云 南 植 物 研 究 1990; 12 (1): 111—112
Acta Botanica Yunnanica

清香桂碱A的结构

邱明华 贺春恒[1] 聂瑞麟* 郑启泰[1] 周 俊
(中国科学院昆明植物研究所植物化学开放研究实验室，昆明)
(中国医学科学院药物研究所[1]，北京)

THE STRUCTURE OF SARCORUCININE A

Qiu Minghua, He Cunheng[1], Nie Ruilin*, Zheng qitai[1], Zhou Jun
(*Laboratory of phytochemistry, Kunming Institute of Botony, Academia Sinica, Kunming*)
(*Institute of Materia Medica, Chinese Academy of Medical Sciences*[1], *Beijing*)

关键词 清香桂；清香桂碱A；X-衍射
Key words *Sarcococca ruscifolia*; Sarcorucinine A; X-ray

清香桂碱A (sarcorucinine A) 是黄杨科清香桂属植物 (*Sarcococca ruscifolia* Stapf.) 中含量最高的一个新甾体生物碱 (约达地上部分干重的0.1%)，量较微的清香桂碱D (sarcorucinine D) 结构已报道[1)]。由于碱A性质奇异，虽经多种薄层方法检测为单一斑点，但^{13}C NMR谱的碳数目使我们十分困惑，怀疑它是否为不饱和同系物混晶。而氢化、溴化、碱解均表现出特异的化学行为，因此只好用X-晶体衍射分析方法测定其结构。现将其一般性质及X-晶体衍射分析结果报道，测定细节将和清香桂碱B另文报告。

清香桂碱A (sarcorucinine A)：mp 162—163°C；无色透明状晶 (CH_3OH)；UV λ_{max}^{EtOH} 261nm；IR ν_{max}^{nujol}：1668，1060，1376 cm^{-1}；MS m/z(%)：384(4.5)(M^+)，84(100)、110(60)。

X-ray：正交晶系，空间群为$P2_12_12_1$，晶胞参数 a = 7.180 (1)，b = 10.392(1)，c = 31.559 (6) Å，晶胞内分子数 Z = 4。应用R3 m/E四园衍射仪收集衍射强度数据，CuKα辐射，石墨单色器，掠射角θ范围0—57°，所得独立衍射点为1865个，可观察点〔I ≥3σ(1)〕为1552个。直接法(SHELXTL程序)从E图上获得22个非氢原子位置，经最小二乘法与Fourier综合法交替进行，获得全部非氢原子位置，并判断了氮、氧原子种类。对结构参数(原子坐标，各向异性热振动参数)进行最小二乘修正，最终可靠因子

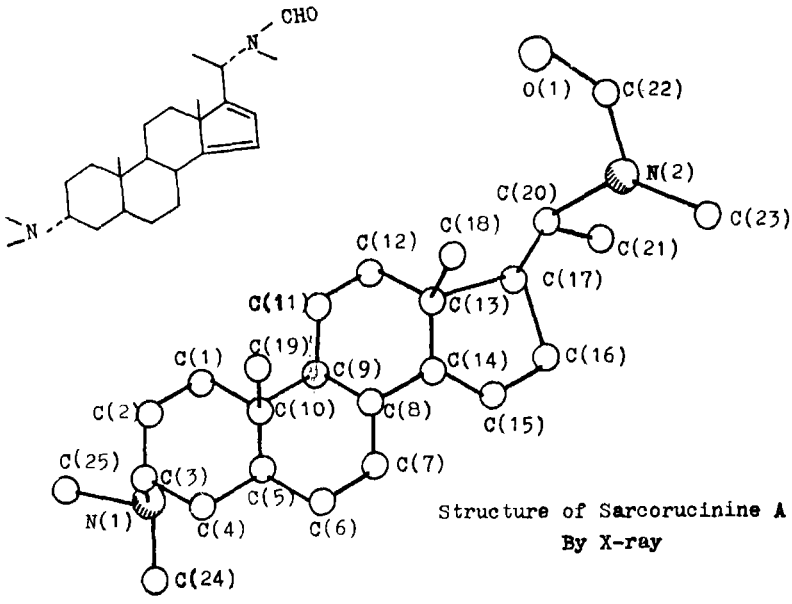
1989-05-18收稿

1) 邱明华等. 植物学报 1989; 31(7):535—539

* 通讯联系人

© 1994-2010 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

R = 0.0632，结果表明其分子式为$C_{25}H_{40}N_2O$。分子骨架由三个六元环和一个五元环组成：A、B、C均为椅式，A/B、B/C为反式联结。如按甾体构型指定β-CH_3(C19)，则其余侧链为α-N(1)$\begin{matrix}CH_3\\CH_3\end{matrix}$，β-$CH_3$(C18)，C(20)—C(17)相对D环呈平键形式(e)，N(2)—C(20)呈直立键形式(a)，C(22)—N(2)呈平键(e)。骨架中氮原子N(1)，与取代基构成平面形式，氮原子N(2)，则呈四面体形式，表明孤电子对存在。结晶状态下N(1)上的两个甲基C(24)、C(25)以及C(20)—N(2)两侧的取代基C(21)、C(22)、C(23)和O(1)均存在取向无序状态。相应的键长、键角值具有平均意义。



Structure of Sarcorucinine A
By X-ray

© 1994-2010 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net