โครงสร้างสามมิติของสารผลิตภัณฑ์ธรรมชาติ

Three Dimensional Structures of Natural Products

ผลิต - วิจัย

สมบ 9
เลขหมู่ QD921 ช75 2538 ฉ.1
เลขทะ...
5 ก.ค. 2538

Order Key 4272
BIB Key 76969

เชวง ภควัตชัย
ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์
มหาวิทยาลัยสงขลานครินทร์

ทุนอุดหนุนการวิจัยจากงบประมาณคณะวิทยาศาสตร์ พ.ศ. 2532,2533

บทคัดย่อ

ได้ศึกษาโครงสร้างสามมิติของผลึกสารผลิตภัณฑ์ธรรมชาติดังต่อไปนี้คือ bicyclomangostin (I), 2-methyl-*N*-[1'-(1"-oxo-3"-phenylprop-2"enyl)pyrrolidin-2'-yl]butanamide (odorine, II), 5-hydroxy-7-methoxy-2-phenyl-4*H*-1-benzopyran-4-one (tectochrysin, III) และ 2,5-dihydroxy-7-methoxy-2-phenyl-2,3-dihydro-4*H*-1-benzopyran-4-one (IV) โดยวิธีการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์บนผลึกเดี่ยวและขัดเกลาโครงสร้างแบบผลต่างกำลังสองน้อยที่สุด ผลึก(I)อยู่ในระบบโมโนคลีนิก กลุ่มปริภูมิ $C2/c$, a = 15.956(7), b = 14.423(11), c = 18.482(7) Å, β = 104.92(3)°, ปริมาตรเซลล์หน่วย = 4110(4) Å^3, ดัชนีความเชื่อถือ = 0.065 สำหรับข้อมูลการเลี้ยวเบนที่นำมาคำนวณ 1303 ข้อมูล ผลึก(II)อยู่ในระบบโมโนคลีนิก กลุ่มปริภูมิ $C2$, a = 19.122(21), b = 7.010(6), c = 13.528(18) Å, β = 107.31(9)°,ปริมาตรเซลล์หน่วย = 1731.3(3) Å^3 ดัชนีความเชื่อถือ = 0.243 สำหรับข้อมูลการเลี้ยวเบนที่นำมาคำนวณ 903 ข้อมูล ผลึก(III)อยู่ในระบบโมโนคลีนิก กลุ่มปริภูมิ $P2_1/c$, a = 10.128(3), b = 15.289(5), c = 8.215(4) Å, β = 92.39(3)° ปริมาตรเซลล์หน่วย = 1271(1) Å^3 ดัชนีความเชื่อถือ สำหรับข้อมูลการเลี้ยวเบนที่นำมาคำนวณ 874 ข้อมูล ผลึก(IV)อยู่ในระบบโมโนคลีนิก กลุ่มปริภูมิ $P2_1/c$, a = 12.299(4), b = 6.489(3), c = 16.579(6) Å, β = 90.24(3)°,ปริมาตรเซลล์หน่วย = 1323(1) Å^3, ดัชนีความเชื่อถือ = 0.051 สำหรับข้อมูลการเลี้ยวเบนที่นำมาคำนวณ 1016 ข้อมูล

Abstract

The 3-dimensional structures of Thai natural products: bicyclomangostin (I), 2-methyl-*N*-[1'-(1"-oxo-3"-phenylprop-2"enyl)pyrrolidin-2'-yl]butanamide (odorine, II), 5-hydroxy-7-methoxy-2-phenyl-4*H*-1-benzopyran-4-one (tectochrysin, III) and 2,5-dihydroxy-7-methoxy-2-phenyl-2,3-dihydro-4*H*-1-benzopyran-4-one (IV) have been determined by single crystal x-ray diffraction methods and refined by full-matrix least squares. Crystals of (I) are monoclinic, space group *C*2/*c*, a = 15.956(7), b = 14.423(11), c = 18.482(7) Å, β = 104.92(3)°, U = 4110(4) Å^3, R = 0.065 for 1303 "observed" reflections. Crystals of (II) are monoclinic, space group *C*2, a = 19.122(21), b = 7.010(6), c = 13.528(18) Å, β = 107.31(9)°, U = 1731.3(3) Å^3 R = 0.122 for 903 "observed" reflections. Crystals of (III) are monoclinic, space group $P2_1/c$, a = 10.128(3), b = 15.289(5), c = 8.215(4) Å, β = 92.39(3)°, U = 1271(1) Å^3, R = 0.045 for 874 "observed" reflections. Crystals of (IV) are monoclinic, space group $P2_1/c$, a = 12.299(4), b = 6.489(3), c = 16.579(6) Å, β = 90.24(3)°, U = 1323(1) Å^3, R = 0.051 for 1016 "observed" reflections.