

论文

含氮化合物的构型与构象变化对核磁共振图谱的影响含氮化合物的构型与构象变化对核磁共振图谱的影响

华丹宇;易大年;刘基宁

上海医药工业研究院, 上海 200040

摘要:

目的寻找盐酸洛美利嗪等含氮化合物呈现特殊核磁图谱的内在原因。方法假设这些化合物存在构型和构象的变化导致核磁图谱的复杂化。用核磁方法证实这种假设的可信性。结果与结论盐酸洛美利嗪、盐酸西替利嗪两化合物的氮原子翻转形成两种椅式构象。在二甲亚砜溶液中其变换速度与核磁时标相近,无法测得确切的化学位移。所有谱线呈现不同程度的弥散,甚至坍塌、“消失”。加入少量水或升高测试温度降低了溶液的粘度,变换速度快于核磁时标,此时即可获得正常的图谱。芬氟拉明的氨基被樟脑酰胺化后限制了氮的3个键的翻转,不对称氮的存在可产生另一对非对映异构体。其碳谱显示所有谱线倍增的特殊现象可得到合理的解释。

关键词: 核磁共振 氮手性中心 哌嗪环构象变换 盐酸洛美利嗪 盐酸西替利嗪 芬氟拉明樟脑酰胺

Effects of changes in conformation and configuration of N-containing compounds on NMR spectra

HUA Dan-yu; YI Da-nian; LIU Ji-ning

Abstract:

Aim To find the cause of abnormal NMR spectra of lomerizine dihydrochloride, cetirizine dihydrochloride and fenfluramine camphoramide. Methods Hypothesizing, in given conditions, there are changes of stereoisomeric conformation and configuration in structure of N-containing compounds, it results in abnormality of NMR spectra. By using the method of NMR, it is confirmed credibly. Results and Conclusion The moving balance exists between two chair conformations in lomerizine dihydrochloride and cetirizine dihydrochloride. It causes that spin-nuclei of whole molecule are placed in two chemical circumstance. In solution of DMSO-d₆, the speed of conformation reversal equals to the NMR time scale, so that chemical shift of spin-nuclei can not be definitely determined, peaks are broadened and even collapsed. After dropping D₂O or increasing the temperature, the viscosity of the solution is decreased, the speed of reversal is quicker than NMR time scale, then normal spectra are obtained. Owing to the reversal of the three bonds of nitrogen in fenfluramine camphoramide is limited, other pair of diastereoisomer resulted from the asymmetric nitrogen can be detected by NMR. Multiplication of the peaks of ¹³CNMR is reasonably explained.

Keywords: chiral nitrogen center pyrazine ring reversal lomerizine dihydrochloride cetirizine dihydrochloride fenfluramine camphoramide NMR

收稿日期 修回日期 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

通讯作者: 华丹宇

作者简介:

参考文献:

本刊中的类似文章

1. 郑修文;钱文;杭太俊;马海波;张正行.溶液状态下利可君及其有关物质的结构研究[J]. 药学学报, 2006,41(7): 675-679
2. 江洪波;黄静;郭明娟;邹萍;田祥琴.天然高异黄酮的研究进展[J]. 药学学报, 2007,42(2): 118-126

扩展功能

本文信息

- ▶ Supporting info
- ▶ PDF(133KB)
- ▶ [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

