

## 乙酰胆碱酯酶抑制剂 Corydaline 的分子对接与开环衍生物的 虚拟筛选

蒋玉仁\* 许 慧 陈芳军 马贯军

(中南大学化学化工学院, 长沙 410083)

## Molecular Docking of the Acetylcholinesterase Inhibitor Corydaline and Virtual Screening of Open Ring Derivatives

JIANG Yu-Ren\* XU Hui CHEN Fang-Jun MA Guan-Jun

(College of Chemistry and Chemical Engineering, Central South University, Changsha 410083, P. R. China)

\*Corresponding author. Email: jiangyr@mail.csu.edu.cn, xuhui0820@163.com; Tel: +86-731-8836834.

化合物 **7** 的盐酸盐为白色固体, 熔点: 238.2-240.1 °C, 纯度: 96.9% (HPLC: 流动相为甲醇:水=65:35, 水相中加 1%三乙胺, 色谱柱为 Bonchrom C18 柱( $\Phi$ 0.46 $\times$ 15cm, 5 $\mu$ ), 紫外检测波长为 290nm).

$^1\text{H}$ NMR: ( $\text{D}_2\text{O}$ , 400 Hz) 3.05-3.17 (m, 4H, N-**CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>**-Ar), 3.38 (s, 3H, OCH<sub>3</sub>), 3.51 (s, 3H, OCH<sub>3</sub>), 3.53 (s, 3H, OCH<sub>3</sub>), 3.75 (s, 3H, OCH<sub>3</sub>), 3.76 (s, 3H, OCH<sub>3</sub>), 4.46-4.44 (d, 2H, CH-**CH<sub>2</sub>**-N), 4.77-4.81 (t, 1H, Ar-**CH**-CH<sub>2</sub>), 4.94 (s, 2H, Ar-**CH<sub>2</sub>**-N), 6.66-6.74 (d, 2H, Ar-H), 7.34-7.41 (m, 3H, Ar-H).

化合物 **7** 的  $^1\text{H}$ NMR 谱图如下:

