, CH_3OH)$; $^1H\ NMR (500MHz, CDCl_3) \delta$: 7.81 (1H, d, 3.5, H-7), 7.50 (1H, d, 3.5, H-4), 7.38 (1H, d, 3.5, H-5), 7.28 (2H, m, H-9c), 7.26 (2H, m, H-6d), 7.24 (1H, m, H-6e), 7.23 (2H, m, H-6c), 7.22 (2H, m, H-9d), 7.18 (1H, m, H-9e), 6.29 (1H, d, 8.0, H-13), 5.36 (1H, m, H-6), 5.10 (1H, dd, 7.0, 6.5, H-9), 4.55 (1H, m, H-12), 3.47 (1H, dd, 8.0, 19.0, H-6a), 3.37 (1H, dd, 7.5, 19.0, H-6a), 3.30 (1H, m, H-9a), 2.92 (1H, m, H-9a), 2.89 (3H, s, H-10a), 2.42 (2H, dt, 4.0, 9.0, H-17), 1.52 (2H, m, H-11), 1.32 (3H, s, H-15a), 1.30 (3H, s, H-15b), 1.07 (1H, m, H-12b), 1.05 (1H, m, H-12a), 0.88 (1H, m, H-12a), 0.83 (3H, t, 8.0, H-19), 0.73 (3H, d, 7.5, H-12c), 0.69 (3H, d, 8.0, H-12d); $^{13}C\ NMR (125MHz, CDCl_3) \delta$: 174.1 (C-2), 139.4 (C-4), 119.9 (C-5), 52.4 (C-6), 40.9 (C-6a), 135.8 (C-6b), 129.3 (C-6c), 128.7 (C-6d), 127.2 (C-6e), 169.9 (C-8), 57.5 (C-9), 33.5 (C-9a), 136.4 (C-9b), 128.7 (C-9c), 128.5 (C-9d), 126.8 (C-9e), 31.4 (C-10a), 174.0 (C-11), 48.4 (C-12), 41.1 (C-12a), 24.4 (C-12b), 21.9 (C-12c), 22.9 (C-12d), 172.8 (C-14), 55.5 (C-15), 22.5 (C-15a), 22.6 (C-15b), 210.2 (C-16), 40.1 (C-17), 17.1 (C-18), 13.6 (C-19); FABMS m/z 619.0 (M+H)⁺ $C_{35}H_{46}N_4O_4S$.

【来源】 软体动物 *Dolabella auricularia*^[1]

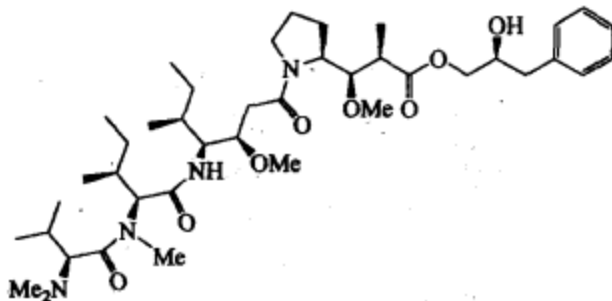
【分析方法】 样品 CH_2Cl_2 提取, Sephadex LH-20 柱层析, HPLC (CH_3CN-H_2O 1:1) 得到纯化化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 抑制非小细胞肺癌 NCI-H460 GI_{50} 0.39 $\mu g/mL$ ^[1]。

- 【参考文献】 1. Pettit G R, et al. Bioorg Med Chem Lett, 1997, 7: 827
 2. Pettit G R, et al. J Org Chem, 1989, 54: 6005
 3. Kamano Y, et al. Tennen Yuki Kagobutsu Toronkai Koen Yosh, 1989, 31: 641
 4. Pettit G R, et al. J Org Chem, 1990, 55: 2989

D0032 Dolastatin H

【结构式】



【分子式】 $C_{41}H_{70}N_4O_8$

【相对分子质量】 746

【理化常数及谱学数据】 无色无定形固体; $[\alpha]_D^{25} - 56^\circ$ (c 0.04, MeOH); UV (MeOH) $\lambda_{\max} (\epsilon)$: 208 (23000) nm; IR (CHCl₃) $\nu_{\max} (cm^{-1})$: 3425, 1730, 1660, 1635, 1495, 1455, 1260, 1095, 1060; ¹H NMR (400 MHz, C₆D₆) δ : 0.86 (3H, t, 7.5, H-22c), 0.89 (3H, t, 7.5, H-19c), 0.97 (6H, d, 6.8 Hz, H-27 and H-19d), 1.04 (3H, d, 6.6, H-22d), 1.06 (1H, m, H-19b), 1.12 (3H, d, 6.6, H-28), 1.23 (2H, m, H-13 and H-19b), 1.34 (3H, d, 7.0, H-9a), 1.43 (1H, m, H-19b), 1.47 (1H, m, H-19a), 1.59 (1H, m, H-12), 1.66 (1H, m, H-13), 1.71 (1H, m, H-22b), 1.87 (2H, m, H-12 and H-22a), 1.91 (1H, m, H-17), 2.02 (1H, dq, 7.0, 6.8, 6.6, H-26), 2.10 (1H, br, H-17), 2.20 (6H, s, H-25bc), 2.30 (1H, d, 7.0, H-25), 2.58 (1H, dq, 10.6, 7.0, H-9), 2.72 (3H, s, H-20a), 2.78 (1H, dd, 13.7, 5.5, H-3), 2.83 (1H, br, H-14), 3.01 (1H, br, H-14), 3.03 (1H, dd, 13.7, 8.1, H-3), 3.26 (3H, s, H-10ab), 3.29 (3H, s, H-18ab), 3.68 (1H, dd, 11.0, 6.4, H-1), 4.14 (1H, m, H-2), 4.14 (1H, br, H-18), 4.18 (1H, m, H-11), 4.27 (1H, dd, 10.6, 1.1, H-10), 4.82 (1H, dd, 11.0, 2.2, H-1), 4.98 (1H, br, H-22), 5.00 (1H, br, H-19), 5.21 (1H, d, 6.2, OH), 6.72 (1H, d, 8.8, NH), 7.11 (1H, m, H-7), 7.20 (2H, m, H-6), 7.31 (2H, m, H-5); ¹³C NMR (100 MHz, C₆D₆) δ : 11.0 (2 C, C-19c, C-22c), 14.9 (C-9a), 15.6 (C-22d), 16.1 (C-19d), 18.4 (C-27), 20.3 (C-28), 24.3 (C-12), 25.0 (C-13), 25.0 (C-22b), 26.1 (C-19b), 27.9 (C-26), 32.0 (C-20a), 33.4 (C-19a), 37.7 (C-22a), 38.0 (C-17), 40.1 (C-3), 42.7 (2C, C-25bc), 45.5 (C-9), 47.9 (C-14), 53.1 (C-22), 57.0 (C-19), 57.7 (C-18ab), 60.3 (C-11), 61.1 (C-10ab), 69.5 (C-1), 70.2 (C-2), 76.2 (C-25), 78.8 (C-18), 81.6 (C-10), 126.4 (C-7), 128.5 (2C, C-6), 129.8 (2C, C-5), 138.9 (C-4), 170.7 (C-16), 171.1 (C-24), 173.4 (C-8), 174.0 (C-21); HRFABMS calcd for $C_{41}H_{71}N_4O_8$ m/z 747.5272 (MH⁺), found 747.5294^[1].

【来源】 海兔 *Dolabella auricularia*^[1]

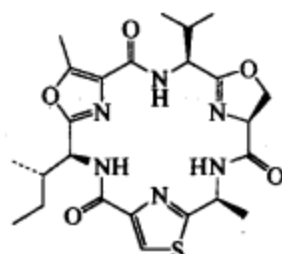
【分析方法】 样品 MeOH 提取, 90% MeOH 水萃取部分硅胶柱层析 (benzene-EtOAc), ODS-MPLC (C₆H₆-CH₃CN-MeOH), HPLC (MeCN-H₂O), 制备 TLC (CHCl₃-MeOH 12:1), HPLC (CH₃CN-0.01 mol/L NH₄OAc 7:3) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 细胞毒活性, HeLa-S3 IC₅₀ 0.0022 μ g/mL^[1]。

【参考文献】 1. Sone H, et al. J Am Chem Soc, 1996, 118: 1874

D0033 Dolastatin I

【结构式】

【分子式】 $C_{24}H_{32}N_6O_5S$

【相对分子质量】 516

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D^{30} - 50.0^\circ$ (c 0.06, CHCl₃); UV (CH₃CN) $\lambda_{\max} (nm) (\epsilon)$: 198 (27000), 220 (20000); IR (CHCl₃) $\nu_{\max} (cm^{-1})$: 3390, 3120, 1675, 1540, 1525; ¹H NMR (600 MHz, CDCl₃) δ : 8.62 (1H, d, 6.8, NH), 8.09 (1H, d, 7.3, NH), 8.06 (1H, s, H-3), 7.93 (1H, d, 9.0, NH), 5.39 (1H, dq, 7.3, 6.8, H-5), 5.13 (1H, dd, 6.8, 4.4, H-20), 4.82 (1H, ddd, 9.0, 2.9, 2.0, H-11), 4.73 (1H, dd, 10.7, 7.3, H-9), 4.66 (1H, ddd, 10.7, 8.3, 2.0, H-8), 4.56 (1H, dd, 8.3, 7.3, H-9), 2.66 (3H, s, H-18), 2.41 (1H, m, H-12), 2.26 (1H, m, H-21), 1.65 (1H, m, H-22), 1.60 (3H, d, 6.8, H-6), 1.35 (1H, m, H-22), 1.07 (3H, d, 6.8, H-14),

1.03(3H, t, 7.3, H-23), 0.94(3H, d, 6.8, H-13), 0.90(3H, d, 6.8, H-24); ^{13}C NMR(150MHz, CDCl_3) δ : 159.9(C-1), 149.6(C-2), 123.0(C-3), 170.3(C-4), 47.0(C-5), 24.6(C-6), 170.0(C-7), 67.6(C-8), 71.6(C-9), 169.7(C-10), 51.9(C-11), 31.3(C-12), 16.5(C-13), 19.0(C-14), 161.0(C-15), 128.5(C-16), 153.5(C-17), 11.6(C-18), 160.3(C-19), 52.9(C-20), 39.4(C-21), 25.9(C-22), 11.9(C-23), 14.5(C-24); FABMS m/z 517 (MH^+ , 74); HRFABMS m/z MH^+ Obsd. 517.2244, $\text{C}_{24}\text{H}_{33}\text{N}_6\text{O}_5\text{S}$, requires 517.2233^[1]。

【来源】海兔 *Dolabella auricularia*^[1]

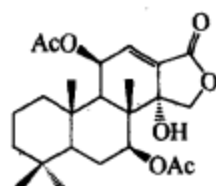
【分析方法】样品甲醇提取, 乙酸乙酯萃取部分进一步用正己烷和含水 10% 甲醇萃取, 甲醇水部分硅胶柱层析(梯度 hexane-acetone, acetone-MeOH), ODS 柱层析(H_2O -MeOH), HPLC(H_2O - CH_3CN 35:65), 制备 TLC(苯-丙酮 2:1), HPLC(H_2O -MeOH 30:70) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】具有细胞毒活性, 抗 Hela S_3 IC_{50} 12 $\mu\text{g}/\text{mL}$ ^[1]。

【参考文献】1. Sone H, et al. Tetrahedron, 1997, 53: 8149

D0034 Dorisenone A

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{24}\text{H}_{34}\text{O}_7$

【相对分子质量】434

【理化常数及谱学数据】无色针晶; mp 255~257 $^{\circ}\text{C}$; $[\alpha]_{\text{D}}^{25} + 188.2^{\circ}$ (c 1.4, CHCl_3); UV(EtOH) λ_{max} (ϵ): 218(8000) nm; IR(CHCl_3) ν_{max} (cm^{-1}): 3450, 2800~3050, 1760, 1740, 1230; ^1H NMR(600MHz, CDCl_3) δ : 1.62(1H, brd, 11.2, H-1 β), 1.05(1H, dt, 3.9, 12.9, H-1 α), 1.46(1H, dt, 3.2, 14.2, H-2 α), 1.41(1H, brd, 13.2, H-3 β), 1.15(1H, dt, 3.9, 13.7, H-3 α), 0.99(1H, d, 11.5, H-5), 1.59(1H, q, 12.2, H-6 β), 1.89(1H, H-6 α), 5.39(1H, dd, 4.6, 11.7, H-7 α), 1.90(1H, d, 5.1, H-9), 5.79(1H, dd, 4.0, 5.1, H-11 α), 6.72(1H, d, 4.0, H-12), 4.46(1H, d, 10.0, H-15 β), 4.40(1H, d, 10.0, H-15 α), 1.16(3H, s, H-17), 0.89(3H, s, H-18), 0.83(3H, s, H-19), 1.20(3H, s, H-20), 2.06(3H, s, AcO), 2.07(3H, s, AcO), 3.24(1H, s, OH); ^{13}C NMR(150MHz, CDCl_3) δ : 39.7(C-1), 18.0(C-2), 41.2(C-3), 33.2(C-4), 53.6(C-5), 24.5(C-6), 74.6(C-7), 43.9(C-8), 49.3(C-9), 37.9(C-10), 67.0(C-11), 134.5(C-12), 131.3(C-13), 75.8(C-14), 75.3(C-15), 168.4(C-16), 13.7(C-17), 33.5(C-18), 21.5(C-19), 53.1(C-19), 17.5(C-20), 171.0, 21.3(AcO), 169.5, 21.6(AcO); FDMS m/z 435 [$\text{M} + \text{H}$] $^+$; HRFABMS calcd for $\text{C}_{24}\text{H}_{35}\text{O}_7$ m/z 435.2383(MH^+), found 435.2385^[1]。

【来源】软体动物 *Chromodoris obsoleta*^[1]

【分析方法】样品 CHCl_3 -MeOH 1:3 提取, CHCl_3 萃取部分 Sephadex LH-20 (CHCl_3), 硅胶柱层析(hexane-EtOAc 3:1), HPLC (MeOH- H_2O) 得到纯化合物^[1]。

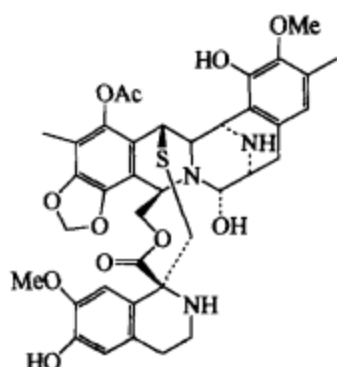
【生物活性与毒性】细胞毒活性, IC_{50} $\mu\text{g}/\text{mL}$: L1210 0.21, KB 0.22^[1]。

【参考文献】1. Miyamoto T, et al. Tetrahedron, 1996, 52: 8187

2. Abad A, et al. Tetrahedron Lett, 2002, 43: 7933

D0035 Ecteinascidin 729

【结构式】



【分子式】 $C_{38}H_{41}N_3O_{11}S$

【相对分子质量】 747

【理化常数及谱学数据】 1H NMR(CD_3OD) δ : 4.74(bs, H-1), 3.64(m, H-3), 4.56(bs, H-4), 4.47(d, $J = 4.0$ Hz, H-11), 3.72(m, H-13), 3.06(m, H-14), 6.55(s, H-15), 4.17(d, $J = 3.0$ Hz, H-21), 5.17(d, $J = 11.0$ Hz, H-22a), 4.09(dd, $J = 11.0, 2.0$ Hz, H-22b), 6.10(s, H-23a), 6.01(s, H-23b), 3.15(ddd, $J = 11.0, 11.0, 4.0$ Hz, H-3'a), 2.76(ddd, $J = 11.0, 6.0, 3.0$ Hz, H-3'b), 2.58(ddd, $J = 16.0, 11.0, 3.0$ Hz, H-4'a), 2.43(m, H-4'b), 6.40(s, H-5'), 6.45(s, H-8'), 2.44(m, H-12'a), 2.04(m, H-12'b), 2.30(s, 5-OAc), 2.04(s, 6-CH₃), 2.28(s, 16-CH₃), 3.73(s, 17-OCH₃), 3.58(s, 7'-OCH₃); ^{13}C NMR(CD_3OD) δ : 57.2(d, C-1), 58.8(d, C-3), 43.3(d, C-4), 142.6(s, C-5), 113.9(s, C-6), 147.0(s, C-7), 141.9(s, C-8), 116.5(s, C-9), 122.9(s, C-10), 48.3(d, C-11), 47.2(d, C-13), 28.3(t, C-14), 121.4(d, C-15), 131.0(s, C-16), 144.6(s, C-17), 148.3(s, C-18), 124.9(s, C-19), 132.9(s, C-20), 91.5(d, C-21), 63.1(t, C-22), 103.4(t, C-23), 65.6(s, C-1'), 40.7(t, C-3'), 28.9(t, C-4'), 115.9(d, C-5'), 146.8(s, C-6'), 146.7(s, C-7'), 111.7(d, C-8'), 126.0(s, C-9'), 129.3(s, C-10'), 173.6(s, C-11'), 43.1(t, C-12'), 170.2(s, 5-OAc), 20.5(q, 5-OAc), 9.8(q, 6-CH₃), 16.1(q, 16-CH₃), 58.8(q, 17-OCH₃), 55.8(q, 7'-OCH₃).

【来源】 海鞘 *Ecteinascidia turbinata*

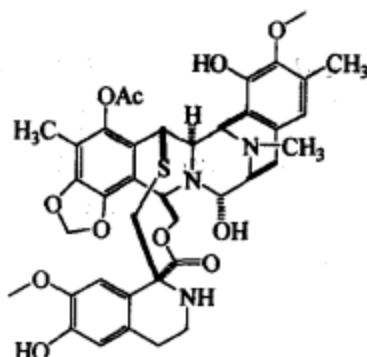
【分析方法】 甲醇粗提物的正丁醇可溶部分经反复的反相柱层析分离, 纯化, 获得活性成分 Ecteinascidin 729。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 P388 的生长。

- 【参考文献】 1. Rinehart K L, et al. J Org Chem, 1990, 55: 4512
 2. Rinehart K L, Bioact Compd Mar Org Indo-US Symp 8, 1991, 301
 3. Valoti G, et al. Clin Cancer Res, 1998, 4: 1977
 4. Lansiaux A, et al. Bull Cancer, 1999, 86: 139
 5. Zewail-Foote M, et al. J Med Chem, 1999, 42: 2493
 6. Erba E, et al. Eur J Cancer, 2001, 37: 97

D0036 Ecteinascidin 743

【结构式】



【分子式】 $C_{39}H_{43}N_3O_{11}S$

【相对分子质量】 761

【理化常数及谱学数据】 $^1\text{H NMR}(\text{CD}_3\text{OD}) \delta$: 4.86(bs, H-1), 3.66(bd, $J = 5.0\text{Hz}$, H-3), 4.57(bs, H-4), 4.25(dd, $J = 5.0, 1.0\text{Hz}$, H-11), 3.40(m, H-13), 2.83(m, H-14), 6.51(s, H-15), 4.20(d, $J = 3.0\text{Hz}$, H-21), 5.16(d, $J = 11.0\text{Hz}$, H-22a), 4.09(dd, $J = 11.0, 2.0\text{Hz}$, H-22b), 6.08(s, H-23a), 5.98(s, H-23b), 3.14(ddd, $J = 11.0, 11.0, 3.0\text{Hz}$, H-3'a), 2.78(ddd, $J = 11.0, 6.0, 3.0\text{Hz}$, H-3'b), 2.61(ddd, $J = 16.0, 11.0, 6.0\text{Hz}$, H-4'a), 2.43(m, H-4'b), 6.38(s, H-5'), 6.44(s, H-8'), 2.37(d, $J = 14.0\text{Hz}$, H-12'a), 2.02(d, $J = 14.0\text{Hz}$, H-12'b), 2.29(s, 5-OAc), 2.02(s, 6-CH₃), 2.28(s, 16-CH₃), 3.73(s, 17-OCH₃), 3.57(s, 7'-OCH₃), 2.12(s, 12-NCH₃); $^{13}\text{C NMR}(\text{CD}_3\text{OD}) \delta$: 56.6(d, C-1), 59.6(d, C-3), 43.7(d, C-4), 142.7(s, C-5), 113.9(s, C-6), 146.8(s, C-7), 141.9(s, C-8), 116.9(s, C-9), 122.9(s, C-10), 55.8(d, C-11), 53.9(d, C-13), 24.7(t, C-14), 121.0(d, C-15), 131.0(s, C-16), 145.1(s, C-17), 150.2(s, C-18), 119.9(s, C-19), 132.4(s, C-20), 93.1(d, C-21), 61.5(t, C-22), 103.4(t, C-23), 65.6(s, C-1'), 40.7(t, C-3'), 28.8(t, C-4'), 115.9(d, C-5'), 146.8(s, C-6'), 146.8(s, C-7'), 111.7(d, C-8'), 126.0(s, C-9'), 129.3(s, C-10'), 173.5(s, C-11'), 43.2(t, C-12'), 170.2(s, 5-OAc), 20.5(q, 5-OAc), 9.7(q, 6-CH₃), 16.0(q, 16-CH₃), 60.3(q, 17-OCH₃), 55.9(q, 7'-OCH₃), 41.3(q, 12-NCH₃).

【来源】 海鞘 *Ecteinascidia turbinata*

【分析方法】 甲醇粗提物的正丁醇可溶部分经反复的反相柱层析分离, 纯化, 获得活性成分 ecteinascidin 743。

【生物活性与毒性】 对多种肿瘤细胞具有显著细胞毒作用。当 Et743 对所作用的恶性肿瘤细胞的 IC_{50} 值 $< 100\text{nmol/L}$ 时, 药物能迅速 (6h 内) 对与细胞循环、转录因子、生长因子/受体等相关的基因产生变异; 而当其 IC_{50} 值 $\geq 100\text{nmol/L}$ 时 (肿瘤细胞对 ET743 具有耐受性), 基因变异作用显著延迟^[5]。

【临床与实用价值】 该天然产物由 Illinois 大学转让给西班牙 PharmaMar 公司进行开发, 至 2002 年, 治疗各种癌症的 I 期及 II 期临床观察已超过 1000 例。欧洲药物产权委员会 (CPMP) 于 2003 年 7 月禁止该化合物作为软组织瘤抑制剂在市场销售^[6], 同时于 2003 年 9 月批准该化合物以孤儿药形式治疗卵巢癌^[7]。如今 Et743 在美国及欧洲进入 II 期临床治疗恶性毒瘤, 并开始进入 III 期临床。

【参考文献】 1. Sigel M M, et al. In: Youngen H W. Food-Drugs from the Sea Proceedings. Washington DC: Marine Technology Society, 1969. 281

2. Rinehart K, et al. J Org Chem, 1990, 55: 4512

3. Wright A E, et al. J Org Chem, 1990, 55: 4508

4. Scott J D, et al. Chem Rev, 2002, 102: 1669

5. Sanchez-Beato M, et al. Clin Canc Res, 2003, 9 (Suppl): C246

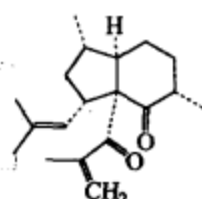
6. Anon. DailyDrugNews.com (Daily Essentials), 2003, July 30

7. Anon. DailyDrugNews.com (Daily Essentials), 2003, October 27

8. Jimeno J M. Anti-Cancer Drugs, 2002, 13 (Suppl 1): S15~S19

D0037 Elisabethin B

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{19}\text{H}_{28}\text{O}_2$

【相对分子质量】 288

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_{\text{D}}^{25} - 99.0^\circ$ (c 1.1, CHCl_3); UV (MeOH) $\lambda_{\text{max}} (\epsilon)$: 225 (2300) nm; IR (film) $\nu_{\text{max}} (\text{cm}^{-1})$: 2952, 2925, 2869, 1699, 1661, 1633, 1455, 1376, 1308, 1238, 1130, 1090, 1052, 1027,

940, 843; ^1H NMR (300MHz, C_6D_6) δ : 5.84 (1H, brs, H-16), 5.34 (1H, brs, H-16), 4.90 (1H, brd, 11.1, H-10), 4.22 (1H, ddd, 5.4, 8.7, 11.1, H-9), 2.72 (1H, m, H-6), 2.49 (1H, m, H-3), 2.20 (1H, m, H-8), 2.14 (1H, m, H-5), 1.72 (3H, s, H-17), 1.67 (1H, m, H-4), 1.47 (3H, d, 1.2, H-12), 1.46 (3H, d, 1.5, H-13), 1.38 (1H, m, H-7), 1.27 (1H, m, H-4), 1.23 (1H, m, H-5), 0.92 (1H, m, H-8), 0.84 (3H, d, 7.5, H-18), 0.77 (3H, d, 6.6, H-19); ^{13}C NMR (75MHz, C_6D_6) δ : 75.5 (C-1), 213.2 (C-2), 46.7 (C-3), 29.9 (C-4), 19.1 (C-5), 51.3 (C-6), 34.2 (C-7), 40.2 (C-8), 40.8 (C-9), 126.2 (C-10), 130.6 (C-11), 17.7 (C-12), 25.6 (C-13), 196.8 (C-14), 144.6 (C-15), 126.1 (C-16), 19.0 (C-17), 16.3 (C-18), 18.5 (C-19); LRFAB-MS m/z $[\text{M} + \text{H}]^+$ calcd for $\text{C}_{19}\text{H}_{29}\text{O}_2$ 289.4, found 289.4; HREI-MS m/z $[\text{M}^+]$ calcd for $\text{C}_{19}\text{H}_{28}\text{O}_2$ 288.2089, found 288.2086 (13), 273.1860 (8, $\text{C}_{18}\text{H}_{25}\text{O}_2$), 260.2085 (38, $\text{C}_{18}\text{H}_{28}\text{O}$), 245.1900 (21, $\text{C}_{17}\text{H}_{25}\text{O}$), 233.1574 (11, $\text{C}_{15}\text{H}_{21}\text{O}_2$), 219.1749 (100, $\text{C}_{15}\text{H}_{23}\text{O}$), 217.1589 (73, $\text{C}_{15}\text{H}_{21}\text{O}$), 203.1422 (81, $\text{C}_{14}\text{H}_{19}\text{O}$), 179.1077 (27, $\text{C}_{11}\text{H}_{15}\text{O}_2$), 161.1028 (52, $\text{C}_{11}\text{H}_{13}\text{O}$), 151.1119 (20, $\text{C}_{10}\text{H}_{15}\text{O}$), 145.0996 (31, $\text{C}_{11}\text{H}_{13}$), 119.0869 (46, C_9H_{11}), 105.0668 (42, C_8H_9), 95 (43, C_7H_{11}), 91.0493 (55, C_7H_7), 69.0330 (52, $\text{C}_4\text{H}_5\text{O}$)^[1]。

【来源】 West Indian Sea Whip *Pseudopterogorgia elisabethae* (Octocorallia)^[1]

【分析方法】 样品氯仿-甲醇 1:1 提取, hexane 萃得部分 Bio-Beads (SX-3) 柱层析 (toluene), 硅胶柱层析 (hexane-EtOAc 9:1), 硅胶柱层析 (hexane-EtOAc 98:2) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 细胞毒活性, 在 10^{-5} mol/L 浓度下对 NCI-60 表现重要的细胞毒活性; 抗感染, 抗肺结核活性^[1]。

【参考文献】 1. Rodriguez A D, et al. J Org Chem, 1998, 63: 7083

2. Rodriguez A D, et al. Tetrahedron Lett, 1999, 40: 7627

3. Rodriguez A D, et al. Tetrahedron Lett, 2000, 41: 5177

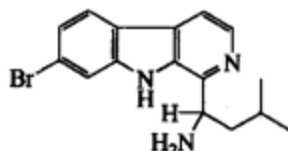
4. Heckrodt T J, et al. Synthesis, 2002, 13: 1857

5. Miyaoka H, et al. Tetrahedron Lett, 2002, 43: 7773

6. Heckrodt T J, et al. J Am Chem Soc, 2003, 125: 4680

D0038 Eudistalbin A

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{16}\text{H}_{19}^{81}\text{BrN}_3$

【相对分子质量】 333

【理化常数及谱学数据】 棕色粉末; $[\alpha]_{\text{D}} - 10^\circ$ (c 0.1, MeOH); UV (MeOH) λ_{max} (nm): 220 (sh), 240 (45368), 290 (sh), 295 (23157), 338 (5789); IR (film) ν_{max} (cm^{-1}): 1565, 1616, 2961, 3400; HRFABMS m/z : $[\text{M} - \text{H}]^+$ 334.0754 ($\text{C}_{16}\text{H}_{19}^{81}\text{BrN}_3$ requires 334.07432); EIMS m/z : $[\text{M} - \text{H}]^+$ 332 (3), 330 (4), 277 (98), 276 (99), 275 (100), 274 (80), 248 (12), 246 (15), 195 (15), 168 (40), 140 (20); ^1H NMR (CD_3CN) δ : 0.88 (d, $J = 7.0$ Hz, Me), 0.94 (d, $J = 7.0$ Hz, Me), 1.63 (m, H-12), 1.72 (m, H-11), 4.53 (t, $J = 7.0$ Hz, H-10), 7.31 (dd, $J = 8.4, 1.3$ Hz, H-6), 7.70 (d, $J = 1.3$ Hz, H-8), 7.79 (d, $J = 5.0$ Hz, H-4), 7.98 (dd, $J = 8.4$ Hz, H-5), 8.25 (d, $J = 5.0$ Hz, H-3); ^{13}C NMR (CD_3CN) δ : 22.4 (Me), 23.4 (Me), 25.5 (C-12), 47.0 (C-11), 55.1 (C-10), 113.8 (C-4), 115.6 (C-8), 118.1 (C-4a), 121.2 (C-5a), 123.2 (C-6), 123.5 (C-5), 128.9 (C-8a), 134.8 (C-9a), 138.9 (C-3), 141.9 (C-1), 150.1 (C-7)。

【来源】 被囊动物 *Eudistoma album*

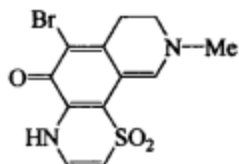
【分析方法】 80%乙醇提取物的浓缩物溶解在 10% 的盐酸水溶液中, 乙醚萃取部分用氢氧化铵碱化后二氯甲烷-甲醇 (9:1) 洗脱部分获得活性成分 Eudistalbin A。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 KB 的生长。

【参考文献】 1. Adesanya S A, et al. J Nat Prod, 1992, 55: 525

D0039 Euthyroideone B

【结构式】



【分子式】 $C_{12}H_{11}BrN_2O_3S$

【相对分子质量】 343

【理化常数及谱学数据】 mp 244°C; UV(MeOH) λ_{max} (nm) (lg ϵ): 208(4.50), 310(4.38), 436(4.60); IR (KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3424, 1636, 1561, 1503, 1417, 1383, 1361, 1222, 1113, 1028; 1H NMR (400MHz, acetone- d_6 /D $_2$ O) δ : 8.95(1H, s, H-10), 7.47(1H, d, 8.6, H-3), 5.95(1H, d, 8.6, H-2), 3.99(2H, t, 8.1, H-8), 3.76(3H, s, H-11), 3.35(1H, t, 8.1, H-7); ^{13}C NMR (100MHz, acetone- d_6 /D $_2$ O) δ : 98.7(C-2), 134.1(C-3), 130.2(C-4a), 166.8(C-5), 114.4(C-6), 139.4(C-6a), 29.3(C-7), 48.1(C-8), 155.3(C-10), 100.2(C-10a), 121.6(C-10b), 46.4(C-11); EIMS m/z (%) (+20 V) 345, 343(100, 95); HREIMS m/z found 343.96695 (calcd for $C_{12}H_{11}^{81}BrN_2O_3S$, 343.96533), 341.96747 (calcd for $C_{12}H_{11}^{79}BrN_2O_3S$, 341.96738)^[1].

【来源】 苔藓虫类 *Euthyroides episcopalis*^[1]

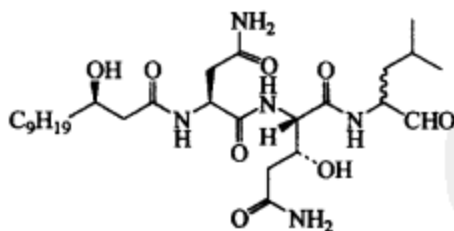
【分析方法】 样品二氯甲烷-甲醇 1:3 提取, 反相硅胶柱层析 (H_2O -MeOH- CH_2Cl_2), Sephadex LH-20 柱层析 (MeOH), HPLC (MeOH- H_2O 1:1) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 细胞毒活性, 抗 BSC-1 非洲绿猴肾细胞, 抗病毒/细胞毒检测方法 60 μ g/disc^[1]。

【参考文献】 1. Morris B D, et al. J Org Chem, 1998, 63: 9545

D0040 Fellutamide A

【结构式】



【分子式】 $C_{27}H_{50}N_5O_8$

【相对分子质量】 571

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D^{25} -12.7$ (c 1.0, MeOH); IR (KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3400, 1660, 1540; HRFABMS m/z : $[M+H]^+$ 572.3664, calcd for $C_{27}H_{50}N_5O_8$ 572.3669; 1H NMR (400MHz, DMSO- d_6) δ : Leucinal 9.38(s, CHO), 8.15(d, $J = 7.1$ Hz, NH), 4.04(m, α -H), 1.49(t, $J = 7.3$ Hz, β -H), 1.65(m, γ -H), 0.86(Me); β -Hydroxyglutamine 7.74(d, $J = 7.3$ Hz, NH), 4.24(m, α -H), 4.38(m, β -H), 5.11(m, β -OH), 2.22(m, γ -H), 7.12(brs, CONH $_2$), 6.79(brs, CONH $_2$); Asparagine 8.15(d, $J = 7.7$ Hz, NH), 4.58(m, α -H), 2.58(m, β -H), 2.49(m, β -H), 7.44(brs, CONH $_2$), 6.91(brs, CONH $_2$); 3-hydroxydodecanoic acid 2.22(m, H-22), 3.79(m, H-23), 1.2~1.4(H-24~31), 0.86(H-32); ^{13}C NMR (400MHz, DMSO- d_6) δ : Leucinal 201.8(d, CHO), 57.0(d, α -C), 36.4(t, β -C), 23.7(d, γ -C), 22.9(q, Me), 21.3(q, Me); 171.7(s, CO), 56.7(d, α -C), 67.5(d, β -C), 39.6(t, γ -C), 172.3(s, CONH $_2$); Asparagine 171.0(s, CO), 49.8(d, α -C), 36.9(t, β -C), 171.8(s, CONH $_2$); 3-hydroxydodecanoic acid 171.2(s, CO), 43.3(t, C-22), 67.4(d, C-23), 36.8(t), 31.2(t), 29.0(t), 28.9(t), 22.0(t), 13.8(q)。

【来源】 真菌 *penicillium fellutanumi*

【分析方法】 甲醇粗提物分配于环己烷-甲醇系统, 甲醇可溶部分再分配于乙酸乙酯-水, 乙酸乙酯不溶部分通过反相中压柱层析分离, 高效液相色谱法纯化 ($H_2O/MeOH$ 30 : 70) 获得活性成分 Fellutamide A。

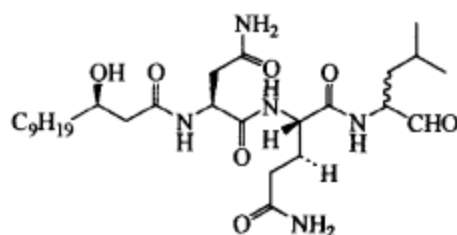
【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 P388、L1210 和 KB 的生长。

【参考文献】 1. Shigemori H, et al. Tetrahedron, 1991, 47: 8529

2. Kobayashi J. Ikagaku Oyo Kenkyu Zaidan Kenkyu Hok, 1994, 1: 181

D0041 Fellutamide B

【结构式】



【分子式】 $C_{27}H_{50}N_5O_7$

【相对分子质量】 555

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D^{25} - 24.7^\circ (c\ 0.5, MeOH)$; IR (KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3400, 1660, 1540; HRFABMS m/z : $[M+H]^+$ 556.3705, calcd for $C_{27}H_{50}N_5O_7$ 556.3700; 1H NMR (400MHz, $CDCl_3$) δ : 0.86 ($H_3-5, 6, 30$), 1.2-1.4 ($H_2-24\sim 31$), 1.49 (H_2-3), 1.65 ($H-4$), 1.76 ($H-10$), 1.97 ($H-10$), 2.11 (H_2-11), 2.22 (H_2-22), 2.46 ($H-17$), 2.56 ($H-17$), 3.79 ($H-23$), 4.04 ($H-2$), 4.20 ($H-9$), 4.59 ($H-16$), 6.70 (NH_2-13), 6.88 (NH_2-19), 7.18 (NH_2-13), 7.32 ($NH-7$), 7.39 (NH_2-19), 8.06 ($NH-14, 20$), 9.36 ($H-1$); ^{13}C NMR (400MHz, $CDCl_3$) δ : 13.8 (q, C-32), 21.3 (q), 22.0 (t), 23.0 (t), 23.9 (d, C-4), 28.7 (t, C-10), 28.9 (t), 29.0 (t), 31.2 (t), 31.3 (t, C-11), 36.8 (t), 43.3 (t, C-22), 49.8 (d, C-16), 52.4 (d, C-9), 56.6 (d, C-2), 67.4 (d, C-23), 171.0 (s, C-21), 171.7 (s, C-8), 171.8 (s, C-18), 173.8 (s, C-11), 201.6 (d, C-1)。

【来源】 真菌 *penicillium fellutanumi*

【分析方法】 甲醇粗提物分配于环己烷-甲醇系统, 甲醇可溶部分再分配于乙酸乙酯-水, 乙酸乙酯不溶部分通过反相中压柱层析分离, 高效液相色谱法 ($H_2O/MeOH$ 30 : 70) 纯化, 获得活性成分 Fellutamide B。

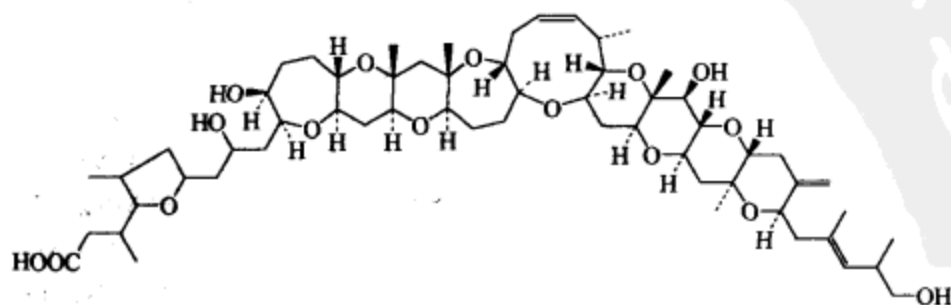
【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 P388、L1210 和 KB 的生长。

【参考文献】 1. Shigemori H, et al. Tetrahedron, 1991, 47: 8529

2. Kobayashi J. Ikagaku Oyo Kenkyu Zaidan Kenkyu Hok, 1994, 1: 181

D0042 Gambieric acid A

【结构式】



【分子式】 $C_{59}H_{92}O_{16}$

【相对分子质量】 1056

【理化常数及谱学数据】 白色固体粉末; $[\alpha]_D^{20} + 33.0^\circ$; UV(MeOH) $\lambda_{\max} < 210\text{nm}$; IR(KBr) $\nu_{\max} (\text{cm}^{-1})$: 3500, 1735; HRFABMS $[M + Na]^+ m/z$: 1079. 6330 (calcd for $[C_{59}H_{92}O_{16}Na]^+$ 1079. 6280); ^1H NMR (400MHz, CD_3OH) δ : 2. 37(H-2), 2. 04(H-1), 2. 08(H-3), 3. 48($J = 3.0, 9.0\text{Hz}$, H-4), 2. 14(m, H-5), 1. 67(H₂-6), 4. 40(m, H-7), 1. 71(H-8), 1. 50($J = 4.0, 11.0, 12.0$, H-8), 4. 16(m, H-9), 1. 82(H₂-10), 3. 73($J = 5.0, 6.0, 6.0\text{Hz}$, H-11), 3. 84($J = 4.0, 4.0, 5.0\text{Hz}$, H-12), 1. 87(H-13), 1. 80(H-13), 2. 01(H-14), 1. 68(H-14), 3. 43(H-15), 3. 41(H-16), 2. 10(H-17), 1. 53(H-17), 3. 03($J = 5.0, 12.0\text{Hz}$, H-18), 1. 97($J = 12.0\text{Hz}$, H-20), 1. 76($J = 12.0\text{Hz}$, H-20), 3. 34($J = 4.0, 11.0\text{Hz}$, H-22), 1. 84(H-23), 1. 63(H-23), 2. 08(H-24), 1. 59(H-24), 3. 26(H-25), 3. 78($J = 5.0, 5.0, 9.0\text{Hz}$, H-26), 2. 85($J = 5.0, 11.0, 12.0\text{Hz}$, H-27), 1. 91($J = 5.0, 5.0, 12.0\text{Hz}$, H-27), 5. 78($J = 5.0, 11.0, 11.0\text{Hz}$, H-28), 5. 39($J = 11.0, 11.0\text{Hz}$, H-29), 3. 08(m, H-30), 3. 43($J = 7.0, 12.0\text{Hz}$, H-31), 3. 22($J = 5.0, 12.0, 12.0\text{Hz}$, H-32), 2. 27($J = 5.0, 5.0, 11.0\text{Hz}$, H-33), 1. 68($J = 11.0, 12.0, 12.0\text{Hz}$, H-33), 3. 11($J = 5.0, 12.0\text{Hz}$, H-34), 3. 66($J = 10.0\text{Hz}$, H-36), 3. 23($J = 10.0, 10.0\text{Hz}$, H-37), 3. 43(H-38), 2. 11(H-39), 1. 57(H-39), 3. 11($J = 5.0, 12.0\text{Hz}$, H-41), 2. 42($J = 5.0, 13.0\text{Hz}$, H-42), 2. 32($J = 12.0, 13.0\text{Hz}$, H-42), 4. 18($J = 7.0, 9.0\text{Hz}$, H-44), 2. 40($J = 7.0, 14.0\text{Hz}$, H-45), 2. 13($J = 9.0, 14.0\text{Hz}$, H-45), 4. 95($J = 9.0\text{Hz}$, H-47), 2. 58(m, H-48), 3. 37(H-49), 3. 34(H-49), 1. 14($J = 8.0\text{Hz}$, H-50), 0. 83($J = 7.0\text{Hz}$, H-51), 1. 18(s, H-52), 1. 17(s, H-53), 0. 97($J = 7.0\text{Hz}$, H-54), 1. 25(s, H-55), 1. 26(s, H-56), 4. 83(brs, H-57), 4. 76(brs, H-57), 1. 62(s, H-58), 0. 92($J = 7.0\text{Hz}$, H-59); ^{13}C NMR(100MHz, CD_3OH) δ : 40. 8(t, C-2), 33. 6(d, C-3), 86. 4(d, C-4), 36. 9(d, C-5), 42. 8(t, C-6), 75. 2(d, C-7), 45. 7(t, C-8), 68. 5(d, C-9), 45. 1(t, C-10), 86. 5(d, C-11), 75. 6(d, C-12), 30. 6(t, C-13), 28. 7(t, C-14), 76. 0(d, C-15), 83. 5(d, C-16), 34. 2(t, C-17), 82. 9(d, C-18), 74. 1(s, C-19), 55. 8(t, C-20), 77. 2(s, C-21), 86. 4(d, C-22), 25. 4(t, C-23), 32. 7(t, C-24), 86. 4(d, C-25), 78. 8(d, C-26), 33. 8(t, C-27), 129. 0(d, C-28), 135. 9(d, C-29), 33. 7(d, C-30), 75. 5(d, C-31), 85. 3(d, C-32), 34. 4(t, C-33), 80. 8(d, C-34), 78. 8(s, C-35), 78. 9(d, C-36), 85. 3(d, C-37), 78. 6(d, C-38), 45. 3(t, C-39), 74. 8(s, C-40), 84. 2(d, C-41), 36. 7(t, C-42), 147. 7(s, C-43), 70. 4(d, C-44), 43. 7(t, C-45), 135. 0(s, C-46), 131. 5(d, C-47), 37. 3(d, C-48), 68. 7(t, C-49), 19. 4(q, C-50), 15. 1(q, C-51), 17. 8(q, C-52), 19. 6(q, C-53), 16. 8(q, C-54), 12. 0(q, C-55), 17. 1(q, C-56), 111. 3(t, C-57), 17. 9(q, C-58), 18. 5(q, C-59)。

