



УДК 547.92.022:577.175.19.088.52:548.737

## МОЛЕКУЛЯРНАЯ СТРУКТУРА $\beta$ -АЦЕТОКСИ-16 $\beta$ , 23-ОКСИДО-21,24-ДИНОРХОЛ-5-ЕН-20-ОНА C<sub>24</sub>H<sub>34</sub>O<sub>4</sub>

*Линдеман С. В., Стручков Ю. Т., Решетова И. Г.,  
Камерицкий А. В.*

*Институт элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова  
Академии наук СССР, Москва*

Проведено рентгеноструктурное исследование  $\beta$ -ацетокси-16 $\beta$ ,23-оксидо-21,24-динорхол-5-ен-20-она (I) — простейшего представителя стероидов-ингибиторов Na<sup>+</sup>,K<sup>+</sup>-зависимой АТР-азы, содержащих 16 $\beta$ ,17 $\beta$ -цис-конденсированный тетрагидропиран-20-оновый цикл E. Конформация цикла E в (I) — C23 $\alpha$ ,O16 $\beta$ -полукресло. Данные о пространственном строении стероида с таким дополнительным циклом, полученные впервые, предполагается использовать в качестве стандартных при последующих структурных исследованиях его аналогов.

Ранее было показано [1], что ингибирующая активность по отношению к Na<sup>+</sup>, K<sup>+</sup>-зависимой АТР-азе стероидов, содержащих дополнительный тетрагидропирановый цикл E, определяется полярностью заместителей как в циклах A и B, так и в циклах D и E. Однако для установления механизма биологического действия этих стероидов необходима более полная информация о строении их молекул. Хотя методом рентгеноструктурного анализа изучено большое количество стероидов с различными заме-

Таблица I

Длины связей  $d$  (А) и валентные углы  $\omega$  (град)

Связь	$d$	Угол	$\omega$	Угол	$\omega$
O3—C3	1,45(1)	C3—O3—C24	118,4(6)	C11—C12—C13	111,1(6)
O3—C24	1,31(1)	C16—O16—C23	111,3(8)	C12—C13—C14	105,7(6)
O16—C16	1,43(1)	C2—C1—C10	114,8(7)	C12—C13—C17	115,6(7)
O16—C23	1,46(1)	C1—C2—C3	108,1(7)	C12—C13—C18	112,3(7)
O20—C20	1,18(1)	O3—C3—C2	107,8(6)	C14—C13—C17	99,2(6)
O24—C24	1,22(1)	O3—C3—C4	108,2(6)	C14—C13—C18	111,8(7)
C1—C2	1,55(1)	C2—C3—C4	110,4(7)	C17—C13—C18	111,4(7)
C1—C10	1,55(1)	C3—C4—C5	113,2(7)	C8—C14—C15	112,5(7)
C2—C3	1,53(1)	C4—C5—C6	123,3(8)	C8—C14—C15	117,6(7)
C3—C4	1,50(1)	C4—C5—C10	115,8(7)	C13—C14—C15	103,4(7)
C4—C5	1,48(1)	C6—C5—C10	120,8(7)	C14—C15—C16	104,1(7)
C5—C6	1,33(1)	C5—C6—C7	127,5(8)	O16—C16—C15	107,0(8)
C5—C10	1,56(1)	C6—C7—C8	112,0(7)	O16—C16—C17	112,6(8)
C6—C7	1,48(1)	C7—C8—C9	107,7(6)	C15—C16—C17	105,5(7)
C7—C8	1,55(1)	C7—C8—C14	110,3(7)	C13—C17—C16	105,4(7)
C8—C9	1,57(1)	C9—C8—C14	109,1(6)	C13—C17—C20	113,9(7)
C8—C14	1,53(1)	C8—C9—C10	111,1(6)	C16—C17—C20	115,2(7)
C9—C10	1,56(1)	C8—C9—C11	112,3(6)	O20—C20—C17	120,6(8)
C9—C11	1,54(1)	C10—C9—C11	112,6(6)	O20—C20—C22	121,8(9)
C10—C19	1,54(1)	C1—C10—C5	107,6(6)	C17—C20—C22	117,6(8)
C11—C12	1,54(1)	C1—C10—C9	107,6(6)	C20—C22—C23	115,3(10)
C12—C13	1,52(1)	C1—C10—C19	111,3(7)	O16—C23—C22	107,7(10)
C13—C14	1,57(1)	C5—C10—C9	109,9(6)	O3—C24—O24	123,3(9)
C13—C17	1,53(1)	C5—C10—C19	107,8(6)	O3—C24—C25	113,2(8)
C13—C18	1,55(1)	C9—C10—C19	112,7(7)	O24—C24—C25	123,6(9)
C14—C15	1,54(1)	C9—C11—C12	113,6(7)		
C15—C16	1,55(1)				
C16—C17	1,57(1)				
C17—C20	1,53(1)				
C20—C22	1,49(2)				
C22—C23	1,50(2)				
C24—C25	1,49(1)				



