

论文

抗疟药  $\alpha$ -(二正丁氨基甲基)-2,7-二氯-9-对氯亚苄基-4-苄甲醇的晶体和分子结构

钟景星;邓蓉仙;王俭;郑启泰;焦克芳

军事医学科学院微生物流行病研究所,北京100071; \*中国医学科学院药物研究所,北京100050; \*\*军事医学科学院药理毒理研究所,北京100850

摘要:

用X 晶体衍射测定了氨基醇类抗疟药本苄醇( benflumetol I )的单晶结构,并与已知同类抗疟药金鸡纳生物碱进行了比较。再一次说明了氨基醇类化合物产生抗疟作用的三维空间结构特征。本苄醇的苄环平面与对氯苯基平面的二面角为52.8°。分子内 N-O 距离为2.709A,这一距离与金鸡纳生物碱分子内脂肪氮原子与氧原子之间距离相近。侧链中 N-C-C-O 的扭转角为47.6°。本苄醇单晶结构中存在分子内氢键,而未发现分子间氢键,这与以往认为产生抗疟作用的氨基醇类化合物存在分子间氢键而无分子内氢键不同。

关键词: 抗疟药 本苄醇 金鸡纳生物碱 X-晶体衍射

CRYSTAL AND MOLECULAR STRUCTURE OF THE ANTIMALARIAL AGENT  $\alpha$ -(DI BUTYLAMINOMETHYL)-2,7-DICHLORO-9-(p-CHLOROBENZYLI DENE)-4-FLUORENEMETHANOL(BENFLUMETOL)

JX Zhong; RX Deng; J Wang; QT Zhengand KF Jiao

Abstract:

The three-dimensional crystal and molecular structure of benflumetol(I),  $\alpha$ -(dibutylaminomethyl)-2,7-dichloro-9-(p-chlorobenzylidene)-4-fluorene-methanol, was determined by X-ray crystallography and compared with the crystal structures of the cinchona alkaloids. The aromatic rings of fluorene-phenyl system of benflumetol are twisted from each other by 52.8°. The torsion angle of N-C-C-O of benflumetol is 47.6°. The intramolecular aliphatic N-O distance in benflumetol is 2.709A, which is close to the N-O distance found in antimalarial cinchona alkaloids. Benflumetol contains an intramolecular hydrogen bond between the aliphatic nitrogen and oxygen atoms, no intermolecular hydrogen bond was found, which is different from the known amino alcohol antimalarials.

Keywords: Benflumetol Cinchona alkaloids X-ray Antimalarial

收稿日期 1996-09-05 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. 冯正;吴祖帆;王翠英;江善根.<sup>3</sup>H-咯萘啶在小鼠体内的分布和排泄[J]. 药学报, 1988,23(8): 629-632
2. 李成韶;杜以兰. 效量半衰期 $t_{1/2}(ED)$ 及其计算公式[J]. 药学报, 1986,21(3): 165-169
3. 冯正;江乃雄;王翠英;张伟. 抗疟药咯萘啶在兔体内的药代动力学[J]. 药学报, 1986,21(11): 801-805
4. 陈一心;虞佩琳;李英;嵇汝运. 青蒿素类似物的研究 III. 二氢青蒿素二元酸双酯和单酯类衍生物的合成[J]. 药学报

扩展功能

本文信息

- ▶ Supporting info
- ▶ PDF(703KB)
- ▶ [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