【来源】 腰鞭毛虫 *Gambierdiscus toxicus*

【分析方法】 正丁醇部分经 columns of Toyopearl HW-40 and Develosil ODS 分离, 以甲醇-水 (5 : 5, 7 : 3, 10 : 0) 系统洗脱, 并通过反相和正相高效液相色谱法进一步纯化, 流动相分别为乙腈-水 (9 : 1) 和氯仿-甲醇-水 (100 : 10 : 1), 获得 Gambieric acid A。

【生物活性与毒性】 抗菌。

【参考文献】 1. Murata M, et al. *J Org Chem*, 1992, 57: 5448

2. Nagai H, et al. *J Am Chem Soc*, 1992, 114: 1102

3. Nagai H, et al. *J Antibiotics*, 1993, 46: 520

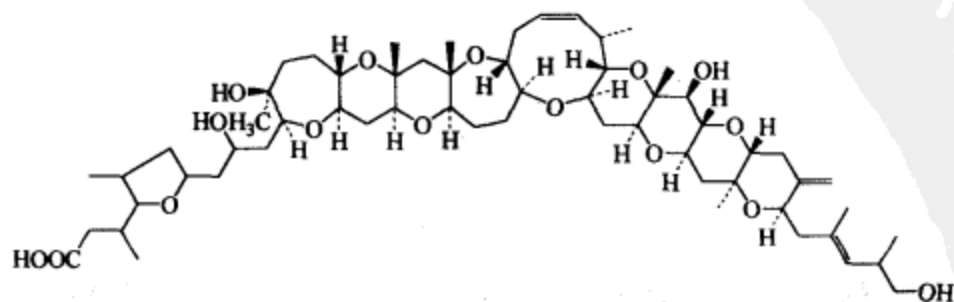
4. Nagai H, et al. *Pestic Sci*, 1995, 44: 92

5. Rainier J D, et al. *Tetrahedron Lett*, 1998, 39: 9601

6. Morohashi A, et al. *Tetrahedron*, 2000, 56: 8995

D0043 Gambieric acid B

【结构式】



【分子式】 $C_{60}H_{94}O_{16}$

【相对分子质量】 1070

【理化常数及谱学数据】 白色固体粉末; UV (MeOH) $\lambda_{\max} < 210\text{nm}$; HRFABMS $[M + Na]^+ m/z$: 1093.6430 (calcd for $[C_{60}H_{94}O_{16}Na]^+$ 1093.6440); 1H NMR (400MHz, CD_3OH) δ : 2.36 (H-2), 2.08 (H-2), 2.10 (H-3), 3.49 ($J = 3.0, 9.0\text{Hz}$, H-4), 2.18 (m, H-5), 1.65 (H_2 -6), 4.46 (m, H-7), 1.74 (H-8), 1.45 (H-8), 4.22 (m, H-9), 1.91 (H-10), 1.88 (H-10), 3.60 (H-11), 1.93 (H-13), 1.75 (H-13), 1.93 (H-14), 1.75 (H-14), 3.42 (H-15), 3.30 (H-16), 2.21 (H-17), 1.60 (H-17), 3.10 (H-18), 1.99 (H-20), 1.78 (H-20), 3.39 (H-22), 1.86 (H-23), 1.63 (H-23), 2.13 (H-24), 1.65 (H-24), 3.30 (H-25), 3.79 (H-26), 2.84 (H-27), 1.91 (H-27), 5.77 (H-28), 5.39 (H-29), 3.07 (H-30), 3.43 (H-31), 3.22 (H-32), 2.32 (H-33), 1.68 (H-33), 3.12 (H-34), 3.65 ($J = 10.0\text{Hz}$, H-36), 3.22 (H-37), 3.45 (H-38), 2.12 (H-39), 1.55 (H-39), 3.10 (H-41), 2.41 (H-42), 2.32 (H-42), 4.18 (H-44), 2.40 (H-45), 2.13 (H-45), 4.97 (H-47), 2.59 (H-48), 3.36 (H_2 -49), 1.21 (H-50), 0.85 (H-51), 1.20 (H-52), 1.19 (H-53), 0.97 (H-54), 1.25 (H-55), 1.27 (H-56), 4.82 (H-57), 4.76 (H-57), 1.62 (H-58), 0.92 (H-59), 1.14 (CH_3 -C12); ^{13}C NMR (100MHz, CD_3OH) δ : 40.8 (C-2), 33.5 (C-3), 86.5 (C-4), 36.9 (C-5), 42.9 (C-6), 75.0 (C-7), 45.6 (C-8), 68.9 (C-9), 41.1 (C-10), 88.3 (C-11), 75.6 (C-12), 41.5 (C-13), 29.7 (C-14), 77.1 (C-15), 86.4 (C-16), 34.0 (C-17), 83.4 (C-18), 74.5 (C-19), 55.8 (C-20), 77.3 (C-21), 86.6 (C-22), 25.4 (C-23), 32.6 (C-24), 86.4 (C-25), 78.8 (C-26), 33.8 (C-27), 128.9 (C-28), 135.9 (C-29), 33.7 (C-30), 75.6 (C-31), 85.3 (C-32), 34.4 (C-33), 80.8 (C-34), 78.8 (C-35), 78.9 (C-36), 85.3 (C-37), 78.6 (C-38), 45.3 (C-39), 74.8 (C-40), 84.2 (C-41), 36.8 (C-42), 147.7 (C-43), 70.5 (C-44), 43.4 (C-45), 135.0 (C-46), 131.5 (C-47), 37.3 (C-48), 68.7 (C-49), 19.5 (C-50), 15.1 (C-51), 17.9 (C-52), 19.7 (C-53), 16.8 (C-54), 12.0 (C-55), 17.1 (C-56), 111.3 (C-57), 17.9 (C-58), 18.6 (C-59), 25.8 (CH_3 -C12)。

【来源】 腰鞭毛虫 *Gambierdiscus toxicus*

【分析方法】 正丁醇部分经 columns of Toyopearl HW-40 and Develosil ODS 分离, 以甲醇-水 (5 : 5, 7 : 3, 10 : 0) 系统洗脱, 并通过反相和正相高效液相色谱法进一步纯化, 流动相分别为乙腈-水 (9 : 1) 和氯仿-甲醇-水 (100 : 10 : 1), 获得 gambieric acid B。

【生物活性与毒性】 抗菌。

【参考文献】 1. Murata M, et al. J Org Chem, 1992, 57; 5448

2. Nagai H, et al. J Am Chem Soc, 1992, 114; 1102

3. Nagai H, et al. J Antibiotics, 1993, 46; 520

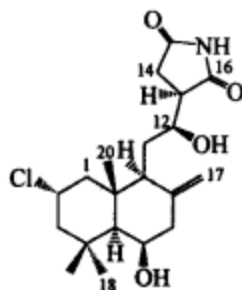
4. Nagai H, et al. Pestic Sci, 1995, 44; 92

5. Rainier J D, et al. Tetrahedron Lett, 1998, 39; 9601

6. Morohashi A, et al. Tetrahedron, 2000, 56; 8995

D0044 Haterumaimide F

【结构式】



【分子式】 $C_{20}H_{30}ClNO_4$

【相对分子质量】 383

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} + 53.7^\circ$ (c 0.35, MeOH); UV (OH) $\lambda_{\max}$: 210nm; IR (KBr)

$\nu_{\max}$ (cm^{-1}): 3410, 2920, 1710, 1705, 1405, 1180; $^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) δ : 2.06 (ddd, $J = 12.0, 4.0, 1.5$, H-1), 1.31 (t, $J = 12.0$, H-1), 4.33 (tt, $J = 12.0, 4.0$, H-2), 1.81 (ddd, $J = 12.0, 4.0, 1.5$, H-3), 1.45 (t, $J = 12.0$, H-3), 1.11 (brd, $J = 4.0$, H-5), 2.26 (dd, $J = 13.0, 2.5$, H-7), 2.15 (brd, $J = 13.0$, H-7), 1.36 (ddd, $J = 11.5, 10.5, 6.0$, H-11), 4.00 (dddd, $J = 10.5, 5.5, 5.0, 2.5$, H-12), 2.86 (ddd, $J = 9.5, 4.5, 2.5$, H-13), 2.54 (dd, $J = 17.5, 5.0$, H-14), 2.45 (dd, $J = 17.5, 9.5$, H-14), 4.86 (brs, H-17), 4.82 (brs, H-17), 0.97 (s, H-18), 1.17 (s, H-19), 0.94 (s, H-20), 11.01 (s, —NH), 4.91 (d, $J = 5.0$, OH-12), 4.15 (d, $J = 3.5$, OH-6); $^{13}\text{C NMR}$ (CDCl_3) δ : 50.7 (t, C-1), 56.9 (t, C-2), 53.6 (t, C-3), 36.5 (s, C-4), 54.9 (d, C-5), 66.6 (d, C-6), 46.9 (t, C-7), 144.3 (s, C-8), 51.7 (d, C-9), 42.4 (s, C-10), 29.9 (t, C-11), 66.9 (d, C-12), 45.3 (d, C-13), 28.9 (t, C-14), 181.0 (s, C-15), 178.7 (s, C-16), 109.5 (t, C-17), 32.9 (q, C-18), 23.8 (q, C-19), 16.9 (q, C-20); HRFABMS m/z ($\text{M} + \text{H}$)⁺ 384.1940 (calcd for $\text{C}_{20}\text{H}_{31}\text{ClNO}_4$, 384.1942)。

【来源】海鞘 *Lissoclinum* sp.

【分析方法】海鞘的丙酮提取物由水和乙酸乙酯分配，乙酸乙酯层悬浮于含水甲醇中，依次用正己烷、氯仿和正丁醇萃取。具有活性的氯仿层首先经硅胶柱层析，洗脱溶剂为正己烷/乙酸乙酯以及乙酸乙酯/甲醇。第五部分经 RPHPLC， $\text{MeOH}-\text{H}_2\text{O}-\text{CH}_3\text{CN}$ (5.5 : 3.5 : 1) 洗脱得到化合物 Haterumaimides F。

【生物活性与毒性】小鼠淋巴白血病细胞毒 (P388)， IC_{50} 值为 0.0055。

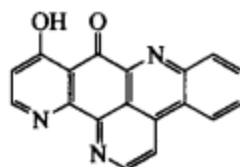
【参考文献】1. Jasim Uddin M, et al. *J Nat Prod*, 2001, 64: 1169

2. Uddin M J, et al. *Heterocycles*, 2001, 54: 1039

3. Uddin M J, et al. *Chem Lett*, 2002, 1028

D0045 11-Hydroxyascididemin

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{18}\text{H}_{10}\text{N}_3\text{O}_2$

【相对分子质量】300

【理化常数及谱学数据】黄色定形粉末; $\text{mp} > 250^\circ\text{C}$; $\text{UV}(\text{MeOH}) \lambda_{\max}$ (nm): 203 (25000), 227 (38000), 275 (18000), 285 (17000), 370 (11000); $\text{IR}(\text{film}) \nu_{\max}$ (cm^{-1}): 3067, 1674; LRMS m/z : 299.0 [M^+ , 100], 271.0 [$\text{M}^+ - \text{H}_2\text{O}$, 47]; HRFABMS m/z : 300.0768 ($\text{C}_{18}\text{H}_{10}\text{N}_3\text{O}_2$, $\text{M}^+ + 1$); $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3): 8.64 (dd, $J = 8.1, 1.8$ Hz, H-1), 8.06 (dt, $J = 8.1, 1.2$ Hz, H-2), 8.00 (dt, $J = 8.1, 1.8$ Hz, H-3), 8.73 (d, $J = 8.1, 1.2$ Hz, H-4), 8.58 (d, $J = 5.7$ Hz, H-5), 9.31 (d, $J = 5.7$ Hz, H-6), 7.51 (d, $J = 5.7$ Hz, H-9), 8.89 (d, $J = 5.7$ Hz, H-10), 13.06 (s, OH); $^{13}\text{C NMR}$ (75.4 MHz, CDCl_3): 133.3 (C-1), 132.1 (C-2), 131.5 (C-3), 123.1 (C-4), 137.8 (C-4b), 117.2 (C-5), 150.1 (C-6), 149.3 (C-7a), 154.1 (C-7b), 156.7 (C-9), 114.8 (C-10), 169.5 (C-11), 115.6 (C-11a), 181.8 (C-12), 117.7 (C-12b)。

【来源】海鞘 *Leptoclinides* sp.

【分析方法】甲醇-氯仿 (1 : 1) 的提取部分分别以环己烷-氯仿、氯仿-甲醇为流动相经硅胶柱层析反复分离，纯化，获得 11-Hydroxyascididemin。

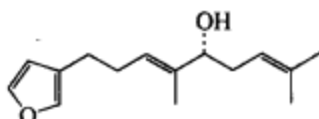
【生物活性与毒性】抗菌。

【参考文献】1. Schmitz F J, et al. *J Org Chem*, 1991, 56: 804

2. Kitahara Y, et al. *Heterocycles*, 1993, 36: 943

D0046 8-Hydroxydendrolasin

【结构式】



【分子式】 $C_{15}H_{22}O_2$

【相对分子质量】 234

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} + 15.5$ (c 0.004, MeOH); UV (MeOH) λ_{max} (lg ϵ) (nm): 274 (1.03), 210 (2.53); IR (dry film) ν_{max} : 3400~3600 cm^{-1} ; 1H NMR (300 MHz, $CDCl_3$) δ : 7.34 (1H, s, H-1), 7.21 (1H, s, H-15), 6.28 (1H, s, H-2), 5.38 (1H, t, 6.9, H-6), 5.05 (1H, t, 7.1, H-10), 3.94 (1H, t, 6.7, H-8), 2.48 (2H, m, H-4), 2.29 (2H, m, H-5), 2.23 (2H, m, H-9), 1.72 (3H, s, H-12), 1.64 (3H, s, H-13), 1.61 (3H, s, H-14); ^{13}C NMR (75 MHz, $CDCl_3$) δ : 142.4 (C-1), 110.8 (C-2), 124.5 (C-3), 27.8 (C-4), 24.5 (C-5), 125.2 (C-6), 137.3 (C-7), 77.1 (C-8), 33.8 (C-9), 120.1 (C-10), 137.4 (C-11), 24.5 (C-12), 17.7 (C-13), 11.3 (C-14), 138.5 (C-15); LREIMS m/z : (relative intensity) 234 (1), 233 (2), 217 (6), 165 (57), 135 (18), 119 (16), 81 (100); HREIMS (M)⁺ 234.1620, calcd. for $C_{15}H_{22}O_2$, found 234.1624.

【来源】 软体动物 *Ritterella rete*^[1]

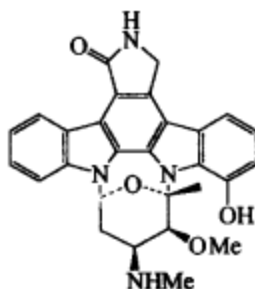
【分析方法】 样品甲醇提取, hexane-含 10% 甲醇水萃取, 甲醇水萃取部分 CH_2Cl_2 、BuOH 萃取, CH_2Cl_2 部分反复硅胶闪柱层析 (hexane-EtOAc), 正相 HPLC (hexane-EtOAc 9:1) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 细胞毒活性, 抗 P388 细胞 IC_{50} 1 $\mu g/mL$ ^[1]。

【参考文献】 1. Lenis L A, et al. Tetrahedron, 1998, 54: 5385

D0047 11-Hydroxystaurosporine

【结构式】



【分子式】 $C_{28}H_{26}N_4O_4$

【相对分子质量】 482

【理化常数及谱学数据】 淡黄色无定形固体; $[\alpha]_D + 10.3$ (c 0.3, MeOH); UV λ_{max} (MeOH) (nm): 212 (29200), 246 (25600), 256 (24500), 292 (50500), 300 (46400), 334 (sh) (10500), 356 (9800), 374 (11100); IR (KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3400 (br), 1660, 1572, 1453, 1340, 745; HRFABMS m/z : 483 calcd for $C_{28}H_{27}O_4N_4$ (MH⁺); CD 372 nm (-5.97), 355 (-4.33), 339 (-3.48), 300 (+8.12), 277 (13.67), 247 (-6.05), 232 (+1.39), 223 (-9.09); 1H NMR (DMSO- d_6) δ : 7.39 (dt, $J = 8.2$ Hz, H-1), 7.45 (ddd, $J = 1.2, 8.2, 8.2$ Hz, H-2), 7.27 (ddd, $J = 1.0, 8.2, 8.0$ Hz, H-3), 9.24 (ddd, $J = 8.0, 1.2, 7.0$ Hz, H-4), 8.45 (brs, H-6), 5.10, 4.95 (AB q, $J = -17.7$ Hz, H-7), 7.52 (dd, $J = 7.7, 1.0$ Hz, H-8), 7.20 (t, $J = 7.7$ Hz, H-9), 6.95 (dd, $J = 7.7, 1.0$ Hz, H-10), 10.6 (brs, 11-OH), 4.48 (dd, $J = 1.7, 1.5$ Hz, H-3'), 3.38 (ddd, $J = 1.7, 8.0, 11.7$ Hz, H-4'), 3.10 (dddd, $J = -14.5, 9.2, 8.0, 1.5$ Hz, H-5' α), 2.39 (ddd, $J = -14.5, 11.7, 4.6$ Hz, H-5' β), 6.56 (dd, $J = 9.2, 4.6$ Hz, H-6'), 2.39 (s, 2'-CH₃), 3.06 (s, 3'-OCH₃), 2.55 (s, 4'-NCH₃), 1.55 (brs, 4'-NH); ^{13}C NMR (DMSO- d_6) δ : 109.4 (d, C-1), 126.5 (d, C-2), 120.8 (d, C-3), 127.1 (d, C-4), 124.7 (s, 4a), 127.0 (s, C-4b), 129.5 (s, C-4c), 175.5 (s, C-5), 47.3 (t, C-7), 134.4 (s, C-7a), 116.0 (s, C-7b), 128.6 (s, C-7c), 113.9 (d, C-8), 123.0 (d, C-9), 113.3 (d, C-10), 144.1 (s, C-11), 129.6 (s, C-11a), 132.3 (s, C-12a), 127.3 (s, C-12b), 138.9 (s, C-13a), 96.3 (s, C-2'), 82.7 (d, C-3'), 55.4 (d, C-4'), 30.4 (t, C-5'), 83.5 (d, C-

6'), 30.4(q, 2'-CH₃), 60.6(q, 3'-OCH₃), 33.0(q, 4'-NCH₃).

【来源】被囊动物 *Eudistoma* sp.

【分析方法】甲醇-水 (4.5 : 1) 提取物经硅胶柱层析 (hexane/EtOAc 7 : 3), 反相减压柱色谱 (MeOH/H₂O 75 : 25) 和制备型高效液相色谱 (CHCl₃/MeOH 20 : 1) 分离, 获得活性成分 11-Hydroxystaurosporine.