Координаты ( $\times 10^4$ ) и температурные параметры  $B_{\text{изо}}^{\text{KB}}$  ( $\text{\AA}^2$ ) неводородных атомов

АТОМ	x	y	z	B
O3	3543(6)	5993	8966(3)	5,1(2)
O16	2198(8)	7114(10)	1261(4)	7,7(3)
O20	338(7)	11765(9)	1736(4)	6,2(2)
O24	2487(8)	3358(11)	9027(5)	9,8(3)
C1	2128(8)	8687(11)	6858(5)	3,9(3)
C2	2772(9)	8352(12)	7871(5)	4,2(3)
C3	2863(8)	6298(11)	8030(5)	3,6(3)
C4	3678(9)	5435(12)	7390(5)	4,4(3)
C5	3146(8)	5786(12)	6412(5)	3,8(3)
C6	2867(9)	4481(12)	5791(5)	4,1(3)
C7	2346(9)	4690(12)	4796(5)	4,3(3)
C8	2467(8)	6669(11)	4468(5)	3,5(3)
C9	4962(8)	7953(11)	5187(5)	3,4(2)
C10	2887(8)	7822(11)	6142(5)	3,2(3)
C11	1767(9)	9926(11)	4838(5)	3,8(3)
C12	967(8)	10081(11)	3856(5)	3,6(3)
C13	1610(8)	8965(11)	3183(5)	3,8(3)
C14	1587(9)	6951(13)	3525(5)	4,0(3)
C15	1932(10)	5845(12)	2710(6)	5,4(3)
C16	1230(11)	6887(14)	1851(6)	6,3(4)
C17	772(8)	8743(13)	2223(5)	4,4(3)
C18	3053(9)	9611(12)	3130(5)	4,6(3)
C19	4255(8)	8734(13)	6155(6)	4,6(3)
C20	836(10)	10375(13)	1591(6)	5,8(4)
C22	1592(15)	10154(17)	813(7)	9,9(5)
C23	1678(15)	8248(17)	473(6)	10,3(6)
C24	3286(10)	4494(15)	9381(6)	6,2(4)
C25	4081(11)	4312(16)	10321(6)	7,4(4)

считывали геометрически после каждого цикла МНК и не уточняли. Вклад этих атомов учитывали в расчете  $F_{\text{выч}}$  с  $B_{\text{изо}} 5 \text{\AA}^2$ . Окончательное значение фактора расхожимости  $R$  0,043 ( $R_w$  0,042) по 812 отражениям с  $I \geq 2,5\sigma$ .

Координаты и температурные факторы атомов представлены в табл. 2. Все расчеты проведены на ЭВМ Eclipse S/200 по программам INEXTL [6].

## ЛИТЕРАТУРА

1. Камерницкий А. В., Решетова И. Г., Мирсалихова Н. М., Уварова Н. И., Агонкина Л. Н. Биоорган. химия, 1984, т. 10, № 5, с. 666–669.
2. Азрем А. А., Камерницкий А. В., Решетова И. Г., Чернюк К. Ю. Изв. АН СССР. Сер. хим., 1973, № 7, с. 1633–1637.
3. Duax W. L., Norton D. A. Atlas of steroid structure. N. Y.:IFI/Plenum, 1975, v. 1.
4. Schweizer W. B., Dunitz J. D. Helv. chim. acta, 1982, v. 65, Fasc. 5, p. 1547–1563.
5. Линдеман С. В., Шкловер В. Е., Стручков Ю. Т., Камерницкий А. В., Решетова И. Г., Чернобурова Е. И. Биоорган. химия, 1983, т. 9, № 10, с. 1408–1411.
6. Герр Р. Г., Яновский А. И., Стручков Ю. Т. Кристаллография, 1983, т. 28, № 5, с. 1029–1030.

Поступила в редакцию  
11.IX.1984

THE CRYSTAL STRUCTURE OF 3 $\beta$ -ACETOXY-16 $\beta$ ,23-OXIDO-21,24-DINORCHOL-5-EN-20-ONE C<sub>24</sub>H<sub>34</sub>O<sub>4</sub>

LINDEMAN S. V., STRUCHKOV Yu. T., RESHETOVA I. G.,  
KAMERNITZKY A. V.

A. N. Nesmeyanov Institute of Organo-Element Compounds,  
Academy of Sciences of the USSR, Moscow

An X-ray study of 3 $\beta$ -acetoxy-16 $\beta$ ,23-oxido-21,24-dinorchol-5-en-20-one (I) was carried out. The compound(I) is the simplest representative of the Na<sup>+</sup>,K<sup>+</sup>-dependent ATPase-inhibiting steroids with a 16 $\beta$ ,17 $\beta$ -cis-fused tetrahydropyran-20-one cycle *E*. This cycle in (I) has a C(23) $\alpha$ ,O(16) $\beta$ -half-chair conformation. Data on the three-dimensional structure of this steroid were obtained for the first time and can be used as standard geometrical parameters in future structural investigations of its analogues.