

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ ДАННЫЕ
 ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

II*. ПАРАМЕТРЫ ЭЛЕМЕНТАРНОЙ ЯЧЕЙКИ И ПРОСТРАНСТВЕННЫЕ
 ГРУППЫ НЕКОТОРЫХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ

Р. Л. АВОЯН и О. Л. МНДЖОЯН

Институт тонкой органической химии АН Армянской ССР

Поступило 27 XII 1968

Получены параметры элементарной ячейки и пространственные группы пяти лекарственных препаратов.

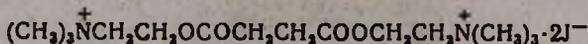
Библ. ссылок 4.

За последние годы совместными исследованиями химиков, фармакологов и клиницистов для медицинской практики были предложены препараты „Дитилин“ [1], „Субехолин“ [2], „Месфенал“ [3], „Арпенал“ [3], „Этпенал“ [4] и т. д. Были определены также некоторые физические и химические свойства этих соединений. Однако, для изучения зависимости механизма действия от реакционной способности необходимо также определить истинное геометрическое построение, т. е. реальную конформацию молекул этих веществ.

Структура и физиологические свойства ацетилхолина и подобных соединений в литературе обсуждались неоднократно. Тем не менее, не все аспекты механизма влияния ацетилхолина на живые организмы выяснены, а вышеупомянутые соединения по строению в той или иной степени аналогичны ацетилхолину, так что определение геометрии их молекул дало бы много ценного при корреляции строения и физиологического воздействия молекул.

Нами предпринято систематическое рентгеноструктурное исследование этих препаратов с целью выяснить их кристаллическую и молекулярную структуру. В настоящем сообщении приведены параметры элементарной ячейки и пространственные группы пяти препаратов, определенные рентгенографически (методы Лауэ, качания и фотографирования обратной решетки, излучение железное).

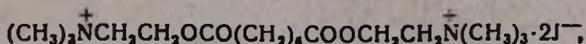
„Дитилин“ (йодметилат β-диметиламиноэтилового эфира янтарной кислоты) [1].



* Сообщение I см. Арм. хим. ж., 22, 208 (1969).

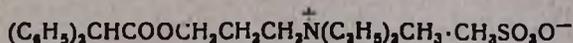
из водного раствора этилового спирта кристаллизуется в моноклинной сингонии в виде прозрачных пластинок или призм вытянутых вдоль кристаллографической оси b . Параметры элементарной ячейки следующие: $a = 12,79 \pm 0,03$ А, $b = 8,29 \pm 0,02$ А, $c = 9,62 \pm 0,03$ А, $\beta = 96^\circ 50' \pm 20'$, $V = 1011$ А³, $N = 2$, $d_{\text{выч.}} = 1,798$ г/см³, пр. гр. $P2_1$.

„Субехолин“ (дийодметилат β -диметиламиноэтилового эфира пробоковой кислоты) [2]



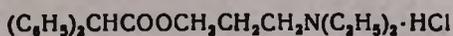
перекристаллизовываясь из воды, дает тонкие прозрачные иглы, вытянутые вдоль второй по величине оси триклинной сингонии. Параметры элементарной ячейки таковы: $a = 6,35 \pm 0,02$ А, $b = 9,72 \pm 0,02$ А, $c = 14,51 \pm 0,04$ А, $\alpha = 101^\circ 57' \pm 15'$, $\beta = 78^\circ 12' \pm 15'$, $\gamma = 129^\circ 51' \pm 15'$, $V = 670$ А³, $N = 1$, $d_{\text{выч.}} = 1,497$ г/см³, пр. гр. $P\bar{1}$.

„Месфенал“ (метилсульфометилат γ -диэтиламинопропилового эфира дифенилуксусной кислоты) [3]



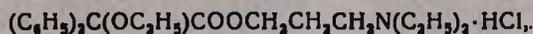
перекристаллизовали из смеси ацетона с этиловым спиртом. Кристаллики в виде хорошо образованных прозрачных пластинок, несколько вытянутых вдоль оси b , принадлежат к моноклинной сингонии. Параметры ячейки таковы: $a = 8,72 \pm 0,02$ А, $b = 9,49 \pm 0,03$ А, $c = 26,85 \pm 0,06$ А, $\beta = 101^\circ 10' \pm 15'$, $V = 2180$ А³, $N = 4$, $d_{\text{выч.}} = 1,310$ г/см³, пр. гр. $P2_1/c$.

„Арпенал“ (солянокислая соль γ -диэтиламинопропилового эфира дифенилуксусной кислоты) [3]



из водного раствора этилового спирта кристаллизуется в моноклинной сингонии. Кристаллики представляют собой прозрачные чешуйки. Параметры ячейки следующие: $a = 18,72 \pm 0,05$ А, $b = 7,20 \pm 0,02$ А, $c = 16,03 \pm 0,05$ А, $\beta = 109^\circ 15' \pm 15'$, $V = 2040$ А³, $N = 4$, $d_{\text{выч.}} = 1,181$ г/см³, пр. гр. $P2_1/c$.

„Этпенал“ (солянокислая соль γ -диэтиламинопропилового эфира этоксибифенилуксусной кислоты) [4]



перекристаллизовываясь из этилового спирта, дает кристаллики в виде прозрачных пластинок. Сингония моноклинная, $a = 18,73 \pm 0,05$ А, $b = 12,17 \pm 0,03$ А, $c = 10,45 \pm 0,03$ А, $\beta = 98^\circ 00' \pm 20'$, $V = 2359$ А³, $N = 4$, $d_{\text{выч.}} = 1,058$ г/см³, пр. гр. $P2_1/c$.

Авторы признательны академику АН Арм ССР А. Л. Миджояну за интерес к работе.

ՕՐԳԱՆԱԿԱՆ ՄԻԱՑՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԲՅՈՒՐԵՂԱԳԻՏԱԿԱՆ ՏՎՅԱԼՆԵՐԸ

II. ՄԻ ՔԱՆԻ ԴԵՂԱՆՑՈՒԹԵՐԻ ՏԱՐՐԱԿԱՆ ԲՋԻՋՆԵՐԻ ՊԱՐԱՄԵՏՐՆԵՐԸ ԵՎ ՏԱՐԱԾԱԿԱՆ ԽՄԲԵՐԸ

Հ. Լ. ԱՎՅՅԱՆ ԵՎ Հ. Լ. ՄՆԺՋՅԱՆ

Ա մ փ ո փ ո լ մ

Ստացվել են բժշկական պրակտիկայում օգտագործվող հինգ պրեկարատների՝ դիտիլինի, սոբեխոլինի, մեսֆենալի, արփենալի և էտիենալի բյուրեղագիտական տվյալները:

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. А. Л. Мнджоян, О. Л. Мнджоян, Дитилин и опыт его клинического применения, Ереван, 1957, стр. 7—28.
2. А. Л. Мнджоян, О. Л. Мнджоян, О. Е. Гаспарян, ДАН АрмССР, 19, 143 (1954), авт. свид. № 144837 от 24 февраля 1962 г., Р. С. Рыболовлев, Фармакология и токсикология, 6, 661 (1963).
3. О. Л. Мнджоян, Арпенал и опыт его клинического применения, Ереван, 1964, стр. 31—56.
4. О. Л. Мнджоян, Э. Р. Багдасарян, Арм. хим. ж., 19, 716 (1966).