【生物活性与毒性】细胞毒蛋白动力酶 C 抑制剂。

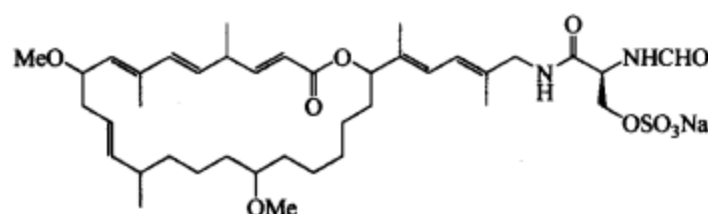
【参考文献】1. Kinnel R B, et al. J Org Chem, 1992, 57: 6327²

2. Shu Y Z. J Nat Prod, 1998, 61: 1053

3. Schupp P, et al. Biological activity of new staurosporine derivatives from the ascidian *Eudistoma toaleensis* and the marine flatworm *Pseudoceros* sp. (Spain, September) See 11770[#], 1999, 59

D0048 Iejimalide C

【结构式】



【分子式】C₄₀H₅₇O₁₀N₂SNa

【相对分子质量】780

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D^{20} - 56^\circ$ (c 0.13, MeOH); UV (MeOH) $\lambda_{\max}$: 231nm (28000); IR (film) $\nu_{\max}$ (cm⁻¹): 3400, 1715, 1660, 1260, 1220; ¹H NMR (CD₃OD) δ : 5.84 (d, J = 15.4Hz, H-2), 6.73 (dd, J = 15.4, 3.5Hz, H-3), 3.15 (m, H-4), 5.48 (dd, J = 13.5, 8.9Hz, H-5), 5.85 (d, J = 15.4Hz, H-6), 5.00 (d, J = 9.4Hz, H-8), 4.16 (dd, J = 11.3, 10.6Hz, H-9), 2.20 (m, H-10), 2.50 (m, H-10), 5.55 (brdd, J = 13.5, 9.0Hz, H-11), 6.36 (d, J = 15.1Hz, H-12), 5.12 (dd, J = 10.7, 5.6Hz, H-14), 2.45 (m, H-15), 1.70 (m, H-15), 1.28 (m, H-16), 1.95 (m, H-16), 3.04 (m, H-17), 5.28 (dd, J = 15.1, 7.8Hz, H-18), 5.80 (dd, J = 14.3, 6.4Hz, H-19), 5.80 (dd, J = 14.5, 10.5Hz, H-20), 5.28 (dd, J = 14.0, 5.0Hz, H-21), 5.50 (m, H-22), 5.00 (d, J = 10.0Hz, H-23), 6.20 (d, J = 10.6Hz, H-26), 6.09 (brd, J = 11.4Hz, H-27), 6.00 (d, J = 10.9Hz, H-28), 3.75 (d, J = 5.5Hz, H-29), 4.60 (m, H-32), 8.08 (s, H-34), 4.16 (m, H₂-35), 1.68 (s, H₃-36), 1.72 (s, H₃-37), 0.81 (d, J = 6.2Hz, H₃-38), 2.94 (s, H₃-39), 1.69 (s, H₃-40), 3.25 (s, H₃-4), 1.69 (s, H₃-42), 1.00 (d, H₃-43); ¹³C NMR (CD₃OD) δ : 167.8 (s, C-1), 120.2 (d, C-2), 152.2 (d, C-3), 41.8 (d, C-4), 132.9 (d, C-5), 133.6 (d, C-6), 134.1 (s, C-7), 130.7 (d, C-8), 73.9 (d, C-9), 41.2 (t, C-10), 126.0 (d, C-11), 129.9 (d, C-12), 137.0 (s, C-13), 137.3 (d, C-14), 24.0 (t, C-15), 36.0 (t, C-16), 81.4 (d, C-17), 132.4 (d, C-18), 131.8 (d, C-19), 129.3 (d, C-20), 135.6 (d, C-21), 40.2 (d, C-22), 84.6 (d, C-23), 134.1 (s, C-25), 126.6 (d, C-26), 121.5 (d, C-27), 136.7 (s, C-28), 47.7 (t, C-29), 171.0 (s, C-31), 53.5 (d, C-32), 163.9 (d, C-34), 68.0 (t, C-35), 13.4 (q, C-36), 12.3 (q, C-37), 17.2 (q, C-38), 57.0 (q, C-39), 20.2 (q, C-40), 56.1 (q, C-41), 14.3 (q, C-42), 21.7 (q, C-43).

【来源】被囊动物 *Eudistoma* cf. *rigida*

【分析方法】甲醇提取物的氯仿可溶部分经硅胶柱色谱法分离 (CHCl₃/n-BuOH/AcOH/H₂O 1.5 : 6 : 1 : 1), 反相高效液相色谱 (CH₃CN/H₂O 40 : 60) 纯化获得活性成分 Iejimalide C.

【生物活性与毒性】抑制肿瘤细胞 L1210 和 KB 的生长。

【参考文献】1. Kikuchi Y, et al. Tetrahedron Lett, 1991, 32: 797

2. Kobayashi J, et al. J Org Chem, 1988, 53: 6147

3. Kobayashi J, et al. Tennen Yuki Kagobutsu Toronkai Koen Yosh, 1989, 31: 348

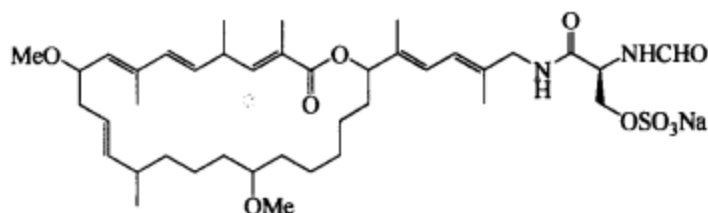
4. Cottard M, et al. Tetrahedron Lett, 1995, 36: 3115

5. Mendlik M T, et al. Tetrahedron Lett, 1996, 38: 6375

6. Tsuda M, et al. Tetrahedron Lett, 2003, 44: 1395

D0049 Iejimalide D

【结构式】

【分子式】 $C_{41}H_{59}O_{10}N_2SNa$

【相对分子质量】 794

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D^{20} - 39^\circ$ (c 0.16, MeOH); UV (MeOH) λ_{max} : 241 nm (29000); IR (film) ν_{max} (cm^{-1}): 3400, 1715, 1660, 1260, 1220; 1H NMR (CD_3OD) δ : 5.84 (d, $J = 15.4$ Hz, H-2), 6.60 (dd, $J = 10.3, 1.1$ Hz, H-3), 3.15 (m, H-4), 5.48 (dd, $J = 13.5, 8.9$ Hz, H-5), 5.85 (d, $J = 15.4$ Hz, H-6), 5.00 (d, $J = 9.4$ Hz, H-8), 4.16 (dd, $J = 11.3, 10.6$ Hz, H-9), 2.20 (m, H-10), 2.50 (m, H-10), 5.55 (brdd, $J = 13.5, 9.0$ Hz, H-11), 6.36 (d, $J = 15.1$ Hz, H-12), 5.12 (dd, $J = 10.7, 5.6$ Hz, H-14), 2.45 (m, H-15), 1.70 (m, H-15), 1.28 (m, H-16), 1.95 (m, H-16), 3.04 (m, H-17), 5.28 (dd, $J = 15.1, 7.8$ Hz, H-18), 5.80 (dd, $J = 14.3, 6.4$ Hz, H-19), 5.80 (dd, $J = 14.5, 10.5$ Hz, H-20), 5.28 (dd, $J = 14.0, 5.0$ Hz, H-21), 5.50 (m, H-22), 5.00 (d, $J = 10.0$ Hz, H-23), 6.20 (d, $J = 10.6$ Hz, H-26), 6.09 (brd, $J = 11.4$ Hz, H-27), 6.00 (d, $J = 10.9$ Hz, H-28), 3.75 (d, $J = 5.5$ Hz, H-29), 4.60 (m, H-32), 8.08 (s, H-34), 4.16 (m, H-35), 1.68 (s, H-36), 1.72 (s, H-37), 0.81 (d, $J = 6.2$ Hz, H-38), 2.94 (s, H-39), 1.69 (s, H-40), 3.25 (s, H-41), 1.69 (s, H-42), 1.00 (d, H-43), 1.93 (s, H-44); ^{13}C NMR (CD_3OD) δ : 167.8 (s, C-1), 127.1 (s, C-2), 147.0 (d, C-3), 39.1 (d, C-4), 132.9 (d, C-5), 133.6 (d, C-6), 134.1 (s, C-7), 130.7 (d, C-8), 73.9 (d, C-9), 41.2 (t, C-10), 126.0 (d, C-11), 129.9 (d, C-12), 137.0 (s, C-13), 137.3 (d, C-14), 24.0 (t, C-15), 36.0 (t, C-16), 81.4 (d, C-17), 132.4 (d, C-18), 131.8 (d, C-19), 129.3 (d, C-20), 135.6 (d, C-21), 40.2 (d, C-22), 84.6 (d, C-23), 134.1 (s, C-25), 126.6 (d, C-26), 121.5 (d, C-27), 136.7 (s, C-28), 47.7 (t, C-29), 171.0 (s, C-31), 53.5 (d, C-32), 163.9 (d, C-34), 68.0 (t, C-35), 13.4 (q, C-36), 12.3 (q, C-37), 17.2 (q, C-38), 57.0 (q, C-39), 20.2 (q, C-40), 56.1 (q, C-41), 14.3 (q, C-42), 21.7 (q, C-43), 12.2 (C-44).

【来源】 被囊动物 *Eudistoma cf. rigida*【分析方法】 甲醇提取物的氯仿可溶部分经硅胶柱色谱法分离 ($CHCl_3/n-BuOH/AcOH/H_2O$ 1.5 : 6 : 1 : 1), 反相高效液相色谱 (CH_3CN/H_2O 40 : 60) 纯化, 获得活性成分 Iejimalide D。

【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 L1210 和 KB 的生长。

【参考文献】 1. Kikuchi Y, et al. Tetrahedron Lett, 1991, 32: 797

2. Kobayashi J, et al. J Org Chem, 1988, 53: 6147

3. Kobayashi J, et al. Tennen Yuki Kagobutsu Toronkai Koen Yosh, 1989, 31: 348

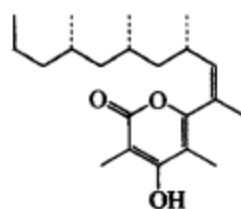
4. Cottard M, et al. Tetrahedron Lett, 1995, 36: 3115

5. Mendlik MT, et al. Tetrahedron Lett, 1997, 38: 6375

6. Tsuda M, et al. Tetrahedron Lett, 2003, 44: 1395

D0050 Isopectinatone

【结构式】



【分子式】 $C_{21}H_{34}O_3$

【相对分子质量】 334

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} + 35.0^\circ$ (c 0.10, $CHCl_3$); UV ($CHCl_3$) λ_{max} (ϵ) (nm): 294 (6569), 238 (2879); IR (film) ν_{max} (cm^{-1}): 3200, 2925, 1656, 1577, 1545, 1231, 1126; 1H NMR (400MHz, $CDCl_3$) δ : 5.33 (1H, dq, 10.4, 1.5, H-8), 2.16 (1H, m, H-9), 2.00 (3H, s, H-18), 1.92 (3H, s, H-17), 1.90 (3H, d, 1.5, H-19), 1.43 (1H, m, H-11), 1.42 (1H, m, H-13), 1.22 (3H, m, H-10, 15), 1.20 (1H, m, H-14), 1.06 (1H, m, H-12), 1.00 (1H, m, H-14), 0.95 (3H, d, 6.6, H-20), 0.88 (1H, m, H-10), 0.87 (3H, t, 7.3, H-16), 0.86 (1H, m, H-12), 0.79 (3H, d, 6.6, H-21), 0.66 (3H, d, 6.6, H-22); ^{13}C NMR (100MHz, $CDCl_3$) δ : 165.4 (C-2), 98.8 (C-3), 163.6 (C-4), 106.4 (C-5), 156.9 (C-6), 126.4 (C-7), 140.8 (C-8), 32.0 (C-9), 45.5 (C-10), 29.7 (C-11), 44.8 (C-12), 27.7 (C-13), 39.4 (C-14), 20.0 (C-15), 14.4 (C-16), 8.4 (C-17), 10.7 (C-18), 21.9 (C-19), 21.2 (C-20), 20.0 (C-21), 20.4 (C-22); EIMS (70 eV) m/z (rel. int.) 334 (M^+ , 5), 278 (4), 263 ($M^+ - C_5H_{11}$, 2), 221 ($M^+ - C_8H_{17}$, 7), 221 ($M^+ - C_9H_{19}$, 5), 181 (60), 168 (100), 152 (14), 123 (17); HREIMS m/z M^+ Obsd. 334.2507, $C_{21}H_{34}O_3$, requires 334.2508^[1].

【来源】 肺螺纲动物 *Siphonaria pectinata*^[1]

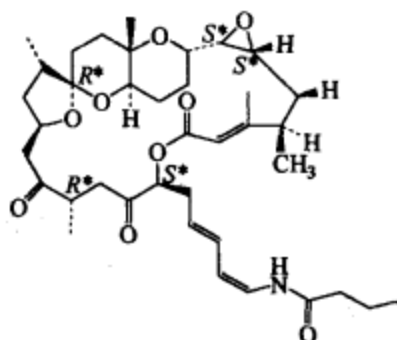
【分析方法】 样品丙酮提取, 水-乙醚萃取, 乙醚萃得部分硅胶柱层析 (梯度 hexane-Et₂O), 正相 HPLC (hexane-EtOAc 7:3) 得到纯化合物^[1].

【生物活性与毒性】 具有细胞毒活性, 抗老鼠的淋巴瘤细胞 P-388、人肺癌细胞 A-549、人结肠癌细胞 HT-29、人黑肿瘤细胞 MEL-28 ED₅₀ 2.5 $\mu g/mL$ ^[1].

【参考文献】 1. Paul M C, et al. Tetrahedron, 1997, 53: 2303

D0051 Lituarine A

【结构式】



【分子式】 $C_{38}H_{55}O_9N$

【相对分子质量】 669

【理化常数及谱学数据】 mp 83~85°C; UV λ_{max} (MeOH): 270 (16857) nm; IR (film) ν_{max} (cm^{-1}): 3390, 3330, 3050, 2960, 2920, 2860, 1740~1670, 1650, 1620, 1560, 1500, 1380, 1270, 980, 740, 700; FABMS m/z : 670 ($M+H$)⁺; 1H NMR (DMSO- d_6) δ : 5.85 (d, J = 0.9 Hz, H-2), 2.57 (d, H-4), 1.99~1.16 (d, J = 7.5 Hz, H-5), 2.70 (dd, J = 2.2 Hz, H-6), 2.42 (dd, J = 6.7 Hz, H-7), 3.06 (ddd, J = 2.5, 11.8 Hz, H-8), 1.53~1.67 (m, H-9), 1.32 (m, H-10), 3.60 (dd, J = 11.8, 4.3 Hz, H-11), 1.58~1.68 (m, H-13), 1.56 (m, H-14), 1.96 (m, J = 7.0 Hz, H-16), 1.49~1.84 (m, H-17), 4.38 (q, J = 7.8 Hz, H-18), 2.28~2.46 (dd, J = 17.1, 9.6 Hz, H-19), 2.62 (m, J = 7.9 Hz, H-21), 2.90 (dd, J = 16.2, 4.0~7.4 Hz, H-22), 5.22 (t, J = 5.2 Hz, H-24), 2.64~2.75 (m, H-25), 5.50 (m, J = 6.3~8.6 Hz, H-26), 6.75 (dd, J = 11.8, 14.9 Hz, H-27), 5.18 (dd, J = 9.5 Hz, H-28), 6.50 (t, J = 9.7 Hz, H-29), 2.23 (t, J = 7.2 Hz, H-31), 1.53 (m, H-32), 0.89 (t, J = 7.4 Hz, H-33), 1.97 (d, J = 0.9 Hz, H-34), 1.01 (s, H-35), 1.02 (s, H-36), 0.81 (d, J = 7.0 Hz, H-37), 1.03 (d, J = 7.9 Hz, H-38), 9.65 (d, J = 9.7 Hz, NH); ^{13}C NMR (DMSO- d_6) δ : 164.7 (s, C-1), 116.1 (d, C-2), 162.9 (s, C-3), 40.1 (d, C-4), 35.9 (t, C-5), 52.8 (d, C-6), 60.2 (d, C-7), 72.2 (d, C-8), 34.5 (t, C-9), 23.4

(t, C-10), 70.6(d, C-11), 71.5(s, C-12), 28.2(t, C-13), 27.7(t, C-14), 107.4(s, C-15), 41.7(d, C-16), 36.8(t, C-17), 73.6(d, C-18), 45.6(t, C-19), 210.7(s, C-20), 41.7(d, C-21), 41.3(t, C-22), 204.2(s, C-23), 77.1(d, C-24), 33.3(t, C-25), 124.6(d, C-26), 127.9(d, C-27), 108.0(d, C-28), 121.5(d, C-29), 170.0(s, C-30), 36.8(t, C-31), 18.3(t, C-32), 13.5(q, C-33), 13.1(q, C-34), 20.0(q, C-35), 13.4(q, C-36), 15.1(q, C-37), 17.0(q, C-38)。

【来源】 海鳃 *Lituarina australasiae*

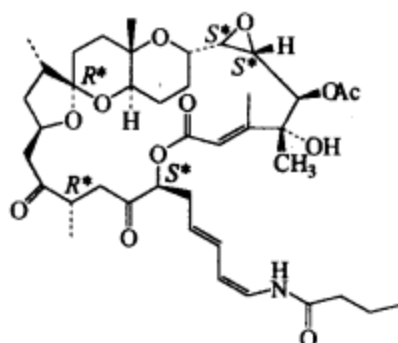
【分析方法】 80%乙醇粗提物的二氯甲烷可溶部分经硅胶柱色谱法 (CH_2Cl_2 -MeOH 0~3%) 分离, 反相高效液相色谱法纯化获得活性成分 Lituarine A。

【生物活性与毒性】 抗菌, 抑制肿瘤细胞 KB 的生长。

【参考文献】 1. Vidal J P, et al. J Org Chem, 1992, 57: 5857

D0052 Lituarine B

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{40}\text{H}_{57}\text{O}_{12}\text{N}$

【相对分子质量】 743

【理化常数及谱学数据】 mp 126~129°C; UV λ_{max} (MeOH): 269.5(26600) nm; IR (film) ν_{max} (cm^{-1}): 3450, 3350, 3060, 2970, 2940, 2880, 1750~1670, 1650, 1620, 1500, 1460, 1370, 1235, 910, 730, 700; FABMS m/z : 744($\text{M} + \text{H}$)⁺, 726($\text{M} - \text{H}_2\text{O} + \text{H}$)⁺, 702($\text{M} - \text{COCH}_3 + 2\text{H}$)⁺; ¹H NMR (DMSO- d_6) δ : 6.25(d, $J = 0.9\text{Hz}$, H-2), 4.59(d, $J = 7.5\text{Hz}$, H-5), 3.01(dd, $J = 2.2\text{Hz}$, H-6), 2.66(dd, $J = 6.7\text{Hz}$, H-7), 3.11(ddd, $J = 2.5, 11.8\text{Hz}$, H-8), 1.47~1.72(m, H-9), 1.32(m, H-10), 3.60(dd, $J = 11.8, 4.3\text{Hz}$, H-11), 1.61~1.72(m, H-13), 1.49(m, H-14), 1.94(m, $J = 7.0\text{Hz}$, H-16), 1.53~1.85(m, H-17), 4.35(q, $J = 7.8\text{Hz}$, H-18), 2.33~2.42(dd, $J = 17.1, 9.6\text{Hz}$, H-19), 2.68(m, $J = 7.9\text{Hz}$, H-21), 2.94(dd, $J = 16.2, 4.0\sim 7.4\text{Hz}$, H-22), 5.26(t, $J = 5.2\text{Hz}$, H-24), 2.61~2.75(m, H-25), 5.47(m, $J = 8.6\sim 6.3\text{Hz}$, H-26), 6.74(dd, $J = 11.8, 14.9\text{Hz}$, H-27), 5.16(dd, $J = 9.5\text{Hz}$, H-28), 6.52(t, $J = 9.7\text{Hz}$, H-29), 2.23(t, $J = 7.2\text{Hz}$, H-31), 1.55(m, H-32), 0.89(t, $J = 7.4\text{Hz}$, H-33), 2.05(d, $J = 0.9\text{Hz}$, H-34), 1.13(s, H-35), 1.02(s, H-36), 0.81(d, $J = 7.0\text{Hz}$, H-37), 1.04(d, $J = 7.9\text{Hz}$, H-38), 2.13(s, H-40), 9.65(d, $J = 9.7\text{Hz}$, NH); ¹³C NMR (DMSO- d_6) δ : 165.0(s, C-1), 115.2(d, C-2), 161.1(s, C-3), 76.9(s, C-4), 77.2(d, C-5), 53.2(d, C-6), 58.5(d, C-7), 72.2(d, C-8), 34.4(t, C-9), 23.2(t, C-10), 70.5(d, C-11), 71.7(s, C-12), 28.2(t, C-13), 27.6(t, C-14), 107.4(s, C-15), 41.7(d, C-16), 36.9(t, C-17), 73.6(d, C-18), 45.6(t, C-19), 210.8(s, C-20), 41.7(d, C-21), 41.4(t, C-22), 204.1(s, C-23), 77.2(d, C-24), 33.4(t, C-25), 124.7(d, C-26), 127.8(d, C-27), 108.1(d, C-28), 121.5(d, C-29), 169.8(s, C-30), 36.8(t, C-31), 18.3(t, C-32), 13.4(q, C-33), 15.5(q, C-34), 23.5(q, C-35), 13.5(q, C-36), 15.0(q, C-37), 16.9(q, C-38), 170.0(s, C-39), 20.5(q, C-40)。

【来源】 海鳃 *Lituarina australasiae*

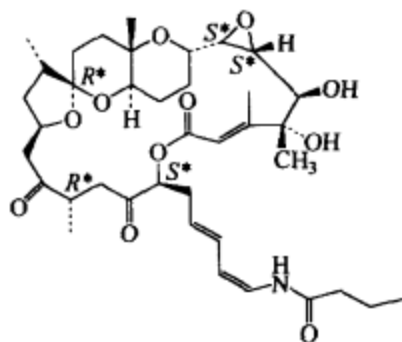
【分析方法】 80%乙醇粗提物的二氯甲烷可溶部分经硅胶柱色谱法 (CH_2Cl_2 -MeOH 0~3%) 分离, 反相高效液相色谱法纯化获得活性成分 Lituarine B。

【生物活性与毒性】 抗菌, 抑制肿瘤细胞 KB 的生长。

【参考文献】 1. Vidal J P, et al. J Org Chem, 1992, 57: 5857

D0053 Lituarine C

【结构式】



【分子式】 $C_{38}H_{55}O_{11}N$

【相对分子质量】 701

【理化常数及谱学数据】 mp 153~157°C; UV λ_{max} (MeOH): 269(22419) nm; IR (KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3440, 3350, 3060, 2970, 2940, 2880, 1740~1670, 1650, 1620, 1505, 1460, 1380, 1260, 1210, 1160, 1090, 980, 770, 660; FABMS m/z : 702 ($M+H$)⁺; ¹H NMR (DMSO- d_6) δ : 6.22 (d, $J = 0.9$ Hz, H-2), 3.03 (d, $J = 7.5$ Hz, H-5), 2.78 (dd, $J = 2.2$ Hz, H-6), 2.50 (dd, $J = 6.7$ Hz, H-7), 3.06 (ddd, $J = 2.5, 11.8$ Hz, H-8), 1.50~1.60 (m, H-9), 1.36 (m, H-10), 3.62 (dd, $J = 11.8, 4.3$ Hz, H-11), 1.58~1.71 (m, H-13), 1.48~1.62 (m, H-14), 1.94 (m, $J = 7.0$ Hz, H-16), 1.55-1.85 (m, H-17), 4.39 (q, $J = 7.8$ Hz, H-18), 2.32~2.48 (dd, $J = 17.1, 9.6$ Hz, H-19), 2.70 (m, $J = 7.9$ Hz, H-21), 2.94 (dd, $J = 16.2, 4.0$ Hz, H-22), 5.22 (t, $J = 5.2$ Hz, H-24), 2.60~2.75 (m, H-25), 5.50 (m, $J = 6.3$ ~8.6 Hz, H-26), 6.73 (dd, $J = 11.8, 14.9$ Hz, H-27), 5.18 (dd, $J = 9.5$ Hz, H-28), 6.50 (t, $J = 9.7$ Hz, H-29), 2.22 (t, $J = 7.2$ Hz, H-31), 1.54 (m, H-32), 0.88 (t, $J = 7.4$ Hz, H-33), 1.98 (d, $J = 0.9$ Hz, H-34), 1.22 (s, H-35), 1.02 (s, H-36), 0.82 (d, $J = 7.0$ Hz, H-37), 1.04 (d, $J = 7.9$ Hz, H-38), 9.73 (d, $J = 9.7$ Hz, NH); ¹³C NMR (DMSO- d_6) δ : 165.4 (s, C-1), 114.2 (d, C-2), 162.8 (s, C-3), 80.0 (d, C-4), 74.9 (t, C-5), 56.3 (d, C-6), 58.3 (d, C-7), 72.7 (d, C-8), 34.5 (t, C-9), 23.3 (t, C-10), 70.7 (d, C-11), 71.6 (s, C-12), 28.3 (t, C-13), 27.7 (t, C-14), 107.4 (s, C-15), 41.7 (d, C-16), 37.0 (t, C-17), 73.6 (d, C-18), 45.8 (t, C-19), 210.8 (s, C-20), 41.6 (d, C-21), 41.5 (t, C-22), 204.3 (s, C-23), 77.1 (d, C-24), 33.4 (t, C-25), 124.8 (d, C-26), 127.8 (d, C-27), 108.1 (d, C-28), 121.5 (d, C-29), 170.0 (s, C-30), 36.8 (t, C-31), 18.3 (t, C-32), 13.4 (q, C-33), 15.7 (q, C-34), 24.3 (q, C-35), 13.5 (q, C-36), 15.1 (q, C-37), 16.9 (q, C-38).

