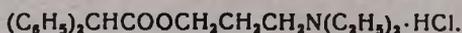


КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ЛЕКАРСТВЕННОГО ПРЕПАРАТА АРПЕНАЛ

Лекарственный препарат арпенал—гидрохлорид γ -диэтиламинопропилового эфира α -дифенилуксусной кислоты—обладает сильным никотинолитическим действием [1]. Другой лекарственный препарат эппенал—гидрохлорид γ -диэтиламинопропилового эфира α -этоксидифенилуксусной кислоты—отличается смешанной мускарино- и никотинолитической активностью [2]. Молекулярные структуры этих и аналогичных соединений помогут подойти к решению проблемы связи структуры и физиологической активности веществ, а также к уточнению существующих схем холинорецепторов скелетных мышц высших позвоночных [3,5].

Результаты рентгеноструктурного исследования гидробромидных аналогов арпенала [4] и эппенала [6] опубликованы ранее. В данном сообщении приведены предварительные результаты трехмерного рентгеноструктурного исследования арпенала:



Перекристаллизация произведена из раствора этилового спирта в дистиллированной воде. Получены прозрачные чешуйки, удлиненные вдоль кристаллографической оси моноклинной сингонии. Кристаллографические данные (методы Лауэ, качания и фотографирования обратной решетки, λ_{Cu}) следующие: $a = 17,36 \pm 0,05$ А; $b = 7,22 \pm 0,02$ А; $c = 17,70 \pm 0,05$ А; $\beta = 109^\circ 30' \pm 15'$, $d_{изм.} = 1,10$ г/см³, $d_{выч.} = 1,152$ г/см³, $N = 4$, пространственная группа $P2_1/c$.

Трехмерный эксперимент (развертки $h0l \div h4l$) для определения структуры снят на эквинаклонном рентгенгонометре Вайсгенберга, на неотфильтрованном медном излучении. Оценка отражений на рентгенограммах произведена визуально, сравнением со стандартными шкалами почернения. При переходе от интенсивностей рефлексов к структурным факторам учтены факторы Лоренца и поляризационный. Фактор поглощения не учтен (размеры кристалла $0,1 \times 0,3 \times 0,7$ мм). Общее количество независимых оцененных рефлексов равно 970. Приблизительные координаты атомов для уточнения структуры взяты из ранее расшифрованного изоструктурного гидробромидного аналога арпенала [5]. Уточнение проведено двумя последовательными приближениями рядов Фурье и методом наименьших квадратов до $R = 22,2\%$ ($V = 4,2$ А³). Координаты атомов на данной стадии исследования приведены в таблице, а на рисунке изображена проекция структуры вдоль оси b . В дальнейшем уточнение структуры будет продолжено.

Таблица

Атом	X	Y	Z	Атом	X	Y	Z
Cl	0,557	0,690	0,396	C ₁₀	-0,103	0,164	0,164
O ₁	0,193	0,007	0,276	C ₁₁	-0,113	0,015	0,111
O ₂	0,263	0,283	0,302	C ₁₂	-0,048	-0,063	0,085
N	0,567	0,263	0,397	C ₁₃	0,034	0,027	0,121
C ₁	0,124	0,296	0,205	C ₁₄	0,194	0,173	0,264
C ₂	0,150	0,359	0,133	C ₁₅	0,340	0,191	0,363
C ₃	0,208	0,264	0,104	C ₁₆	0,410	0,280	0,338
C ₄	0,223	0,327	0,036	C ₁₇	0,488	0,183	0,415
C ₅	0,176	0,472	-0,013	C ₁₈	0,643	0,201	0,473
C ₆	0,113	0,569	0,014	C ₁₉	0,642	0,307	0,548
C ₇	0,103	0,507	0,088	C ₂₀	0,578	0,195	0,316
C ₈	0,047	0,170	0,177	C ₂₁	0,652	0,279	0,304
C ₉	-0,022	0,253	0,199				

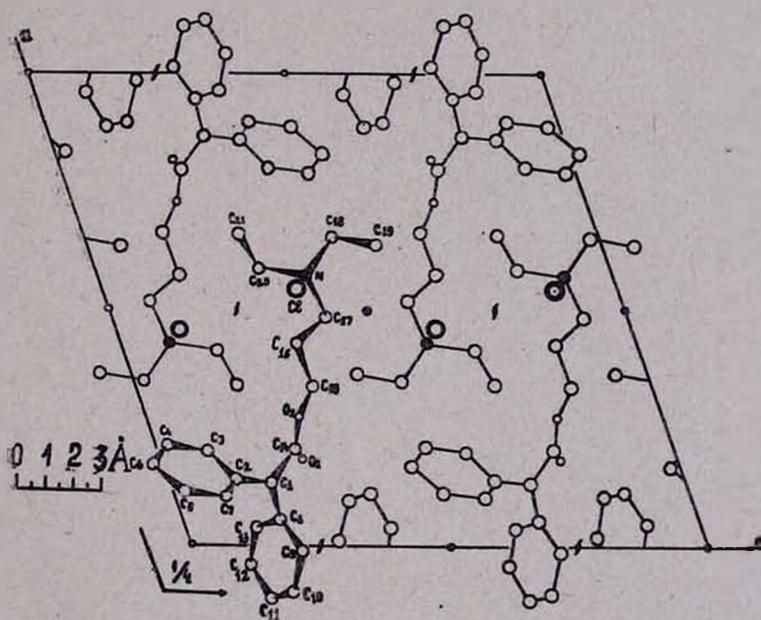


рис.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Арпенал и опыт его клинического применения, Под ред. А. Л. Миджояна, Изд. АН Арм. ССР, Ереван, 1964.
2. О. Л. Миджоян, Э. Р. Багдасарян, Арм. хим. ж., 19, 176 (1966).
3. М. Я. Михельсон, Э. В. Зеймале, Ацетилхолин, Изд. «Наука», Л., 1970.
4. Р. Л. Авоян, Э. Р. Аракелова, А. А. Аветисян, Э. Г. Арутюнян, Арм. хим. ж., в печати.
5. Р. Л. Авоян, А. А. Аветисян, Э. Р. Аракелова, Биол. ж., Армения, 25, 11 (1972).
6. Р. Л. Авоян, А. А. Аветисян, О. Л. Миджоян, Э. Р. Багдасарян, Э. Г. Арутюнян, Арм. хим. ж., 24, 76 (1971).

Институт тонкой органической химии
им. А. Л. Миджояна

Р. Л. АВОЯН,
Э. Р. АРАКЕЛОВА,
Э. Г. АРУТЮНЯН

Поступило 19 V 1972