- ▶ 核磁共振
- ▶ 氮手性中心
- ▶ 哌嗪环构象变换
- ▶ 盐酸洛美利嗪
- ▶ 盐酸西替利嗪
- ▶ 芬氟拉明樟脑酰胺

本文作者相关文章

- ▶ 华丹宇
- ▶ 易大年
- ▶ 刘基宁

PubMed

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

3. 缪振春; 杜泽涵; 徐桂芬; 石庭森. 吡罗昔康与 β -环糊精包合物结构的核磁共振研究[J]. 药学学报, 1988,23(9): 682-687
4. 郑俊民; 顾学裘; 张尔志; 杨红. 多相脂质体(139)不同温度下的 ^1H NMR谱变化和 ^{13}C NMR谱 T_1 的研究[J]. 药学学报, 1985,20(1): 67-70
5. 林茂; 刘欣; 于德泉; 窦士琦; 张友吉; 李青梅. 胆木新生物碱胆木碱己的结构测定[J]. 药学学报, 1985,20(12): 902-905
6. 刘玉芬; 周玉; 凌大奎. N-去甲基万古霉素的分离分析与鉴定[J]. 药学学报, 1985,20(12): 931-932
7. 司伊康; 徐瑞明; 孔漫; 贺文义; 张守仁. 用固相萃取-核磁共振谱法研究大鼠尿中溴莫普林的代谢产物[J]. 药学学报, 1998,33(9): 697-701
8. 司伊康; 杨春; 孔漫; 徐瑞明; 张守仁; 贺文义. 固相萃取-核磁共振谱法研究曲美布汀的代谢产物[J]. 药学学报, 1999,34(5): 376-378
9. 杨春; 孔漫; 徐瑞明; 张守仁; 贺文义; 司伊康. 固相萃取-核磁共振谱法研究乙哌立松的代谢产物[J]. 药学学报, 2000,35(5): 374-377
10. 杨春; 贺文义; 孔漫; 徐瑞明; 张守仁; 司伊康. 用固相萃取-核磁共振谱法研究大鼠尿液中R-(-)-布洛芬光活代谢产物[J]. 药学学报, 2000,35(11): 843-846
11. 王展; 方积年. 菟丝子多糖H3的研究[J]. 药学学报, 2001,36(3): 192-195
12. 胡红雨. 核磁共振用于蛋白质抑制剂的筛选和先导药物的发现[J]. 药学学报, 2002,37(2): 158-160
13. 李茜; 沈文斌; 邹巧根. 盐酸西替利嗪的NMR研究[J]. 药学学报, 2003,38(10): 767-770
14. 廖时萱; 韩公羽; 张蕴茹; 郑启泰; 贺存恒. 假鹰爪根化学成分的研究[J]. 药学学报, 1989,24(2): 110-113
15. 温敬铨; 崔文. 氟脲嘧啶和呋氟脲嘧啶的 β -环糊精包合物的组成和稳定常数的核磁共振研究[J]. 药学学报, 1990,25(5): 345-348
16. 王惠康; 何侃; 徐宏喜; 张志亮; 王映芬; 菊池彻; 手塚康弘. 金翼黄芪甙A的化学结构和绵毛黄芪甙X V及7,2'-二羟基-3',4'-二甲氧基异黄烷-7-O- β -D-葡萄糖甙二维核磁共振谱的研究[J]. 药学学报, 1990,25(6): 445-450
17. 汪茂田; 李宴子; 赵天增; 冀春茹; 冯卫生; 刘延泽. 芫花叶中的新木脂素内酯[J]. 药学学报, 1990,25(11): 866-868
18. 陈亚民; 卢英华; 陈雁君; 马存升; 于德泉. 用二维核磁共振法研究肿足蕨碱的结构[J]. 药学学报, 1991,26(2): 123-127
19. 庾石山; 肖倬殷. 异叶梁王茶化学成分的研究[J]. 药学学报, 1991,26(4): 261-266
20. 李朝明; 张宪民; 周韵丽; 黄丽瑛; 陶国达. 傣药小灯台中的吲哚生物碱[J]. 药学学报, 1993,28(7): 512-515
21. 张川; 蒋雪涛; 杨根金. 核磁共振法测定喃氟啶温度敏感性脂质体的相转变温度[J]. 药学学报, 1997,32(1): 69-72
22. 王春华; 冯亦璞; 吴元鏊. 丁基苯酚在大鼠中代谢产物的研究[J]. 药学学报, 1997,32(9): 641-646
23. 王明安; 刘军; 陈馥衡. 刺南蛇藤倍半萜的研究[J]. 药学学报, 1997,32(5): 368-372
24. 段传凤; 杨依军. 褪黑激素(N-乙酰基-5-甲氧基色胺)的合成[J]. 药学学报, 1996,31(3): 182-185
25. 蔡宝昌; 吴皓; 杨秀伟; 服部征雄; 难波恒雄. 马钱子中16个生物碱类化合物 ^{13}C NMR谱的数据分析[J]. 药学学报, 1994,29(1): 44-48
26. 孔令义; 李铤; 裴月湖; 于荣敏; 闵知大; 朱廷儒. 白花前胡中白花前胡甙和Pd-C-I的分离和鉴定[J]. 药学学报, 1994,29(4): 276-280
27. 于德泉; 谢凤指; 贺文义; 梁晓天. 用二维核磁共振技术研究野菊花三醇的结构[J]. 药学学报, 1992,27(3): 191-196
28. 庾石山; 肖倬殷. 异叶梁王茶甙III和IV的结构[J]. 药学学报, 1992,27(1): 42-47
29. 温敬铨; 王建中; 邵立人. HM-PAO非对映立体异构体的核磁共振鉴定及立体异构纯度的测定[J]. 药学学报, 1989,24(10): 733-736
30. 缪振春; 高建华; 冯锐; 张其措. 用NOE差谱和二维核磁共振技术研究3S-取代烷氧基-奎宁环烷的立体化学[J]. 药学学报, 1989,24(3): 194-199
31. 缪振春; 杨振生; 冯锐. 远程二维核磁共振和NOE差谱法研究新生物碱马尾杉碱N的结构[J]. 药学学报, 1989,24(2): 114-117
32. 刘庆华; 贾晓光; 任永凤; 木哈塔尔; 梁晓天. 新疆贝母化学成分的研究[J]. 药学学报, 1984,19(12): 894-898
33. 宋国强; 贺贤国. 十二个葱醌化合物的质子核磁共振谱研究[J]. 药学学报, 1983,18(5): 345-350

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 | | | |

反馈
标题

验证码

7187