【来源】 海鳃 *Lituarina australasiae*

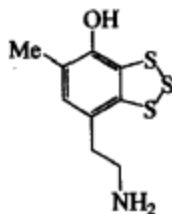
【分析方法】 80%乙醇粗提物的二氯甲烷可溶部分经硅胶柱色谱法 (CH_2Cl_2 -MeOH 0~3%) 分离, 反相高效液相色谱法纯化获得活性成分 Lituarine C

【生物活性与毒性】 抗菌, 抑制肿瘤细胞 KB 的生长。

【参考文献】 1. Vidal J P, et al. J Org Chem, 1992, 57: 5857

D0054 Lissoclinotoxin A

【结构式】



【分子式】 $C_9H_{11}NO_2S_3$

【相对分子质量】 260

【理化常数及谱学数据】 黄色固体粉末; mp 245~250°C; UV(EtOH) λ_{max} (nm): 215(10440), 246(8874); HRMS m/z : 260.9945(M^+), $C_9H_{11}NO_2S_3$; EIMS m/z : 261(M^+), 244($M^+ - NH_3$), 197($M^+ - 2S$); 1H NMR(300MHz, DMSO- d_6) δ : 6.97(s, H-5), 3.63(s, OMe), 3.27, 3.08.

【来源】 被囊动物 *Lissoclinum perforatum*

【分析方法】 甲醇提取物经硅胶柱层析梯度洗脱, 制备高效液相色谱法(氯仿-甲醇 8:2)得到活性成分 Lissoclinotoxin A。

【生物活性与毒性】 抗菌。

【参考文献】 1. Litaudon M, et al. Tetrahedron Lett, 1991, 32: 911

2. Litaudon M, et al. Tetrahedron, 1994, 50: 5323

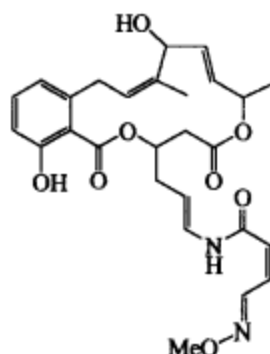
3. Trigalo F, et al. Nat Prod Lett, 1994, 4: 101

4. Guyot M. Pure Appl Chem, 1994, 4: 2223

5. Ford P W, et al. J Org Chem, 1994, 59: 5955

D0055 Lobatamide A

【结构式】



【分子式】 $C_{27}H_{32}N_2O_8$

【相对分子质量】 512

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D^{25} - 7.9^\circ$ (c 0.24, MeOH); UV(MeOH) λ_{max} : 273nm (lg ϵ 4.22); IR(film) ν_{max} (cm^{-1}): 3590~3128(br), 2974, 2933, 1739, 1656, 1523, 1461, 1451, 1374, 1266, 1215, 1169, 1113, 1042; 1H NMR(500MHz, MeOH- d_4) δ : 8.95(1H, d, 11.2, H-26), 7.14(1H, t, 7.8, H-5), 6.82(1H, d, 14.2, H-21), 6.68(1H, d, 7.8, H-4), 6.63(1H, d, 7.8, H-6), 6.45(1H, dd, 11.7, 11.2, H-25), 6.04(1H, d, 11.7, H-24), 5.66(1H, dd, 15.1, 8.8, H-12), 5.58(1H, m, H-18), 5.50(1H, dd, 15.1, 8.3, H-13), 5.34(1H, dt, 14.2, 7.8, H-20), 5.23(1H, dq, 8.3, 6.3, H-14), 5.17(1H, m, H-9), 4.78(1H, d, 8.8, H-11), 3.91(3H, s, H-28), 3.21(1H, dd, 17.1, 8.3, H-8a), 2.93(1H, brd, 17.1, H-8b), 2.67(1H, d, 16.6, H-17a), 2.59(1H, dd, 16.6, 10.7, H-17b), 2.48(1H, dd, 7.3, 6.3, H-19), 1.79(3H, s, H-29), 1.35(3H, d, 6.3, H-30); ^{13}C NMR(125MHz, MeOH- d_4) δ : 170.0(C-1), 122.3(C-2), 156.7(C-3), 11.4(C-4), 131.8(C-5), 120.8(C-6), 141.2(C-7), 33.1(C-8), 125.6(C-9), 139.4(C-10), 73.3(C-11), 135.0(C-12), 132.7(C-13), 73.8(C-14), 171.9(C-16), 38.9(C-17), 73.0(C-18), 35.6(C-19), 109.9(C-20), 126.9(C-21), 164.2(C-23), 126.1(C-24), 135.6(C-25), 148.7(C-26), 62.7(C-28), 19.6(C-29), 20.2(C-30); FABMS(magic bullet) m/z 535($M + Na^+$, 8), 513(MH^+ , 16), 495(15), 460(20), 289(65), 239(22), 176(30), 154(100), 138(100), 107(83); HRFABMS(noba) MH^+ m/z 513.2257 for $C_{27}H_{33}N_2O_8$ $\Delta + 2.0mmu$ [1].

【来源】 被囊动物 *Aplidium lobatum* [1]

【生物活性与毒性】 具有细胞毒活性 [1].

【参考文献】 1. Galinis D L, et al. J Org Chem, 1997, 62: 8968

2. McKee T C, et al. J Org Chem, 1998, 63: 7805

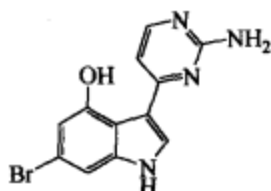
3. Raw S A, et al. Tetrahedron Lett, 2000, 41: 10357

4. Shen R, et al. J Am Chem Soc, 2002, 124: 5650

5. Shen R, et al. J Am Chem Soc, 2003, 125: 7889

D0056 Meridianin B

【结构式】



【分子式】 $C_{12}H_9BrN_4O$

【相对分子质量】 305

【理化常数及谱学数据】 黄色粉末; mp 190°C; UV(CHCl₃) λ_{max} (lg ϵ) (nm): 246(3.87), 354(3.71); IR (KBr) ν_{max} (cm⁻¹): 3452, 3357, 3226, 2919, 1634, 1590, 1532, 1466, 1429, 1327, 1225, 816; ¹H NMR (200MHz, DMSO-d₆) δ : 13.92(1H, s, 4-OH), 11.99(1H, s, H-1), 8.32(1H, d, 2.8, H-2), 8.17(1H, d, 5.5, H-6'), 7.18(1H, d, 5.5, H-5'), 7.02(1H, d, 1.5, H-7), 7.02(2H, s, NH₂), 6.54(1H, d, 1.5, H-5); ¹³C NMR(50MHz, DMSO-d₆) δ : 129.9(C-2), 113.7(C-3), 114.0(C-3a), 153.0(C-4), 108.8(C-5), 116.7(C-6), 105.3(C-7), 139.7(C-7a), 160.7(C-2'), 160.8(C-4'), 104.6(C-5'), 157.1(C-6'); HREIMS m/z 303.9959(calcd for C₁₂H₉N₄OBr, 303.9960)^[1].

【来源】 被囊动物 *Aplidium meridianum*^[1]

【分析方法】 样品乙醇提取, 反相硅胶柱层析(梯度 MeOH-H₂O), Sephadex LH-20 柱层析(MeOH) 得到纯化合物^[1].

【生物活性与毒性】 具有细胞毒活性, 抗小鼠乳腺癌细胞 LMM3 IC₅₀ 11.4 μ mol/L^[1].

【参考文献】 1. Franco L H, et al. J Nat Prod, 1998, 61: 1130

2. Lounasmaa M, et al. Nat Prod Rep, 2000, 17: 175

3. Fresneda P M, et al. Tetrahedron Lett, 2000, 41: 4777

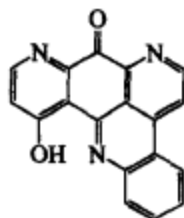
4. Jiang B, et al. Heterocycles, 2000, 53: 1489

5. Fresneda P M, et al. Tetrahedron, 2001, 57: 2355

6. Palermo J A, et al. Chem Pharm Bull, 2003, 51: 975

D0057 Meridine

【结构式】



【分子式】 $C_{18}H_9N_3O_2$

【相对分子质量】 299

【理化常数及谱学数据】 黄色定形粉末; mp > 250°C; FTIR(KBr) ν_{max} (cm⁻¹): 3444, 3071, 1692, 1605; LRMS m/z : 299.1[M⁺, 100], 271.0[M⁺ - CO, (10.4)]; ¹H NMR(300MHz, CDCl₃): 8.23(d, J =

8.1 Hz, H-1), 7.97 (dd, $J = 8.1, 7.8$ Hz, H-2), 7.86 (dd, $J = 7.8, 8.3$ Hz, H-3), 8.64 (d, $J = 8.3$ Hz, H-4), 8.66 (d, $J = 5.6$ Hz, H-5), 9.38 (d, $J = 5.6$ Hz, H-6), 8.79 (d, $J = 5.5$ Hz, H-10), 7.25 (d, $J = 5.5$ Hz, H-11), 15.26 (s, OH); ^{13}C NMR (75.4 MHz, CDCl_3): 132.6 (C-1), 129.6 (C-2), 129.4 (C-3), 123.3 (C-4), 121.7 (C-4a), 137.9 (C-4b), 119.7 (C-5), 151.5 (C-6), 147.6 (C-7a), 180.3 (C-8), 148.9 (C-8a), 153.7 (C-10), 116.8 (C-11), 167.3 (C-12), 116.4 (C-12a), 152.1 (C-12b), 117.9 (C-12c), 142.6 (C-13a)。

【来源】海鞘 *Leptoclinides* sp.

【分析方法】甲醇-氯仿 (1:1) 的提取部分分别以环己烷-氯仿、氯仿-甲醇为流动相经硅胶柱层析反复分离, 纯化, 获得 Meridine。

【生物活性与毒性】抗菌。

【参考文献】1. Schmitz F J, et al. *J Org Chem*, 1991, 56: 804

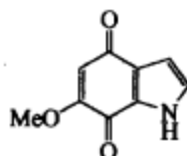
2. McCarthy P J, et al. *J Nat Prod*, 1992, 55: 1664

3. Schmitz F J, et al. *Pure Appl Chem*, 1990, 62: 1393

4. Bontemps N, et al. *Tetrahedron*, 1997, 53: 1743

D0058 6-Methoxyindole-4,7-quinone

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_9\text{H}_7\text{NO}_3$

【相对分子质量】177

【理化常数及谱学数据】橘色棱柱体; mp 188~190°C; UV (EtOH) λ_{max} (ϵ) (nm): 424 (880), 326 (3800), 282 (16000), 222 (17300); IR (KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3337, 3202, 2925, 1672, 1643, 1595, 1545, 1496, 1406, 1254, 1098; ^1H NMR (400 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ : 7.23 (1H, d, 2.5, H-2), 6.49 (1H, d, 2.5, H-3), 5.80 (1H, s, H-5), 3.76 (3H, s, MeO); ^{13}C NMR (100 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ : 127.5 (C-2), 107.1 (C-3), 126.3 (C-3a), 182.8 (C-4), 106.8 (C-5), 159.8 (C-6), 170.7 (C-7), 129.2 (C-7a); HREIMS m/z 177.0433 [M^+] (calcd for $\text{C}_9\text{H}_7\text{NO}_3$, 177.0426)。

【来源】腹足动物 *Drupella fragum*^[1]

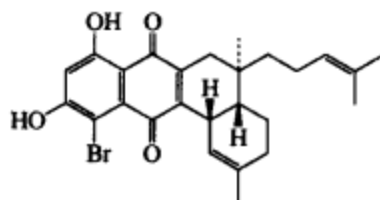
【分析方法】样品甲醇提取, hexane、 CH_2Cl_2 、BuOH 萃取, CH_2Cl_2 萃得部分 Sephadex LH-20 柱层析 (MeOH), 硅胶柱层析 (Me_2CO -Hexane 3:7), HPLC ($\text{MeOH}-\text{H}_2\text{O}$ 3:17) 得到纯化化合物^[1]。

【生物活性与毒性】抗菌活性, 抗 *B. subtilis*、*S. aureus*、*E. coli*、*P. aeruginosa*。MIC 值 ($\mu\text{g}/\text{mL}$) 分别为 7.5、12.5、50、6.25^[1]。

【参考文献】1. Fukuyama Y, et al. *Tetrahedron*, 1998, 54: 10007

D0059 Marinone

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{25}\text{H}_{27}\text{BrO}_4$

【相对分子质量】 486

【理化常数及谱学数据】 红色固体, UV-Vis(MeOH) $\lambda_{\max}$ (nm): 508(4100), 406(2290), 300(10500), 235(17400); IR(film) $\nu_{\max}$ (cm^{-1}): 3417(br), 2919, 1638, 1585, 1545, 1452, 1393, 1323, 1244; HREIMS m/z : 486.0996, calcd. for $\text{C}_{25}\text{H}_{27}\text{BrO}_5$ 486.1039; ^1H NMR(200MHz, CD_3OD) δ : 6.10(s), 5.95(d, $J=5.0\text{Hz}$), 5.03(bt, $J=7.0\text{Hz}$), 3.40(br), 2.00(m), 1.66(bs), 1.60(bs), 1.50(m), 1.55(m), 1.45(s).

【来源】 由 CNB-632 分离得到的一种海洋微生物

【分析方法】 微生物 (culture# CNB-632) 乙酸乙酯提取液, 减压浓缩后, 经硅胶柱色谱法分离, 其中 30% 乙酸乙酯/isooctane 洗脱部分进一步用正相高效液相色谱法和反相制备薄层层析 (70% MeOH/ H_2O) 纯化获得活性成分 Marinone。

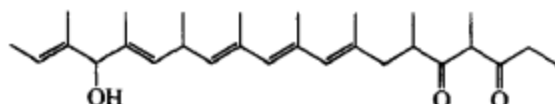
【生物活性与毒性】 抗菌。

【参考文献】 1. Pathirana C, et al. Tetrahedron Lett, 1992, 33: 7663

2. Hardt I H, et al. Tetrahedron Lett, 2000, 41: 2073

D0060 Nalodionol

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{28}\text{H}_{44}\text{O}_3$

【相对分子质量】 428

【理化常数及谱学数据】 无色无定形固体; $[\alpha]_{\text{D}}^{25} + 91^\circ$ (c 1.2, MeOH); UV(MeOH) $\lambda_{\max}$ (ϵ) (nm): 207(1100), 267(9500); IR(CHCl_3) $\nu_{\max}$ (cm^{-1}): 1727, 1698; ^1H NMR(500MHz, CD_3CN) δ : 0.94(3H, t, 7.2, H-1), 2.44, 2.46(2H, m, H-2), 3.94(1H, q, 7.1, H-4), 2.95(1H, m, H-6), 2.40, 1.94(2H, m, H-7), 5.68(1H, brs, H-9), 5.67(1H, brs, H-11), 5.20(1H, m, H-13), 3.38(1H, m, H-14), 5.35(1H, m, H-15), 4.22(1H, s, H-17), 5.51(1H, brq, 6.7, H-19), 1.59(3H, brd, 6.7, H-20), 1.41(3H, brs, H-21), 1.47(3H, d, 1.3, H-22), 1.02(3H, d, 6.7, H-23), 1.74(3H, s, H-24), 1.82(3H, d, 1.3, H-25), 1.76(3H, d, 1.3, H-26), 0.98(3H, d, 6.4, H-27), 1.20(3H, d, 7.1, H-28); ^{13}C NMR(125MHz, CD_3CN) δ : 7.9(C-1), 35.8(C-2), 209.0(C-3), 59.5(C-4), 212.4(C-5), 44.8(C-6), 44.6(C-7), 134.2(C-8), 133.1(C-9), 133.1(C-10), 134.1(C-11), 131.5(C-12), 136.1(C-13), 32.7(C-14), 130.7(C-15), 134.8(C-16), 81.6(C-17), 137.4(C-18), 120.7(C-19), 13.3(C-20), 11.9(C-21), 12.8(C-22), 21.9(C-23), 17.4(C-24), 19.1(C-25), 18.0(C-26), 16.7(C-27), 13.2(C-28); FABMS m/z 429 $[\text{M} + \text{H}]^+$, 451 $[\text{M} + \text{Na}]^+$, 467 $[\text{M} + \text{K}]^+$ [1].

【来源】 软体动物 *Smaragdinella calyculata* [1]

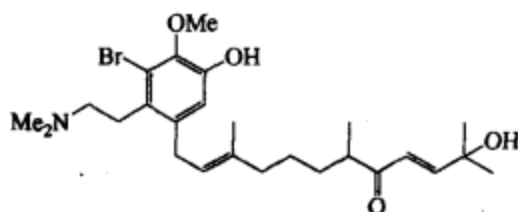
【分析方法】 样品 MeOH 提取, hexane 萃取部分 HSCCC (heptane- CH_2Cl_2 - CH_3CN 10:3:7), HPLC (MeCN- H_2O 85:15) 得到纯化合物 [1].

【生物活性与毒性】 细胞毒活性, P388 IC_{50} 3.5 $\mu\text{g}/\text{mL}$ [1].

