

采用动态NMR对8-C-glucosyl-prunetin构象研究

张培成,王映红,刘欣,易翔,陈若芸,于德泉

中国医学科学院中国协和医科大学药物研究所.北京(100050)

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 采用动态NMR方法,对从海南黄檀中分得的8-C-glucosyl-prunetin及其它7位上羟基烷基化了的8-C-苷异黄酮的构象进行了研究。结果表明,在8-C-苷异黄酮中,当7位上羟基烷基化了时,由于1"-C(sp³)-8C(sp²)单键旋转受阻,产生两种构象异构体。同时,借助分子力场(MM)计算方法,确定了8-C-glucosyl-prunetin两种构象异构体中的优势构象,即为1"-H与7-OCH₃位于同侧。由低能量构象转化为高能量构象所需活化能为75.66 kJ/mol。这一结果与动态NMR实验计算的71.48kJ/mol活化自由能数值相符。

关键词 [核磁共振谱法](#) [构象](#) [异黄酮](#) [烷基化](#) [自由能](#)

分类号 [0641](#)

Conformational Study on 8-C-glucosyl-prunetin by Dynamic NMR Spectroscopy

Zhang Peicheng, Wang Yinghong, Liu Xin, Yi Xiang, Chen Ruoyun, Yu Dequan

Institute of Material Medica, Chinese Academy of Medical Sciences & Peking Union Medical College. Beijing(100050)

Abstract

Key words [NMR](#) [CONFORMATION](#) [ISOFLAVONOID](#) [ALKYLATION](#) [FREE ENERGY](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献](#)

服务与反馈

▶ [把本文推荐给朋友](#)

▶ [加入我的书架](#)

▶ [加入引用管理器](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中包含“核磁共振谱法”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [张培成](#)
- [王映红](#)
- [刘欣](#)
- [易翔](#)
- [陈若芸](#)
- [于德泉](#)