

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 548.73

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ДИТИЛИНА

А. Л. МНДЖОЯН, Р. Л. АВОЯН и Э. Г. АРУТЮНЯН

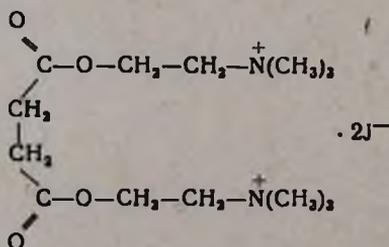
Институт тонкой органической химии АН Армянской ССР

Поступило 26 XII 1969.

В сообщении приведены результаты предварительного рентгеноструктурного анализа дитилина.

За последние годы значительно возрос интерес к структурам молекул, содержащих четвертичные аммониевые группировки. Определены структуры солей холина [1], ацетилхолина [2], мускарина [3] и т. д. и делаются попытки трактовать физиологическую активность соединений в зависимости от строения их молекул [4, 5, 6]. Однако пока нет достаточного материала для установления строго научной связи между структурой молекулы и ее свойствами. Теоретические спекуляции большей частью основываются на предполагаемых данных: из структурных формул молекул делаются выводы об их строении [4], что, мягко говоря, не достаточно надежно, особенно когда речь идет о несопряженных системах.

С целью получения объективных структурных данных о физиологически активных препаратах нами в ИТОХ АН Арм.ССР начаты систематические рентгеноструктурные исследования, у нас же синтезированных моно- и бис-четвертичных аммониевых соединений. В этом сообщении приведены результаты предварительного рентгеноструктурного анализа дитилина.



Дитилин (дийодметилат диметиламиноэтилового эфира янтарной кислоты) является курареподобным препаратом и широко применяется

в хирургической и психиатрической практике в качестве мышечного релаксанта [7].

Из водного раствора этилового спирта дитилин дает прозрачные пластинки или призмы, вытянутые вдоль кристаллографической оси в моноклинной сингонии. Параметры элементарной ячейки [8] следующие: $a = 12,79 \pm 0,03 \text{ \AA}$, $b = 8,29 \pm 0,02 \text{ \AA}$, $c = 9,73 \pm 0,03 \text{ \AA}$, $\beta = 96^\circ 50' \pm 20'$, $N = 2$, $d_{\text{изм}} = 1,76 \text{ г/см}^3$, $d_{\text{внч.}} = 1,798 \text{ г/см}^3$, пр. гр. $P2_1$. Молекулы занимают общее положение.

Таблица

Атом	x	y	z	Атом	x	y	z
J_1^-	-0,234	-0,017	0,415	C_{10}	0,697	0,438	0,268
J_2^-	0,122	0,014	0,140	C_{11}	0,788	0,555	0,245
C_1	0,150	0,525	-0,030	C_{12}	0,940	0,340	0,280
C_2	0,325	0,650	0,020	C_{13}	0,955	0,650	0,285
C_3	0,258	0,540	0,215	C_{14}	0,902	0,560	0,500
C_4	0,313	0,363	0,023	N_1	0,262	0,490	0,048
C_5	0,423	0,335	0,073	N_2	0,910	0,485	0,340
C_6	0,420	0,043	0,115	O_1	0,418	0,238	0,188
C_7	0,500	0,875	0,125	O_2	0,383	0,925	0,150
C_8	0,567	0,800	0,250	O_3	0,450	0,625	0,175
C_9	0,550	0,613	0,300	O_4	0,650	0,538	0,388

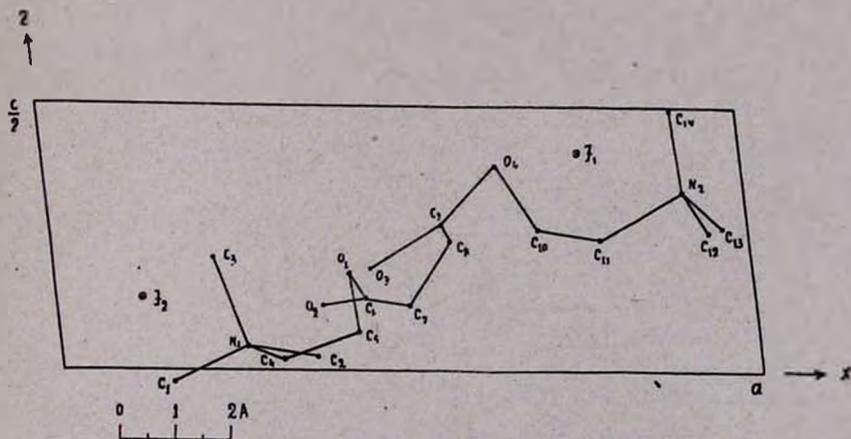


Рис.

Эксперимент структурного анализа проводился на камере типа РГНС на неотфильтрованном медном излучении. При пересчете интенсивностей 630 независимых ненулевых рефлексов в структурные факторы учтены факторы Лоренца и поляризации. Расшифровка проведена обычным методом тяжелого атома. Структура уточнялась последовательными приближениями электронной плотности и методом наимень-

ших квадратов в изотропном приближении тепловых параметров до $R=15,5\%$ ($B=4,6A^2$). Координаты атомов приведены в таблице, а проекция молекулы вдоль оси b — на рисунке. Как видно из рисунка, молекула в кристалле не сохраняет свою собственную симметрию. Структура подлежит дальнейшему уточнению. До представления этого сообщения в редакцию появилась публикация относительно структуры иона сукцинилхолина [9] в трех солях, одна из которых является йодной солью (дитилин). Количественных структурных данных в этом сообщении нет.

Авторы выражают благодарность О. Л. Мнджояну за интерес к структуре дитилина и предоставление препарата для исследования.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. *M. E. Senko, D. H. Templeton, Acta Cryst.*, **13**, 281 (1960).
2. *F. G. Canepa, P. Paullng, H. Sörum, Nature*, **210**, 907 (1966).
3. *F. Jellinek, Acta Cryst.*, **10**, 277 (1957).
4. *N. V. Khromov-Bortsov, M. F. Michelson, Pharmac. Rev.*, **18**, 3, 1051 (1966).
5. *F. G. Canepa, Nature*, **195**, 573 (1962).
6. *K. Lonsdale, H. J. Milledge, Nature*, **206**, 407 (1965).
7. *А. Л. Мнджоян, О. Л. Мнджоян, Дитилин и опыт его клинического применения, Изд-во АН АрмССР, Ереван, 1957.*
8. *Р. Л. Авоян, О. Л. Мнджоян, Арм. хим. ж.*, **22**, 574 (1969).
9. *B. Jensen, Acta Cryst.*, **A25**, 202 (1969).