【参考文献】 1. Szabo C M, et al. Tetrahedron, 1996, 52: 9681

D0061 Neoplaminone

【结构式】



【分子式】 $C_{26}H_{40}BrNO_4$

【相对分子质量】 509

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} - 5.3^\circ (c 0.65, \text{MeOH})$; UV(MeOH) λ_{max} (nm): 226(11000), 284(2500); IR(CHCl_3) ν_{max} (cm^{-1}): 3560, 3400(br), 1680, 1660, 1625, 1595; EIMS m/z : 511 [$M^+ + 2$], 493, 491, 430, 58; HREIMS m/z : 509. 2142, $C_{26}H_{40}BrNO_4$; ^1H NMR(270MHz, Acetone- d_6) δ : 2.38(m, H-1), 2.28(s, NMe_2), 2.92(m, H-2), 3.77(s, OMe), 6.76(s, H-7), 3.35(d, $J = 6.9\text{Hz}$, H-9), 5.22(m, H-10), 2.05(m, H-12), 1.38(m, H-13), 1.43(m, H-13), 1.32(m, H-14), 1.70(m, H-14), 2.84(m, H-15), 6.38(d, $J = 15.8\text{Hz}$, H-17), 6.93(d, $J = 15.8\text{Hz}$, H-18), 1.32(s, H-20), 1.02(d, $J = 6.9\text{Hz}$, H-22), 1.70(brs, H-23); ^{13}C NMR(67.8MHz, Acetone- d_6) δ : 59.3(t, C-1), 45.4(q, NMe_2), 30.9(t, C-2), 129.7(s, C-3), 121.1(s, C-4), 144.2(s, C-5), 60.5(q, OMe), 149.8(s, C-6), 117.6(d, C-7), 138.2(s, C-8), 32.7(t, C-9), 124.1(d, C-10), 136.9(s, C-11), 40.2(t, C-12), 26.1(t, C-13), 33.5(t, C-14), 44.4(d, C-15), 203.9(s, C-16), 125.2(d, C-17), 154.3(d, C-18), 70.5(s, C-19), 29.8(q, C-20), 16.9(q, C-22), 16.3(C-23)。

【来源】 软体动物 *Aplysia kurodai*

【分析方法】 甲醇粗提物的乙酸乙酯可溶部分用甲醇-水(8:2)萃取, 经硅胶柱色谱法及氧化铝柱色谱法, 乙酸乙酯-乙酸乙酯/甲醇(9:1)梯度洗脱进行分离, 硅胶柱层析, 以环己烷-乙酸乙酯-甲醇(3:3:1)纯化获得活性成分 Neoaplamine。

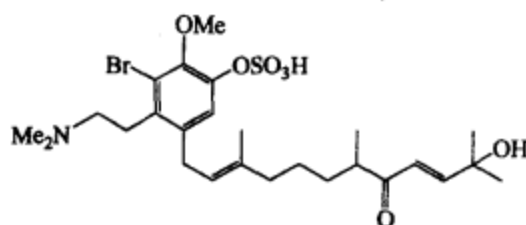
【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 HeLa 的生长。

【参考文献】 1. Barnekow D E, et al. Tetrahedron Lett, 1990, 31: 4911

2. Barnekow D E, et al. Tetrahedron Lett, 1992, 33: 4195

D0062 Neoaplamine sulfate

【结构式】



【分子式】 $C_{26}H_{40}BrNO_7S$

【相对分子质量】 588

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} - 3.0^\circ (c 1.29, \text{CHCl}_3)$; UV(MeOH) λ_{max} (nm): 227(11000), 282(1700); IR(CHCl_3) ν_{max} (cm^{-1}): 3540(br), 1690, 1665, 1630, 1600(sh), 1295, 1045; FABMS m/z : 590 [$M^+ - H + 2$], 588 [$M^+ - H$], HRFABMS m/z : 588. 1642, $C_{26}H_{40}BrNO_7S$ [$M^+ - H$]; ^1H NMR(270MHz, Acetone- d_6) δ : 2.87(m, H-1), 2.87(s, NMe_2), 3.06(m, H-2), 3.88(s, OMe), 7.51(s, H-7), 3.29(d, $J = 6.6\text{Hz}$, H-9), 5.20(m, H-10), 2.04(m, H-12), 1.38(m, H-13), 1.45(m, H-13), 1.32(m, H-14), 1.64(m, H-14), 2.87(m, H-15), 6.38(d, $J = 15.8\text{Hz}$, H-17), 6.95(d, $J = 15.8\text{Hz}$, H-18), 1.30(s, H-20), 1.03(d, $J = 6.9\text{Hz}$, H-22), 1.68(brs, H-23); ^{13}C NMR(67.8MHz, Acetone- d_6) δ : 36.8(t, C-1), 43.9(q, NMe_2), 28.7(t, C-2), 131.1(s, C-3), 121.0(s, C-4), 148.2(s, C-5), 61.2(q, OMe), 146.7(s, C-6), 124.1(d, C-7), 137.7(s, C-8), 32.6(t, C-9), 123.4(d, C-10), 137.4(s, C-11), 40.2(t, C-12), 26.1(t, C-13), 33.5(t, C-14), 44.3(d, C-15), 204.2(s, C-16), 125.3(d, C-17), 154.3(d, C-18), 70.4(s, C-19), 29.7(q, C-20), 17.0(q, C-22), 16.5(C-23)。

【来源】 软体动物 *Aplysia kurodai*

【分析方法】 甲醇粗提物的乙酸乙酯可溶部分用甲醇-水(8:2)萃取, 经硅胶柱色谱法及氧化铝柱色谱法, 乙酸乙酯-乙酸乙酯/甲醇(9:1)梯度洗脱进行分离, 反相高效液相色谱法(MeOH/ H_2O 50:50)纯化获得活性成分 Neoaplamine sulfate。

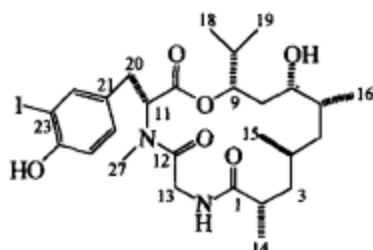
【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 HeLa 的生长。

【参考文献】 1. Barnekow D E, et al. Tetrahedron Lett, 1990, 31: 4911

2. Barnekow D E, et al. Tetrahedron Lett, 1992, 33: 4195

D0063 Neosiphoniamolide B

【结构式】



【分子式】 $C_{27}H_{41}O_6N_2I$

【相对分子质量】 615

【理化常数及谱学数据】 无色针晶; mp 173~174°C; $[\alpha] -25.5^\circ$ (c 0.67, MeOH); HREIMS m/z 616.2022 $[M+H]^+$; IR (CHCl₃) ν_{max} (cm⁻¹): 3500, 3420, 3200 (br), 1720, 1670 (sh), 1650, 1505, 1285, 1255, 1175, 1030, 995; UV (MeOH) λ_{max} (nm): 207, 227, 284; ¹H NMR (500MHz, CDCl₃) δ : 2.42 (H, ddp, $J=11.8, 3.4, 6.4$ Hz, H-2), 1.05, 1.52 (2H, m, H-3), 1.18 (H, m, H-4), 1.06 (H, m, H-5), 2.02 (H, m, H-6), 3.58 (H, brd, $J=11.8$ Hz, H-7), 1.32 (H, ddd, $J=13.9, 11.8, 2.4$ Hz, H-8a), 1.44 (H, ddd, $J=13.9, 11.8, 1.8$ Hz, H-8b), 5.06 (H, ddd, $J=11.8, 5.0, 1.8$ Hz, H-9), 5.47 (H, dd, $J=12.2, 4.3$ Hz, H-11), 3.25 (H, dd, $J=16.8, 1.8$ Hz, H-13a), 4.79 (H, dd, $J=16.8, 9.0$ Hz, H-13b), 1.13 (H, d, $J=6.4$ Hz, H-14), 0.97 (3H, d, $J=7.0$ Hz, H-15), 0.84 (3H, d, $J=7.0$ Hz, H-16), 1.87 (H, m, H-17), 0.95 (3H, d, $J=7.0$ Hz, H-18), 0.95 (3H, d, $J=7.0$ Hz, H-19), 2.88 (H, dd, $J=15.4, 12.2$ Hz, H-20a), 3.44 (H, dd, $J=15.4, 4.3$ Hz, H-20b), 7.49 (H, d, $J=2.1$ Hz, H-22), 6.86 (H, d, $J=8.2$ Hz, H-25), 7.06 (H, dd, $J=8.2, 2.1$ Hz, H-26), 2.95 (3H, s, H-27), 6.24 (brd, $J=9.0$ Hz, NH), 2.52 (brs, 7-OH), 6.26 (brs, 24-OH); ¹³C NMR (67.8MHz, CDCl₃): 177.8 (C-1), 37.2 (C-2), 45.0 (C-3), 27.1 (C-4), 43.1 (C-5), 34.4 (C-6), 65.8 (C-7), 30.2 (C-8), 77.4 (C-9), 171.6 (C-10), 58.2 (C-11), 171.9 (C-12), 39.7 (C-13), 18.4 (C-14), 17.7 (C-15), 14.4 (C-16), 32.4 (C-17), 18.1 (C-18), 18.8 (C-19), 32.9 (C-20), 130.4 (C-21), 138.0 (C-22), 85.5 (C-23), 154.2 (C-24), 115.2 (C-25), 129.7 (C-26), 30.8 (C-27)。

【来源】 海兔 *Dolabella auricularia*

【分析方法】 海兔的甲醇提取物在水和乙酸乙酯间分配, 乙酸乙酯层再在甲醇和正己烷间分配, 甲醇层经过反复的硅胶柱层析 (甲苯-乙酸乙酯-甲醇) 和反复的反相 HPLC (甲醇-水) 分离得到。结构通过 (HR) MS、UV、IR 和 NMR (¹H NMR、¹³C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

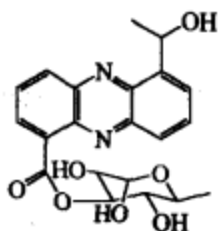
【生物活性与毒性】 对 Hela-S₃ 细胞的强细胞毒作用, IC₅₀ 为 0.001 μ g/mL。

【参考文献】 1. Hiroyuki Ishiwata, et al. J Org Chem, 1994, 59: 4710

2. D'Auria M V, et al. J Nat Prod, 1995, 58: 121

D0064 Phenazine A

【结构式】



【分子式】 $C_{21}H_{23}N_2O_7$

【相对分子质量】 415

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D - 40^\circ$ (c 0.73, MeOH); IR (film) $\nu_{\max}$ (cm^{-1}): 3357, 2975, 2931, 1726, 1566, 1269, 1058, 752; LREIMS m/z (rel int): 414 (M^+ , 3), 399 (25), 371 (7), 269 (41), 253 (100), 224 (67), 205 (48), 181 (75), 179 (69); HRCIMS m/z : 415.1473 ($M^+ + H$), calcd for $C_{21}H_{23}N_2O_7$ 415.1505; 1H NMR (360MHz, $CDCl_3$) δ : 8.26 (dd, $J = 1.5, 6.9$, H-2), 7.90 (m, H-3), 8.38 (dd, $J = 1.5, 8.8$, H-4), 7.90 (m, H-7), 7.90 (m, H-8), 8.17 (dd, $J = 2.0, 8.0$, H-9), 5.90 (q, $J = 6.5$, H-12), 1.75 (d, $J = 6.5$, H-13), 5.32 (d, $J = 4.0$, H-1'), 3.81 (dd, $J = 4.0, 8.0$, H-2'), 5.58 (t, $J = 9.5$, H-3'), 3.45 (t, $J = 9.5$, H-4'), 4.19 (dq, $J = 6.5, 9.5$, H-5'), 1.41 (d, $J = 6.5$, H-6'); ^{13}C NMR (50mHz, $CDCl_3$) δ : 131.3 (s, C-1), 132.5 (d, C-2), 127.2 (d, C-3), 133.2 (d, C-4), 139.4 (s, C-4a), 141.5 (s, C-5a), 143.3 (s, C-6), 127.4 (d, C-7), 129.5 (d, C-8), 132.0 (d, C-9), 141.8 (s, C-9a), 143.0 (s, C-10a), 168.5 (s, C-11), 67.2 (d, C-12), 23.7 (q, C-13), 92.3 (d, C-1'), 70.9 (d, C-2'), 79.7 (d, C-3'), 73.9 (d, C-4'), 67.5 (d, C-5'), 17.5 (q, C-6').

【来源】 海洋放线菌 *Streptomyces* sp.

【分析方法】 粗提物通过减压柱色谱法和反相高效液相色谱法分离, 纯化获得活性成分 Phenazine alkaloid 1。

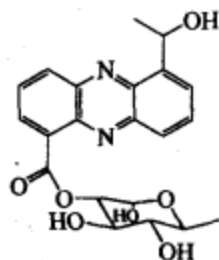
【生物活性与毒性】 抗菌。

【参考文献】 1. Pathirana C, et al. J Org Chem, 1992, 57: 740

2. Gebhart K, et al. J Antibiotics, 2002, 55: 794

D0065 Phenazine B

【结构式】



【分子式】 $C_{21}H_{23}N_2O_7$

【相对分子质量】 415

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D - 35^\circ$ (c 0.49, MeOH); IR (film) $\nu_{\max}$ (cm^{-1}): 3362, 2975, 2932, 1727, 1567, 1268, 1059, 753; LREIMS m/z (rel int): 415 ($M^+ + H$, 43), 399 (12), 397 (22), 269 (100), 255 (40), 129 (67), 85 (21); 1H NMR (360MHz, $CDCl_3$) δ : 8.25 (dd, $J = 1.5, 6.9$, H-2), 7.87 (m, H-3), 8.38 (dd, $J = 1.5, 8.8$, H-4), 7.87 (m, H-7), 7.87 (m, H-8), 8.15 (dd, $J = 2.0, 8.0$, H-9), 5.85 (q, $J = 6.5$, H-12), 1.75 (d, $J = 6.5$, H-13), 5.55 (d, $J = 3.5$, H-1'), 5.81 (dd, $J = 3.5, 9.5$, H-2'), 4.21 (t, $J = 9.5$, H-3'), 3.43 (t, $J = 9.5$, H-4'), 4.06 (dq, $J = 6.5, 9.5$, H-5'), 1.40 (d, $J = 6.5$, H-6'); ^{13}C NMR (50mHz, $CDCl_3$) δ : 130.5 (s, C-1), 133.3 (d, C-2), 121.2 (d, C-3), 134.0 (d, C-4), 139.4 (s, C-4a), 141.4 (s, C-5a), 143.7 (s, C-6), 127.6 (d, C-7), 129.3 (d, C-8), 132.1 (d, C-9), 141.6 (s, C-9a), 142.8 (s, C-10a), 167.3 (s, C-11), 66.9 (d, C-12), 23.6 (q, C-13), 90.6 (d, C-1'), 76.9 (d, C-2'), 71.3 (d, C-3'), 75.5 (d, C-4'), 67.7 (d, C-5'), 17.7 (q, C-6').

【来源】 海洋放线菌 *Streptomyces* sp.

【分析方法】 粗提物通过减压柱色谱法和反相高效液相色谱法分离, 纯化获得活性成分 Phenazine alkaloid 2。

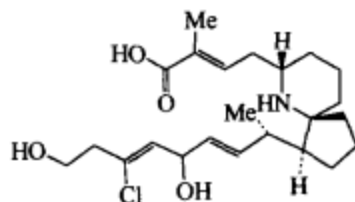
【生物活性与毒性】 抗菌。

【参考文献】 1. Pathirana C, et al. J Org Chem, 1992, 57: 740

2. Gebhart K, et al. J Antibiotics, 2002, 55: 794

D0066 Pinnaic acid

【结构式】



【分子式】 $C_{23}H_{36}ClNO_4$

【相对分子质量】 425

【理化常数及谱学数据】 1H NMR(400MHz, CD_3OD) δ : 6.45(1H, t, 7.5, H-3), 2.56(2H, m, H-4), 3.40(1H, m, H-5), 1.92, 1.44(2H, m, H-6), 1.64, 1.82(2H, m, H-7), 1.68, 1.82(2H, m, H-8), 1.86, 2.15(2H, m, H-10), 1.55, 1.84(2H, m, H-11), 1.58, 1.98(2H, m, H-12), 1.79(1H, m, H-13), 2.40(1H, m, H-14), 5.82(1H, dd, 8.8, 15.6, H-15), 5.64(1H, dd, 6.8, 15.6, H-16), 5.03(1H, dd, 6.8, 7.9, H-17), 5.72(1H, d, 7.9, H-18), 2.55(2H, t, 6.5, H-20), 3.78(2H, t, 6.5, H-21), 1.08(3H, d, 7.0, H-22), 1.88(3H, s, H-23); ^{13}C NMR(100MHz, CD_3OD) δ : 170.1(C-1), 134.5(C-2), 127.7(C-3), 31.5(C-4), 53.5(C-5), 27.2(C-6), 19.5(C-7), 34.2(C-8), 68.5(C-9), 33.7(C-10), 21.7(C-11), 28.5(C-12), 54.2(C-13), 36.4(C-14), 137.0(C-15), 130.8(C-16), 68.8(C-17), 128.2(C-18), 132.0(C-19), 41.7(C-20), 58.1(C-21), 19.0(C-22), 11.9(C-23); HRFABMS m/z $[M+H]^+$ 426.2412 $C_{23}H_{37}^{35}ClNO_4$, $\Delta + 0.1mmu^{[1]}$.

【来源】 双壳贝类 *Pinna muricata*^[1]

【分析方法】 样品 80% EtOH 提取, H_2O -EtOAc 萃取, H_2O 部分 TSKG-3000S 聚苯乙烯凝胶柱层析(50% EtOH), Sephadex LH-20 (MeOH), 硅胶 BW-127ZH (MeOH- $CHCl_3$ 3:7) 得到纯化合物^[1].

【生物活性与毒性】 抑制环磷酸化酶 A2 (cPLA2), IC_{50} 0.2mmol/L^[1].

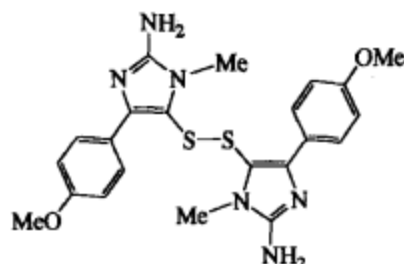
【参考文献】 1. Chou T, et al. Tetrahedron Lett, 1996, 37: 3871

2. Kuramoto M, et al. J Synth Org Chem Japan, 1996, 37: 3871

3. Kuramoto M, et al. Marine Drugs, 2004: 39

D0067 Polycarpine

【结构式】



【分子式】 $C_{22}H_{24}N_6O_2S_2$

【相对分子质量】 468

【理化常数及谱学数据】 橘红色无定形粉末固体; UV(MeOH) λ_{max} (nm) (lg ϵ): 202(4.05), 222(sh), 260(4.12), 370(3.57); UV(MeOH + NaOH) λ_{max} (nm) (lg ϵ): 205(5.26), 280(4.04); IR(NaCl) ν_{max} (cm^{-1}): 3330, 1663, 1629, 1607, 1549, 1498, 1459, 1244, 1174, 834; 1H NMR(500MHz, MeOH- d_4) δ : 7.37(4H, d, 8.5, H-2', 6'), 6.86(4H, d, 8.5, H-3', 5'), 3.83(6H, s, MeO), 3.14(6H, brs, Me); ^{13}C NMR(125MHz, MeOH- d_4) δ : 152.3(C-2), 110.1(C-5), 124.6(C-1'), 129.2(C-2', 6'), 114.7(C-3', 5'), 161.6(C-4'), 56.3(MeO), 29.3(Me); LRFABMS(glycerol), obsd m/z 469($M+H$)⁺, 437, 236(100), 204(98); HRFABMS

(thioglycerol) obsd m/z 236.0856, $C_{11}H_{14}ON_3S$, $\Delta - 0.7\text{mg/kg}^{[1]}$ 。

【来源】海鞘 *Polycarpa clavata*^[1]

【分析方法】样品分别用 $\text{MeOH-CH}_2\text{Cl}_2$ 7:3 提取, 提取物依次用 hexane、EtOAc、BuOH 萃取, BuOH 部分 Sephadex LH-20 柱层析 ($\text{MeOH-CH}_2\text{Cl}_2$ 1:1), 硅胶闪柱层析 (梯度 $\text{MeOH-CH}_2\text{Cl}_2$), 反相制备 HPLC ($\text{CH}_3\text{OH-H}_2\text{O}$) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】具有细胞毒样活性, 抗人结肠癌细胞 HCT-116 IC_{50} $0.9\mu\text{g/mL}^{[1]}$ 。

【参考文献】1. Kang H, et al. Tetrahedron Lett, 1996, 37: 2369

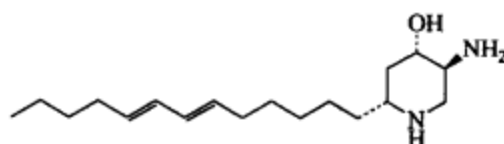
2. Abbas S A, et al. J Org Chem, 1996, 61: 2709

3. Radchenko O S, et al. Tetrahedron Lett, 1997, 38: 3581

4. Popov A M, et al. Doklady Biochem Biophys, 2002, 385: 213

D0068 Pseudodistomin D

【结构式】



【分子式】 $C_{18}H_{34}N_2O$

【相对分子质量】294

【理化常数及谱学数据】无色胶状物; $[\alpha]_D^{25} + 5^\circ$ (c 0.26, MeOH); UV (MeOH) λ_{max} : 240nm; IR (neat) ν_{max} (cm^{-1}): 3260, 3018, 3000~2800, 1563, 1462, 982; ^1H NMR (400MHz, MeOH-d_4) δ : 5.96 (2H, dm, 14.4, H-7', H-8'), 5.53 (2H, dm, 14.4, H-6', H-9'), 3.20 (1H, ddd, 4.6, 9.5, 11.1, H-4), 3.04 (1H, dd, 4.5, 12.1, H-6a), 2.50 (2H, m, H-2, H-5), 2.31 (1H, dd, 10.9, 12.1, H-6b), 2.04 (4H, dt, 7.0, 7.1, H-5', H-10'), 1.96 (1H, ddd, 4.6, 4.6, 12.1, H-3a), 1.35 (12H, m, H-1', H-2', H-3', H-4', H-11', H-12'), 1.07 (1H, ddd, 11.1, 11.3, 12.1 H-3b), 0.90 (3H, t, 7.1, H-13'); ^{13}C NMR (100MHz, MeOH-d_4) δ : 56.7 (C-2), 41.2 (C-3), 75.5 (C-4), 56.4 (C-5), 51.9 (C-6), 37.1 (C-1'), 26.9 (C-2'), 30.3 (C-3'), 30.5 (C-4'), 33.3 (C-5'), 132.9 (C-6'), 132.0 (C-7'), 131.8 (C-8'), 133.1 (C-9'), 33.5 (C-10'), 32.8 (C-11'), 23.3 (C-12'), 114.3 (C-13'); DCIMS, m/z 294; HRDCIMS m/z 294.2662 (calcd for $C_{18}H_{34}N_2O$, 294.2671)^[1]。

【来源】海鞘 *Pseudodistoma megalarva*^[1]

