

论文

4-取代芬太尼类化合物的晶体结构和构效关系

胡建国;李玉林;陈冀胜

中国人民解放军药物化学研究所,北京

摘要:

关键词: 晶体结构 芬太尼衍生物 镇痛活性

STUDIES ON CRYSTAL STRUCTURES AND STRUCTUREACTIVITY RELATIONSHIPS OF THE 4-SUBSTITUTED FENTANYL DERIVATIVES

HU Jian-Guo; LI Yu-Lin and CHEN Ji-Sheng

Abstract:

The crystal structures of methyl 4-[N-(cyclopropyl-carbonyl)-N-phenylamino-]-1-(2-phenylethyl)-4-piperidinecarboxylate (R32767) and N-[4-acetyl-1-(2-phenylethyl)-4-piperidinyl]-N-phenylpropanamide (R 32557) have been determined as part of a structure-activity relationship study on a series of 4-substituted fentanyl. R32767: $C_{25}H_{30}N_2O_3$; triclinic, pl; $a=10.280(2)$, $b=10.367(1)$, $c=12.170(1)A$, $\alpha=92.28(1)$, $\beta=102.31(1)$, $\gamma=116.83(1)^\circ$, $Z=2$. R32557: $C_{24}H_{30}N_2O_2 \cdot HCL \cdot 2H_2O$; triclinic, pl; $a=9.369(6)$, $b=9.680(6)$, $c=14.799(9)A$, $\alpha=86.24(5)$, $\beta=76.23(5)$, $\gamma=68.70(5)^\circ$, $Z=2$. The structures of the two are compared with those of R30490, R30730 and R4263. Preliminary study indicates that its toxicity is concerned with angles between the two aromatic rings and the piperidine ring. The potent analgesic activity may correspond to a torsion angle $C_{14}-C_1-N_2-C_19$ (according to locants of R32557) of about 120° .

Keywords: Fentanyl derivatives Analgesic activity Crystal structure

收稿日期 1986-06-05 修回日期 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

通讯作者:

作者简介:

参考文献:

本刊中的类似文章

1. 张尊听;陈莉莉.白杨素衍生物的合成和晶体结构及与DNA的作用[J]. 药学报, 2007,42(5): 492-496
2. 胡昌勤;尹立辉;朗雅宁.头孢唑林钠水合物新晶体及其理化特性的研究[J]. 药学报, 2008,43(8): 868-872
3. 吴楠;吕扬;郑启泰;方唯硕;高永莉;方起程;周同惠.紫杉烷二萜类化合物精细立体结构研究[J]. 药学报, 1998,33(10): 759-763
4. 李麟;李正化.X-射线单晶衍射法研究双炔失碳醇 α -差向异构体的构型[J]. 药学报, 1990,25(6): 435-437
5. 伍伯牧;吕扬.晶体结构微机解析系统——NOMCDSP程序包[J]. 药学报, 1992,27(7): 522-527
6. 陈元柱;黄小荣;吴镛金;邓福孝.雷酚内酯晶体结构的再研究[J]. 药学报, 1992,27(11): 867-870
7. 吕扬;吴楠;康文俊;郑启泰;谢平;陈淑凤;梁晓天.白花败酱醇甙结构的修正[J]. 药学报, 1997,32(11): 879-880

扩展功能

本文信息

- ▶ Supporting info
- ▶ PDF(236KB)
- ▶ [HTML全文]
- ▶ 参考文献

服务与反馈

- ▶ 把本文推荐给朋友
- ▶ 加入我的书架
- ▶ 加入引用管理器
- ▶ 引用本文
- ▶ Email Alert
- ▶ 文章反馈
- ▶ 浏览反馈信息

本文关键词相关文章

- ▶ 晶体结构
- ▶ 芬太尼衍生物
- ▶ 镇痛活性

本文作者相关文章

- ▶ 胡建国
- ▶ 李玉林
- ▶ 陈冀胜

PubMed

- ▶ Article by
- ▶ Article by
- ▶ Article by

8. 李麟; 谢宁; 李正化. α -和 β -双炔基碳酯绝对构型与生物活性的初步探讨[J]. 药学学报, 1996,31(7): 554-557
9. 王智贤; 朱友成; 嵇汝运; 吕扬; 田之悦; 郑启泰. 羟甲芬太尼立体异构体的晶体结构[J]. 药学学报, 1994,29(6): 433-437
10. 吕扬; 郑启泰; 伍伯牧. 中草药化学成分的晶体结构图谱库系统[J]. 药学学报, 1993,28(6): 442-449

文章评论 (请注意: 本站实行文责自负, 请不要发表与学术无关的内容! 评论内容不代表本站观点.)

反馈人	<input type="text"/>	邮箱地址	<input type="text"/>
反馈标题	<input type="text"/>	验证码	<input type="text"/> 6500