- ▶ 抗疟药
- ▶ 本苄醇
- ▶ 金鸡纳生物碱
- ▶ X-晶体衍射

本文作者相关文章

- ▶ 钟景星
- ▶ 邓蓉仙
- ▶ 王俭
- ▶ 郑启泰
- ▶ 焦克芳

PubMed

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

- 报, 1985,20(2): 105-111
5. 虞佩琳;陈一心;李英;嵇汝运.青蒿素类似物的研究 IV.含卤素、氮、硫等杂原子的青蒿素衍生物的合成[J]. 药学学报, 1985,20(5): 357-365
  6. 陈一心;虞佩琳;李英;嵇汝运.青蒿素类似物的研究 VII.双(二氢青蒿素)醚和双(二氢脱氧青蒿素)醚类化合物的合成[J]. 药学学报, 1985,20(6): 470-473
  7. 张景丽;李金翠;吴毓林.臭氧化合成青蒿素类似物[J]. 药学学报, 1988,23(6): 452-455
  8. 李成韶;杜以兰;张翠莲;赵新静.双氢青蒿素对小鼠抗疟作用的药效动力学[J]. 药学学报, 1989,24(7): 487-489
  9. 汪南华;王锐;冷宗康;彭司勋.2-甲酰(乙酰)取代喹啉缩氨基硫脲的合成[J]. 药学学报, 1990,25(12): 920-925
  10. 李铜铃;庞其捷;贺于玲;王平.肝靶向抗疟药半乳糖基拟糖白蛋白-伯氨喹偶联物和磷酸伯氨喹的药代动力学[J]. 药学学报, 1995,30(10): 721-725
  11. 周伟澄;忻志铭;张秀平;沈杰;丘巧平.一种新的三嗪类抗锥虫药:SIPI-1029及其类似物的合成和抗原虫作用[J]. 药学学报, 1996,31(11): 823-830
  12. 仲伯华;邓蓉仙;时云林;李国富;钟景星;杨俊德;王俭.4-甲基-5-取代苯氧基-伯氨喹类似物的合成及抗疟活性的初步评价[J]. 药学学报, 1994,29(4): 268-275
  13. 叶斌;吴毓林;李国福;焦岫卿.脱羧青蒿素的抗疟活性[J]. 药学学报, 1991,26(3): 228-230
  14. 仲伯华;邓蓉仙;钟景星;王俭.2-甲基-5-取代苯氧基伯氨喹的合成及其抗疟活性[J]. 药学学报, 1990,25(3): 167-172
  15. 宣文漪;赵一;李爱媛;谢沛珊;刘旭.青蒿琥酯经皮肤吸收治疗猴疟的疗效[J]. 药学学报, 1990,25(3): 220-222
  16. 蒙小英;张秀平;李炳生;李高德.2,4-二氨基-5-甲基-6-取代苯氨基喹啉类化合物的合成及其抗疟和抗肿瘤作用[J]. 药学学报, 1989,24(8): 578-586
  17. 杨忠顺;李英.与青蒿素相关的1,2,4-三恶烷及臭氧化物的研究进展[J]. 药学学报, 2005,40(12): 1057-1063
  18. 姚文莉;沈季华;张明立;王云玲;张洪北;王全典;李福林.抗疟药的研究 VII.α-(烷氨基)-2-苯基-4-喹啉甲腈类化合物的合成[J]. 药学学报, 1984,19(1): 76-78
  19. 周义清;李国福;钟景星;董正福;高徐生.2,4-二氨基-6-取代氨基磺酰喹啉类化合物抗鼠疟作用的研究[J]. 药学学报, 1984,19(4): 245-250
  20. 赵德昌;张志祥;时云林;丁德本;王淑芬;杨俊德;郭保忠;邓蓉仙.抗疟药的研究——IX.5-取代苯氧基-6-甲氧基-8-[(1-乙基-4-氨基丁基)氨基]喹啉类化合物的合成[J]. 药学学报, 1984,19(4): 303-305
  21. 邓蓉仙;钟景星;董正福;王俭;丁德本;时云林;王淑芬;杨俊德;郭保忠;高徐生.抗疟药的研究 XI.4-甲基-5取代苯氧基伯氨喹的合成及其抗疟作用[J]. 药学学报, 1984,19(5): 343-348
  22. 李成韶;杜以兰.根据青蒿素药效半衰期制订给药方案的探讨[J]. 药学学报, 1984,19(6): 410-414
  23. 陈林;郭凤川;戴祖瑞;李从军.伯氏疟原虫ANKA株模型的建立及其在抗疟药筛选中的应用[J]. 药学学报, 1984,19(10): 732-736
  24. 张秀平;陈根娣;戴祖瑞;马志明.疟疾防治药物的研究——XII.2,4-二取代-6-取代氨基喹啉类化合物的合成及其抗疟作用[J]. 药学学报, 1984,19(10): 792-795
  25. 陈根娣;张秀平.疟疾防治药物的研究——XIII.3-取代氨基喹啉酮-4衍生物的合成[J]. 药学学报, 1984,19(10): 796-798
  26. 张洪北;邓蓉仙;丁德本;时云林;杨俊德;郭宝忠.抗疟药的研究——XVI.2,4-二氨基-6-[(取代苯基)硫代、亚硫酸、硫酰]喹啉类化合物的合成及抗疟作用[J]. 药学学报, 1984,19(11): 860-864
  27. 许德余;陈雄;殷祥生;宁晓闽.合成抗疟药研究 VI.三嗪类化合物的合成及其抗疟活性[J]. 药学学报, 1983,18(1): 20-24
  28. 钟景星;张明立;王云玲;董正福;邓蓉仙.抗疟药的研究IV——2,4-二氨基-6-取代氨基磺酰喹啉的合成[J]. 药学学报, 1983,18(3): 231-233
  29. 张志祥;张松;丁德本;邓蓉仙.抗疟药的研究——III.2-(取代苯乙炔基)-4-氨基吡啶类的合成[J]. 药学学报, 1983,18(4): 261-265
  30. 戴祖瑞;陈林;李裕棠;龚建章.食蟹猴疟原虫——斯氏按蚊系统猴疟模型的一些生物学特性和对常用抗疟药物的生物效应[J]. 药学学报, 1983,18(12): 881-886
  31. 陈昌;高芳华;王灵.抗疟新药的研究:笨骈[g]喹啉氨基酚双Mannich碱类化合物的合成[J]. 药学学报, 1983,18(12): 965-968
  32. 赵德昌;钟景星;耿荣良;李国富;丁德本;邓蓉仙.抗疟药的研究——II.α-烷氨基甲基-1,6-二氯-4-苄甲醇类化合物的合成[J]. 药学学报, 1982,17(1): 28-32
  33. 管惟滨;黄文锦;周元昌;龚建章.体外微量测定抗疟药药效的方法[J]. 药学学报, 1982,17(2): 139-142
  34. 邵葆若;叶秀玉;郑浩.伯氏鼠疟原虫(*Plasmodium berghei*)对咯萘啶抗药性的研究[J]. 药学学报, 1982,17(8): 566-571
  35. 李广云;张秀平;戴祖瑞;陈林.疟疾防治药物的研究——VII.2,4-二哌啶(或吡咯啶)基-6-取代氨基喹啉类化合物的合成及其抗疟作用[J]. 药学学报, 1982,17(11): 827-834
  36. 朱定球;戴祖瑞;李进才;蒋增康.长效抗疟药—喹啉防治鼠疟的实验研究[J]. 药学学报, 1982,17(12): 894-898

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" value="5223"/>