【分析方法】样品 CH_2Cl_2 -MeOH 1:1 提取, 提取物 H_2O -BuOH 萃取, BuOH 部分 Sephadex LH-20 柱层析 ($\text{MeOH-CH}_2\text{Cl}_2$ 1:1), RP-18 柱层析 ($\text{MeOH-H}_2\text{O}$ 8:2), 反相制备 TLC ($\text{MeOH-NH}_4\text{OH}$ 95:5), 硅胶制备 TLC ($\text{MeOH-CH}_2\text{Cl}_2$ - $\text{H}_2\text{O-NH}_4\text{OH}$ 50:50:2.0:2.5) 得到纯化合物^[1]。

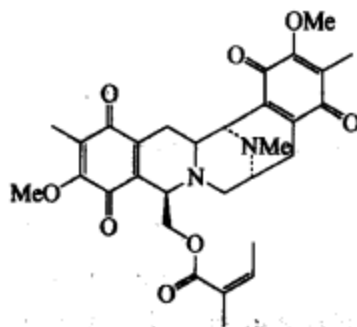
【生物活性与毒性】具有 DNA 损害活性, 对酵母菌 IC_{12} ($\mu\text{g}/100\text{mL well}$) 值为: wildtype 11; Δrad52 3.8; $\Delta\text{rad52}:\Delta\text{top1GAL4}:\text{RAD52}$ in glucose 1.9; $\Delta\text{top1GAL4}:\text{RAD52}$ in galactose 2.0^[1]。

【参考文献】1. Freyer A J, et al. J Nat Prod, 1997, 60: 986

2. Kiguchi T, et al. J Chem Soc Perkin Trans 1, 1998, 893

D0069 Renieramycin G

【结构式】



【分子式】 $C_{30}H_{34}N_2O_8$

【相对分子质量】 550

【理化常数及谱学数据】 1H NMR (500MHz, CD_2Cl_2) δ : 5.40(bs, H-1), 3.85(dt, $J = 12.2, 3.0$ Hz, H-3), 3.01(dd, $J = 16.5, 1.6$ Hz, H-4A), 1.49(ddd, $J = 16.5, 12.2, 1.6$ Hz, H-4B), 4.12(brd, $J = 4.0$ Hz, H-11), 3.67(d, $J = 7.1$ Hz, H-13), 2.87(dd, $J = 20.6, 6.1$ Hz, H-14A), 2.64(d, $J = 20.6$ Hz, H-14B), 4.67(dd, $J = 11.7, 2.8$ Hz, H-22A), 2.64(dd, $J = 20.6$ Hz, H-14B), 5.90(m, H-26), 1.52(t, $J = 1.6$ Hz, Me-25), 1.68(dq, $J = 7.3, 1.6$ Hz, Me-26), 1.93(s, Ar Me), 4.01(s, OMe), 3.98(s, OMe), 2.36(s, NMe); ^{13}C NMR (125MHz, CD_2Cl_2) δ : 50.5(C-1), 56.6(C-3), 26.1(C-4), 142.2(C-5), 185.6(C-6), 129.6(C-7), 156.0(C-8), 180.8(C-9), 136.6(C-10), 53.2(C-11), 59.60(C-13), 24.0(C-14), 142.6(C-15), 186.6(C-16), 128.8(C-17), 156.6(C-18), 182.9(C-19), 135.5(C-20), 170.7(C-21), 63.3(C-22), 167.3(C-24), 127.3(C-25), 139.5(C-26), 15.6(Me-25), 20.5(Me-26), 8.76(NMe), 61.3(OMe), 61.2(OMe), 40.1(NMe)。

【来源】 海鞘 *Xestospongia caycedoi*

【分析方法】 样品粗提物通过分配萃取及生物活性跟踪法得到氯仿层活性部位, 经硅胶柱色谱法($CHCl_3/MeOH$ 梯度洗脱)、Sephadex LH-20 ($CH_2Cl_2/MeOH$ 1:1)、反相高效液相色谱法(CH_3CN/H_2O 7:3) 分离纯化获得活性化合物 Renieramycin G。

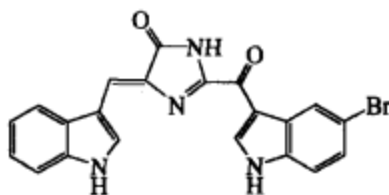
【生物活性与毒性】 抑制肿瘤细胞 KB 和 LeVo 的生长。

【参考文献】 1. Davidson B S. Tetrahedron Lett, 1992, 33: 3721

2. Fukuyama T, et al. Tetrahedron Lett, 1990, 31: 5989

D0070 Rhopaladin C

【结构式】



【分子式】 $C_{21}H_{13}BrN_4O_2$

【相对分子质量】 433

【理化常数及谱学数据】 红色无定形固体; UV(MeOH) $\lambda_{max}(\epsilon)$ (nm): 212(56000), 258(sh), 282(4900), 291(sh), 471(5600); UV(MeOH + OH^-) $\lambda_{max}(\epsilon)$ (nm): 212(56000), 258(sh), 282(6200), 363(5600), 527(5800); IR(KBr) $\nu_{max}(cm^{-1})$: 3390, 2930, 1640, 1400, 1060; 1H NMR (500MHz, MeOH- d_4) δ : 12.30(1H, brs, H-1', H-1'), 11.95(1H, brs, H-1), 9.06(1H, s, H-2''), 8.48(1H, brs, H-2'), 8.45(1H, brs, H-4'), 8.43(1H, d, 1.9, H-4''), 7.66(1H, s, H-8'), 7.54(1H, d, 8.8, H-7'), 7.54(1H, d, 8.6, H-7''), 7.40(1H, dd, 8.6, 1.4, H-6''), 7.24(1H, m, H-6'), 7.22(1H, m, H-5'); ^{13}C NMR (125MHz, MeOH- d_4) δ : 153.9(C-2), 134.9(C-4), 169.5(C-5), 135.7(C-2'), 112.1(C-3'), 126.5(C-3a'), 120.4(C-4'), 121.5(C-5'), 123.2(C-6'), 112.6(C-7'), 137.0(C-7a'), 126.9(C-8'), 138.3(C-2''), 112.8(C-3''), 128.1(C-3a''), 123.5(C-4''), 115.3(C-5''), 126.0(C-6''), 114.7(C-7''), 135.2(C-7a''), 177.1(C-8''); FDMS(pos.) $m/z[M^+]$ 432 and 434; ES-IMS(neg.) $[M-H]^-$ 431 and 433; HRESIMS m/z 431.0145 $[M-H]^-$ (calcd for $C_{21}H_{12}N_4O_2^{79}Br$, 431.0144)^[1]。

【来源】 被囊动物 *Rhopalaea* sp.^[1]。

【分析方法】 样品二甲苯-甲醇 1:3 提取, $CHCl_3$ 、EtOAc、BuOH 萃取, BuOH 萃得部分 HP-cellulofine column ($CHCl_3$ -MeOH 1:1), C_{18} HPLC (CH_3CN-H_2O 55:45) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】 抗菌活性, 抗 *Sarcina lutea*、*Corynebacterium xerosis* MIC 值为 16 $\mu g/mL$ ^[1]。

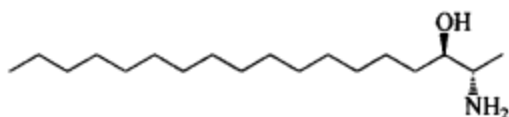
【参考文献】 1. Sato H, et al. Tetrahedron, 1998, 54: 8687

2. Gu X, et al. Youji Huaxue, 2000, 20: 168

3. Fresneda P M. , et al. Synlett, 2000, 1190

D0071 Spisulosine

【结构式】



【分子式】 $C_{18}H_{39}NO$

【相对分子质量】 285

【来源】海蛤 *Spisula polynyma*

【分析方法】 参见文献 [1]。

【生物活性与毒性】 体外实验显示多种细胞毒活性,其 IC_{50} 值差异较大^[2],能影响内皮细胞识别基因(EDG)受体。

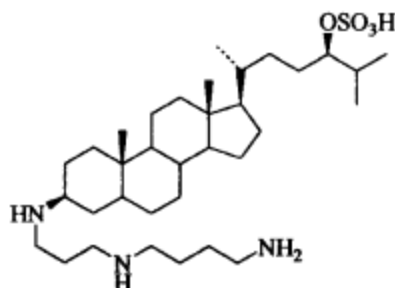
【临床与实用价值】在欧洲进行 I 期临床试验。

【参考文献】 1. Cuadros R, et al. Cancer Lett, 2000, 152: 23~29

2. Alvarez-Miranda, M, et al. Clin Canc Res, 2003, 9

D0072 Squalamine

【结构式】



【分子式】 $C_{34}H_{65}N_3O_4S$

【相对分子质量】 611

【来源】 鲨鱼 *Squalus acanthias*

【分析方法】 参见文献 [1]。

【生物活性与毒性】 广谱抗菌作用,能抑制激光损伤大鼠上皮新血管形成^[4]。

【临床与实用价值】 已经进入Ⅱ期临床,作为标准药物的联合用药用于治疗非相应性实体瘤,也用于晚期卵巢癌的基本治疗,临床未见不良反应^[2,3]。

【参考文献】 1. Moore K S, Wehrli S, Roder H, etc. Proc Natl Acad Sci U S A, 1993, 90: 1354~1358

2. Wehrli S L, et al. *Steroids*, 1993, 58: 370

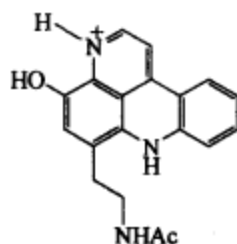
3. Bhargava P, et al. Clin Cancer Res, 2001, 7: 3912

4. Herbst R S. et al. Clin Cancer Res, 2003, 9: 4108

5. Ciulla T A. et al. *Retina*, 2003, 23: 808

D0073 Styelsamine B

【结构式】



【分子式】 $C_{19}H_{18}N_3O_2$

【相对分子质量】 320

【理化常数及谱学数据】 紫色固体; UV (MeOH-TFA) $\lambda_{\max}$ (lg ϵ) (nm): 222 (sh) (4.43), 244 (4.28), 278 (4.55), 294 (4.60), 372 (sh) (3.57), 388 (3.70), 572 (3.72); UV (MeOH-KOH) $\lambda_{\max}$ (lg ϵ) (nm): 262 (4.38), 378 (3.97); IR (film) $\nu_{\max}$ (cm^{-1}): 3072, 1678, 1660, 1619, 1581, 1367, 1199, 1128; 1H NMR (500MHz, DMSO- d_6) δ : 13.47 (1H, brs, H-1), 11.50 (1H, brs, H-8), 10.78 (1H, brs, H-12), 8.50 (1H, t, 5.5, H-15), 8.24 (1H, d, 6.5, H-2), 8.20 (1H, d, 8.5, H-4), 7.70 (1H, m, H-6), 7.67 (1H, m, H-7), 7.54 (1H, d, 6.5, H-3), 7.43 (1H, s, H-10), 7.22 (1H, dd, 7.5, 7.5, H-5), 3.24 (2H, dt, 6.5, 7.5, H-14), 2.96 (2H, t, 6.5, H-13), 1.91 (3H, s, H-17); ^{13}C NMR (125MHz, DMSO- d_6) δ : 143.3 (C-2), 104.9 (C-3), 149.2 (C-3a), 113.9 (C-3b), 125.4 (C-4), 122.0 (C-5), 135.0 (C-6), 117.6 (C-7), 141.0 (C-7a), 128.3 (C-8a), 116.2 (C-9), 121.6 (C-10), 136.6 (C-11), 125.9 (C-11a), 120.3 (C-11b), 30.3 (C-13), 37.7 (C-14), 171.4 (C-16), 22.4 (C-17); MS (FAB, 3-nitrobenzyl alcohol) m/z (rel intensity) 320 (100, MH^+), 247 (15); HR-FABMS (3-nitrobenzyl alcohol, MH^+) calcd for $C_{19}H_{18}N_3O_2$ 320.1399, found 320.1397^[1].

【来源】 海鞘 *Eusynstyela latericius*^[1]

【分析方法】 样品乙醇提取, $CHCl_3$ -含 1% CF_3COOH 甲醇水萃取, 甲醇水萃取部分 RP-18 硅胶柱层析 (MeOH- H_2O), Sephadx LH-20 (MeOH- CF_3COOH 0.1%) 得到纯化合物^[1].

【生物活性与毒性】 细胞毒活性, 抗人结肠癌细胞 HCT-116 IC_{50} 89 $\mu mol/L$ ^[1].

【参考文献】 1. Copp B R, et al. J Org Chem, 1998, 63: 8024

2. Stanslas J, et al. J Med Chem, 2000, 43: 1563

3. Skyler D, et al. Org Lett, 2001, 3: 4323

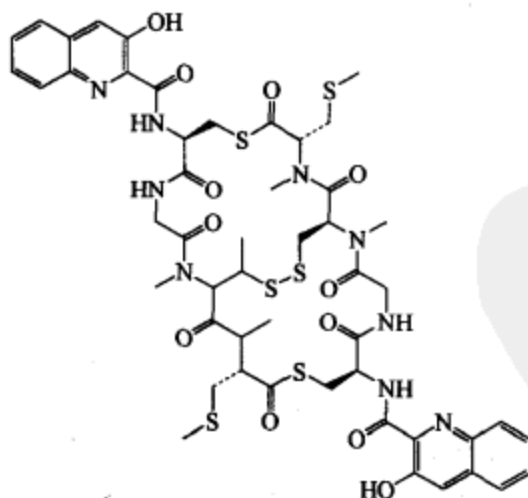
4. Skyler D, et al. J Nat Prod, 2002, 65: 1573

5. Delfourne E, et al. Med Res Rev, 2003, 23: 234

6. Nakahara S, et al. Heterocycles, 2003, 60: 2017

D0074 Thiocoraline

【结构式】



【分子式】 $C_{50}H_{59}N_9O_{12}S_6$

【相对分子质量】 1169

【来源】 海洋放线菌 *Micromonospora marina*

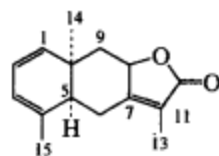
【分析方法】 参见文献 [1, 2].

【生物活性与毒性】 对于 NCI 所有 60 多种细胞株, 包括乳腺癌、结肠癌、肾脏肿瘤及恶性黑色素瘤等都具有抑制活性。其作用机制可能为 DNA 聚合酶抑制。

【参考文献】 1. Romero F, et al. J Antibiot, 1997, 50: 734

D0075 Tubipolide B

【结构式】

【分子式】 $C_{15}H_{18}O_2$

【相对分子质量】 230

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} - 51.6^\circ$ (c 0.02, $CHCl_3$); UV(OH) λ_{max} (nm): 225(4.20), 266(3.12); IR(KBr) ν_{max} : 1747cm^{-1} ; $^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ δ : 5.49(d, $J = 9.6$, H-1), 5.95(dd, $J = 9.6, 5.2$, H-2), 5.71(brd, $J = 5.2$, H-3), 1.73(dd, $J = 13.4, 4.8$, H-5), 2.80(dd, $J = 13.4, 4.8$, H-6), 2.03(t, $J = 13.4$, H-6), 4.67(dd, $J = 12.6, 6.0$, H-8), 1.22(t, $J = 12.6$, H-9), 2.43(dd, $J = 12.6, 6.0$, H-9), 1.84(brs, H-13), 0.99(s, H-14), 1.86(brs, H-15); $^{13}\text{C NMR}(\text{CDCl}_3)$ δ : 130.9(d, C-1), 124.0(d, C-2), 117.9(d, C-3), 139.6(s, C-4), 47.7(d, C-5), 45.5(t, C-6), 160.9(s, C-7), 78.8(d, C-8), 26.9(t, C-9), 36.5(s, C-10), 110.8(s, C-11), 176.0(s, C-12), 8.3(q, C-13), 24.9(q, C-14), 22.4(q, C-15); EIMS m/z 230 $[M]^+$ (37), 215(12), 202(2), 197(7), 185(14), 170(12), 162(30), 128(13), 124(29), 119(100); HREIMS m/z 230.1307(calcd for $C_{15}H_{18}O_2$, 230.1302)。

【来源】 台湾 stolonifer *Tubipora musica*

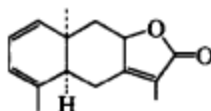
【分析方法】 原料的二氯甲烷提取物经硅胶柱层析, 依次用正己烷、正己烷: 二氯甲烷 [(5:1)~(1:5)]、二氯甲烷、二氯甲烷: 乙酸乙酯 [(5:1)~(1:1)]、乙酸乙酯以及丙酮洗脱, 共分成 10 个部分。第四部分经反复硅胶柱层析, 由 n -hexanes-EtOAc (1:2) 洗脱得到化合物 Tubipolide B。

【生物活性与毒性】 呈现 P388 细胞系细胞毒活性, ED_{50} 值为 $3.69\mu\text{g/mL}$ 。

【参考文献】 1. Chang-Yih Duh, et al. J Nat Prod, 2001, 64: 1430

D0076 Tubipolide G

【结构式】

【分子式】 $C_{17}H_{18}O_2$

【相对分子质量】 286

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} + 22.6^\circ$ (c 0.02, $CHCl_3$); UV(OH) λ_{max} (nm): 246(4.24), 263(3.27); IR(KBr) ν_{max} : 1742cm^{-1} ; $^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ δ : 5.54(d, $J = 9.0$, H-1), 5.93(dd, $J = 9.0, 5.1$, H-2), 5.98(brd, $J = 5.1$, H-3), 2.25(1 dd, $J = 6.5, 4.3$, H-5), 2.78(dd, $J = 16.5, 4.3$, H-6), 2.45(t, $J = 16.5$, H-6), 5.54(s, H-9), 1.88(brs, H-13), 1.11(s, H-14); $^{13}\text{C NMR}(\text{CDCl}_3)$ δ : 132.4(d, C-1), 132.4(d, C-2), 121.4(d, C-3), 135.0(s, C-4), 41.1(d, C-5), 23.8(t, C-6), 149.1(s, C-7), 147.4(s, C-8), 112.8(d, C-9), 37.1(s, C-10), 120.6(s, C-11), 171.0(s, C-12), 8.5(q, C-13), 25.3(q, C-14), 66.0(t, C-15), 20.9(q, —OAc), 170.8(s, —OAc); EIMS m/z 271 $[M-15]^+$ (1), 256(2), 244(3), 226(19), 128(22), 115(28), 91(20); HREIMS m/z 287.1284(calcd for $C_{17}H_{19}O_4$, 287.1278)。

【来源】 台湾 stolonifer *Tubipora musica*

【分析方法】 原料的二氯甲烷提取物经硅胶柱层析, 依次用正己烷、正己烷: 二氯甲烷 [(5:1)~(1:5)]、二氯甲烷、二氯甲烷: 乙酸乙酯 [(5:1)~(1:1)]、乙酸乙酯以及丙酮洗脱, 共分成 10 个部分。

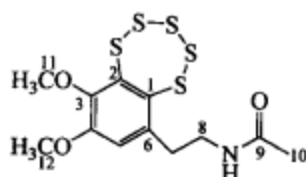
第四部分经反复硅胶柱层析,由二氯甲烷:丙酮(5:1)洗脱得到化合物 Tubipolide G。

【生物活性与毒性】 呈现 P388 细胞系细胞毒活性, ED_{50} 值为 $4.01 \mu\text{g/mL}$ 。

【参考文献】 1. Chang-Yih Duh, et. al. J Nat Prod, 2001, 64: 1430

D0077 Varacin acetate

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{12}\text{H}_{15}\text{O}_3\text{NS}_2$

【相对分子质量】 381

【理化常数及谱学数据】 黄色结晶; mp $136 \sim 137^\circ\text{C}$; FABMS m/z 382 $[\text{M} + \text{H}]^+$ (11%), 317(21) 87(100); LREIMS m/z 383 $[\text{M} + 2\text{H}]^+$ (0.5%), 381 $[\text{M}]^+$ (2%), 317(100), 258(48), 245(24), 230(15); IR (KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3436, 3280, 3088, 2962, 2928, 2914, 2850, 1644, 1558, 1536, 1468, 1416, 1370, 1256, 1068, 1006, 990, 602; UV (MeOH) λ_{max} (nm): 217, 254; ^1H NMR (CDCl_3) δ : 6.82 (H, s, H-5), 3.17 (2H, m, H-7), 3.46 (2H, m, H-8), 1.99 (3H, s, H-10), 3.86 (3H, s, H-11), 3.92 (3H, s, H-12); ^{13}C NMR (CDCl_3): 135.0 (C-1), 140.5 (C-2), 149.6 (C-3), 154.7 (C-4), 115.4 (C-5), 141.0 (C-6), 36.1 (C-7), 40.1 (C-8), 170.9 (C-9), 23.3 (C-10), 61.0 (C-11), 56.3 (C-12)。

【来源】 海鞘 *Polycitor* sp.

【分析方法】 海鞘的乙醇提取物在乙醇-水和正己烷间分配,乙醇-水再用氯仿萃取,氯仿层上硅胶柱,氯仿-甲醇 4:1 洗脱部分再经过 Sephadex LH-20 (甲醇:氯仿 1:1) 纯化得到。结构通过 (HR) MS、IR、UV 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

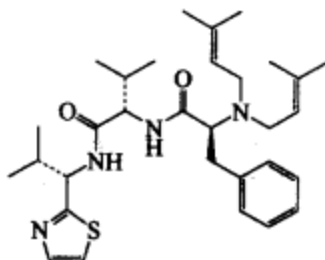
【生物活性与毒性】 抗真菌和抗菌作用, $10 \mu\text{g}$ 剂量时对 *Candida albicans*、 $1 \mu\text{g}$ 时对 *Bacillus subtilis* 都能形成 20mm 的抑菌环。

【参考文献】 1. Makarrieva T N, et al. J Nat Prod, 1995, 58 (2): 254

2. Ford P W. et al. Diss Abstr Int B, 1997, 57: 4396

D0078 Virenamide A

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{31}\text{H}_{46}\text{N}_4\text{O}_2\text{S}$

【相对分子质量】 538

【理化常数及谱学数据】 无色油状物; $[\alpha]_D^{25} - 341^\circ$ (c 0.14, CHCl_3); UV (EtOH) λ_{max} (nm) (ϵ): 203 (7700), 237 (4300); IR (CHCl_3) ν_{max} (cm^{-1}): 3420, 3337, 3018, 2972, 2931, 1665, 1512, 1454, 1390, 1221, 1082, 1047, 928; ^1H NMR (400MHz, CDCl_3) δ : 7.68 (1H, d, 3.3, H-1), 7.20 (1H, d, 3.3, H-2), 5.20 (1H, dd, 5.7, 8.8, H-4), 2.34 (1H, dq, 6.2, 6.2, 6.3, H-5), 0.84 (3H, d, 6.2, H-6), 0.86 (3H, d, 6.3, H-7), 4.28 (1H, dd, 6.8, 8.9, H-9), 2.24 (1H, dq, 6.8, 6.8, 6.8, H-10), 0.93 (3H, d, 6.8, H-11), 0.94 (3H, d, 6.8, H-12), 3.75 (1H, dd, 6.3, 6.5, H-14), 2.88 (1H, dd, 6.3, 14.2, H-15), 3.31 (1H, dd, 6.5, 14.2, H-15), 7.25

(2H, m, H-17), 7.26(2H, m, H-18), 7.16(1H, m, H-19), 3.09(4H, d, 6.5, H-20), 5.13(2H, t, 6.5, H-21), 1.54(6H, s, H-23), 1.69(6H, s, H-24), 7.10(1H, d, 8.8, NH), 7.88(1H, d, 9.0, NH); ^{13}C NMR(100MHz, CDCl_3) δ : 142.4(C-1), 118.3(C-2), 170.7(C-3), 56.0(C-4), 33.2(C-5), 17.3(C-6), 19.0(C-7), 171.0(C-8), 58.5(C-9), 29.9(C-10), 17.9(C-11), 19.4(C-12), 171.4(C-13), 64.6(C-14), 31.1(C-15), 140.0(C-16), 128.2(C-17), 129.1(C-18), 125.7(C-19), 48.1(C-20), 121.9(C-21), 135.4(C-22), 18.0(C-23), 25.7(C-24); HRMS 469.2639, $\text{C}_{26}\text{H}_{37}\text{N}_4\text{O}_2\text{S}(\text{M}^+ - \text{C}_5\text{H}_9)$ requires 469.2637; EIMS m/z (relative intensity) 538(0.1%), 256(22), 188(27), 140(22), 120(53), 91, (27), 72(27), 69(100); CIMS m/z (relative intensity) 539(100), 471(50), 431(45)^[1]。

【来源】海鞘 *Diplosoma virens*^[1]

【分析方法】样品分别用 CH_2Cl_2 、MeOH 提取, CH_2Cl_2 提取部分硅胶柱层析 (hexane-acetone-MeOH), 硅胶柱层析 (hexane-acetone 4:1) 得到纯化合物^[1]。

【生物活性与毒性】细胞毒活性, 抗 P388、A549、HT29、CV1 细胞 IC_{50} 值 ($\mu\text{g}/\text{mL}$) 分别为 2.5、10、10、10。此外, 具有拓扑异构酶抑制活性 IC_{50} 2.5 $\mu\text{g}/\text{mL}$ ^[1]。

【参考文献】1. Carroll A R, et al. J Org Chem, 1996, 61: 4059

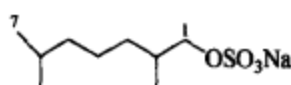
2. Feng Y J, et al. Aust J Chem, 1997, 50: 337

3. Moody C J, et al. J Org Chem, 1999, 64: 8715

4. Davis A R, et al. Recent Adv Mar Biotechnol, 1999, 3: 259

D0079 2,6-Dimethylheptanyl sulfate sodium

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_9\text{H}_{19}\text{O}_4\text{SNa}$

【相对分子质量】246

【理化常数及谱学数据】 $[\alpha]_D^{20}$ (c 0.40, MeOH); HRFABMS (-) m/z 223.0998 $[\text{M} - \text{Na}]^-$; FABMS (-) m/z 223 $[\text{M} - \text{Na}]^-$; IR (KBr) ν_{max} (cm^{-1}): 3400, 1220; ^1H NMR ($\text{DMSO}-d_6$) δ : 0.82(3H, d, $J = 6.9\text{Hz}$, 2-Me), 0.84(6H, d, $J = 6.6\text{Hz}$, H-7, 6-Me), 1.00(H, m, H-3), 1.12(2H, m, H-5), 1.20(H, m, H-4), 1.27(H, m, H-4), 1.28(H, m, H-3), 1.50(H, qq, $J = 6.6, 6.6\text{Hz}$, H-6), 1.61(H, m, H-2), 3.45(H, dd, $J = 9.5, 6.8\text{Hz}$, H-1a), 3.54(H, dd, $J = 9.5, 5.9\text{Hz}$, H-1b); ^{13}C NMR ($\text{DMSO}-d_6$): 16.9(2-Me), 22.5 and 22.6(C-7, 6-Me), 24.0(C-4), 27.4(C-6), 32.6(C-2), 33.2(C-3), 38.8(C-5), 70.5(C-1)。

【来源】海鞘 *Halocynthia roretzi* 的胰肝

【分析方法】海鞘胰肝的甲醇提取物用正丁醇和乙醚萃取, 正丁醇层上硅胶柱 (氯仿-甲醇), 40% 甲醇-氯仿部分上 Sephadex LH-20 (甲醇), 最后用反相 HPLC (28% 乙腈-水, 0.1mol/L NaClO_4) 分离得到纯品。结构通过 (HR) MS、IR 和 NMR (^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 2D-NMR) 等方法确定。

【生物活性与毒性】在 0.2mg/disk 剂量下对 *Vibrio alginoliticus* 和 *Mortierella ramaniana* 分别能形成 12mm 和 10mm 的抗菌环。

【参考文献】1. Tsukamoto S, et al. J Nat Prod, 1994, 57 (11): 1606

英文索引

- Acalycigorgins B B0001
 Acanthosterol sulfate J A0002
 Acetic acid 10,13-dimethyl-1-oxo-17-(1,4,5-trimethyl-hex-2-enyl)-1,4,6,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahydro-20-oxa-cyclopropa [5,6]cyclopenta[α]phenanthren-11-yl ester B0002
 (7Z)-1-Acetoxy-8-chloro-7-(dichloromethyl)-3-methyloct-7-en-4-one D0001
 4-Acetylapykurodin B D0002
 12-O-Acetyl-16-O-deacetyl-16-*epi*-scalarolbutenolide A0003
 3-O-Acetylaspiferal D A0001
 Acodontasteroside I D0003
 Adociaquinone B A0004
 Adociasulfate 1 A0005
 Adociasulfate 6 A0006
 Agelastatin A A0007
 Agelongine A0008
 Almazole D C0001
 Alternatamide A D0004
 Americanolide D B0003
 Aminozooanemonin A0009
 Amphidinolide G D0005
 Amphidinolide H D0006
 Amphimedine A0010
 Anthosamide A A0011
 Aplaminone D0007
 Aplidine D0008
 Aplykurodinone B D0009
 Aplysiapyranoid D A0012
 Arnoamines B D0010
 Asperdiol acetate B0004
 Auriside B D0011
 Axinellamines B A0013
 Batzelladine D A0014
 Bengamide A A0015
 Bengamide N A0016
 Bifurcanol C0002
 2,2-Biguaiazulenyl B0005
 Bis(sulfato)-cyclosiphonodictyol A A0017
 Bistelletadine B A0018
 Bistratamide C C0003
 Bistratamide D C0013
 Bistratamides C D0012
 Bistratamides D C0004
 Bolinaquinone A0019
 6(R)-Bromo-3(S)-bromomethyl-7-trichloro-2,3,7-methyloct-1-ene C0021
 6-Bromo-5-hydroxyindole D0014
 (+)-3-(Z)-Bromomethylidene-10 β -bromo- β -chamigrene C0005
 3-Bromonaleimide A0020
 18-Bromo-(13E,17E)-octadecane-9,17-diene-5,7,15-triynic acid A0234
 5-Bromo-1H-pyrrole-2-carboxylic acid A0021
 Bromosphaerone C0006
 Bryostatin 1 D0015
 Cacospongionolide E A0022
 Calicoferol H B0007
 Callipeltoside C A0023
 Callyspongin A A0024
 Callystatin A A0025
 Calyculaglycoside A B0008
 Capnellene-8 β -ol B0009
 Capucinoate A A0026
 1-Carboxymethylnicotinic acid A0027
 Celenamide E A0028
 Ceratinamide A A0029
 Ceratinamine A0030
 Chelonin A A0031
 (3Z)-Chlorofucin C0007
 Cladiellaperoxide B0010
 Clathriol A0032
 Clathsterol A0034
 Clathramide A A0033

- Clathrynamides A A0035
 Claviridenone F B0011
 Clavularial A B0006
 Convolutamine B D0017
 Convolutamine D D0018
 Convolutamidine A D0019
 Convolutamidine B D0016
 Coproverdine D0020
 Cribrostatin 3 A0036
 Cyclic-peoxide-containing acid 1 A0037
 Cyclic-peoxide-containing acid 3 A0038
 Cycloartan-3, 23, 29-dihydroxy-3, 29-disulfate sodium C0020
 Cyclolinteinol A0039
 Cyclostelletamine A A0040
 Cyclotheonamide E4 A0041
 Cycloxazoline C0008
 Cylindramide A0042
 N-Deacetylkuanoniamine C A0043
 Debromomarinone D0021
 Dendocarin B D0022
 3-Deoxo-cyclolinteinone A0044
 Desacetylscalarin A0045
 3,4-Dibromomaleimide A0046
 Dibromophakellstatin A0047
 Dichlorolissoclimide D0023
 Didemnenone C D0024
 Didemnimide D D0026
 Didemnin B D0025
 [6-(2,4-Diethyl-octa-1,5-dienyl)-4,6-diethyl-1,2-dioxan-3-yl]acetic acid A0048
 2-(4,6-Dihydroxy-8a-methyl-1-oxo-1,4,4a,5,6,7,8,8a-octahydro-naphthalen-2-yl)-5-(1,4-dimethyl-pent-3-enyl)-1-methyl-cyclopentyl-acetaldehyde B0012
 1,4-Dihydroxy-2-tetraprenylbenzene derivative A0049
 (3R,8R)-3,28-Dihydroxy-1,12,18,29-triacont-tetrayne-14,17-dione A0230
 17-Dimethylaminolobohedleolide B0013
 2,6-Dimethylheptanyl sulfate sodium D0079
 17-(1,5-Dimethyl-hexyl)-10,18-dimethyl-tetradecahydro-20-oxa-cyclopropa[7,8]cyclopenta[α]phenanthrene-3,5,6-triol B0014
 1,2-Dioxane peroxide acid A0050
 Dipuuphedione A0051
 Discodermolide A0052
 Discorhabdin A D0027
 Discorhabdin B D0028
 Discorhabdin R A0053
 Dispacamide A A0054
 Dispacamide C A0055
 Dolastatin 10 D0029
 Dolastatin 15 D0030
 Dolastatin 18 D0031
 Dolastatin H D0032
 Dolastatin I D0033
 Dorisenone A D0034
 Dragmacidin D A0056
 Dragmacidin E A0057
 Dragmacidon A A0058
 Dysidenone A A0059
 Dysidine A0060
 Dysidiolide A0061
 Dysidiolide B A0062
 Echinoclasterol sulfate A0063
 Ecteinascidin 729 D0035
 Ecteinascidin 743 D0036
 Elenic acid A A0064
 Elisabethin B D0037
 Epinardin C A0065
 Epiplakinic acids G A0066
 (8Z,11Z,14Z,17Z)-3,6-Epoxyeicosane-3,5,8,11,14,17-hexene acid A0231
 (7R,8R,14R,1E,3E,11E)-7,8-Epoxy-1,3,11-triene-14-hydroxycembranoid B0037
 5 α ,6 α -Epoxy-24R*-ethylcholest-8(14)-en-3 β ,7 α -diol A0067
 7,8-Epoxyzahavin A B0015
 N-3'-Ethylaplysinopsin A0068
 Ethyl didehydroplakortide Z A0069
 Eudesm-11-en-4-ylamine hydrochloride A0070
 Eudistalbin A D0038
 Euthyroideone B D0039
 Excavatulide E B0016
 Fascaplysin A0071
 Fellutamide A D0040
 Fellutamide B D0041
 Florlide B B0017
 Frondosin B A0072

- Furospingin-5 A0073
 Gambieric acid A D0042
 Gambieric acid B D0043
 (±)Gelliusine C A0074
 (±)Gelliusine F A0075
 Geodimolide C A0076
 Geodin F Mg salt A0077
 Globostellatic Acid D A0078
 Girolline A0079
 Gorgiabisazulene B0018
 Gorgiagallylazulene B0019
 Halichlorine A0080
 Halichondrin B A0081
 Halishigamide A A0082
 Halistanol Sulfate F A0083
 Halistanol Sulfate G A0084
 Hamigeran B A0085
 Haploscleridamine A0086
 Haterumaimides F D0044
 Hemiasterlin A0087
 Hennoxazole A A0088
 Herbindol A A0089
 Herbindol B A0090
 Herbindol C A0091
 Honulactone A A0092
 24-Hydroperoxycholesta-5,25-dien-3-ol C0009
 11-Hydroxyascididemin D0045
 8-Hydroxydendrolasin D0046
 3(S)-Hydroxy-heneicisene-(4E)-ene-1-yne A0233
 5-Hydroxymethyldiscodermolate A0093
 1-Hydroxymethylene-5, 5, 8a-trimethyl-octahydro-
 naphthalen-2-one ester A0094
 4-Hydroxymethyl-4,8,10-trimethyl-1,4,5,6,7,8,
 9,10,11,12-decahydro-3,16-dioxo-cyclopenta[α]
 phen anthren-2-one A0095
 11-Hydroxystaurosporine D0047
 29-Hydroxystelliferin A A0096
 29-Hydroxystelliferin D A0097
 7R-Hydroxytheonellasterol A0098
 Hyrtiomanzamine A0099
 Ibisterol sulfate A0100
 Iejimalide C D0048
 Iejimalide D D0049
 Inelegantene B0020
 Inorolide A A0101
 Inorolide B A0102
 Inorolide C A0103
 10-Isothiocyanato-4,6-amorphene A0105
 (1R*, 4S*, 6R*, 7S*)-4-Isothiocyanato-9-amor-
 phene A0106
 (4S*, 10S*)-10-Isothiocyanato-5-amorphene-4-ol
 A0104
 Isobatzelline E A0107
 Isocrambescidin 816 A0108
 (1S,3S,4R,7S,8S,11S,12S,13S,15R,20R)-20-
 Isocyanto-7-isocyanoisocycloamphilectane A0109
 Isodehydrothysiferol C0010
 Isonaamidine D A0110
 Isopachydietyl A C0011
 Isopalinurin A0111
 Isopectinatone D0050
 Isorawsonol C0012
 Jaspamide B A0112
 Jaspamide C A0113
 Jaspiferal G A0114
 Kahalalide F C0013
 Kalihinenes X A0115
 Kalihinenes Z A0116
 Kalihipyran A A0117
 Kiheisterone A A0118
 Kiheisterone B A0119
 Labiatamide B B0021
 Latrunculin A A0120
 Latrunculin B A0121
 Laulimalide A0122
 Leucamide A A0123
 Leucetta mine A A0124
 Lintenone A0125
 Lituarine A D0051
 Lituarine B D0052
 Lituarine C D0053
 Lissoclinotoxin A D0054
 Lobatamide A D0055
 Lokysterolamine A A0126
 Lokysterolamine B A0127
 Luffariolide A A0128
 Luffariolide B A0129
 Luffariolide C A0130
 Luffariolide D A0131

- Luffariolide E A0132
 Luffariolides H A0133
 Lysoplasmanylinositol 2 A0134
 Ma'iliohydrin C0014
 Makaluvamine P A0135
 Mamanuthaquinone A0136
 Manadic acid A A0137
 Manadic acid B A0138
 Meridianin B D0056
 Meridine D0057
 Merinone D0059
 Matemone A0139
 Metachromin D A0140
 Metachromin E A0141
 Metachromin F A0142
 Metachromin G A0143
 Metachromin H A0144
 6-Methoxyindole-4,7-quinone D0058
 5-Methoxyneoamphimedine A0145
 14-Methoxyhalenaquinone A0146
 1-O-(2-Methoxyhexadecyl)-sn-glycero-3-phosphocholine A0147
 24-Methylencholesta-5-ene-3 β ,15 β ,19-triol B0022
 N(3')-Methyl tetrahydrovarion B A0148
 Microspinosamide A0149
 Microxine A0150
 Milnamide A A0151
 Montiporic acid A B0023
 Montiporyne I B0024
 Motuporin A0152
 Mycalamide D A0153
 Nahocol A C0015
 Nalodionol C0060
 Neoamphimedine A0154
 Neoaplamionone D0061
 Neoaplamionone sulfate D0062
 Neosiphoniamolide A A0155
 Neosiphoniamolide B D0063
 Nortopsentin A A0156
 Nortopsentin B A0157
 Nortopsentin C A0158
 Nortopsentins A A0159
 Nortopsentins C A0160
 Nuapapu B A0161
 11-Oxo-aerotherionin A0162
 Palau'amine A0163
 Pannosan C0016
 Papuamide A A0164
 Peloruside A A0165
 Petrosolic acid A0166
 Phenazine A D0064
 Phenazine B D0065
 N-[2-Phenylethyl]-9-oxo-hexadecacarboxamide B0025
 Phloeodictine A A0167
 Phloeodictine B A0168
 Pinnaic acid D0066
 Pinnatin A B0026
 Plakortamine B A0169
 Pokepola ester A0170
 Polycarpine D0067
 Polydiscamide A A0171
 Polygodial 8 A0172
 Popolohuanone E A0173
 Psammaphysin C A0174
 Psammaphysin D A0175
 Pseudoceratidine A0176
 Pseudodistomin D D0068
 Puamide D A0177
 Purpuramine A A0178
 Pyraxinine A0179
 Pyronaamidine A0180
 (2E,9E)-Pyronaamidine 9-(N-methylimine) A0181
 Renieramycin G D0069
 Rhopaladin C D0070
 Rhopaloic acid A A0182
 Rietone B0027
 Salicylhalimide A A0183
 Sceptrin A0184
 Secoadociaquinone B A0185
 9,11-Secosterol-4,7-diene-3,6,9-trione-11-acid B0038
 9,11-Secosterol-2 β ,3 β ,6 β ,11,17-pentene-9-one A0232
 Shaagrockol B A0186
 Shaagrockol C A0187
 Sinulobatin C B0028
 Sollasin C A0188

- Spisulosine D0071
 Spongiacidin B A0189
 Squalamine D0072
 Stecholid A B0029
 Stecholid B B0030
 Stecholid H B0031
 Stelletamide B A0190
 Stelletazole B A0191
 Stelliferin A A0192
 Stelliferin B A0193
 Stelliferin C A0194
 Stelliferin D A0195
 Stelliferin E A0196
 Stelliferin F A0197
 Stelliferin G A0198
 Strongylin A A0199
 Styelsamine B D0073
 Styloguanidine A0201
 Stypoldione C0017
 Stypopodium acid C C0018
 Stypoquinonic acid A0200
 Stypotriol C0019
 Suberosenone B0032
 Suberosol C A0202
 (—)-(5*R*,10*R*)-Subersic acid A0203
 34-Sulfatobastadin 13 A0204
 Swinhoeiamide A A0205
 T-cadinthiol A0206
 Teopederin B A0207
 Teopederin C A0208
 Teopederin D A0209
 Teopederin E A0210
 Theoneberine A0211
 Theopederin A A0212
 Theopederin L A0213
 Thiocoraline D0074
 Thiocyanatin A A0214
 Thorectandrols C A0215
 Topsentiasterol sulfate A A0217
 Topsentiasterol sulfate D A0218
 Toxadocial B A0219
 3,4,6-Tribromo-2-(2-bromo-phenoxy)-phenol
 A0220
 2(ξ)-3β, 11, 24-Trihydroxy-9, 11-seco-sterol-4-ene-
 9-one B0039
 22(*E*), 4(*S*), 24(ξ)-3β, 11, 24-Trihydroxy-4, 23,
 24-trimethyl-9, 11-seco-sterol 22(23)-ene-9-one
 B0040
 Trikendiol A0216
 2-(4, 10, 14-Trimethyl-15-oxa-bicyclo[12. 1. 0]pen-
 tadeca-4, 6, 10-trien-7-yl)-propionic acid methyl
 ester B0035
 (3*Z*, 5*E*)-3, 7, 11-Trimethyl-9-oxododeca-1, 3, 5-
 triene B0034
 (2*E*, 4*E*)-2, 6, 10-Trimethylundeca-2, 4, 9-trienal
 B0033
 Tubipolide B D0075
 Tubipolide G D0076
 Ulosantoin A0221
 Valdivones A B0036
 Varacin acetate D0077
 Variolin B A0222
 Verongamine A0223
 Virenamide A D0078
 Wiedendiol-A A0224
 Wiedendiol-B A0225
 Xestobergsterol A A0226
 Xestobergsterol B A0227
 Xestocyclamide A A0228
 Zampanolide A0229