

Kristallographische Daten von Pilocarpin-Chloroaurat, Neostigmin-Chloroaurat und Hyoscyaminbromid

Crystallographic Data of Pilocarpine-Chloroaurate, Neostigmine-Chloroaurate and Hyoscyamine-Bromide

JOACHIM HAASE

Zentrum Chemie-Physik-Mathematik, Sektion Röntgen- und Elektronenbeugung, Universität Ulm

EBERHARD KUSSÄTHER

Zentrum für klinische Grundlagenforschung, Abteilung für klinische Morphologie, Universität Ulm

(Z. Naturforsch. 27 b, 212 [1972]; eingegangen am 20. November 1971)

Das parasympathische Nervensystem läßt sich durch zahlreiche Substanzen beeinflussen, die man nach ihrer pharmakologischen Wirkung in verschiedene Gruppen einteilt. Die Parasympathikomimetika, zu denen das Acetylcholin und das Pilocarpin gehören, entfalten ihre Wirkung an den Rezeptoren der Zellen, die durch das parasympathische System beeinflußt werden.

Die Cholinesterasehemmstoffe (z. B. Physostigmin, Neostigmin) verhindern den physiologischen Abbau des Acetylcholins durch die Cholinesterase.

Die Parasympathikolytika (z. B. Atropin, Scopolamin) blockieren die Wirkung von Acetylcholin und Pilocarpin am Rezeptor.

Bezüglich des Zusammenhangs der chemischen Struktur dieser Moleküle mit ihrer pharmakologischen Wirkungsweise weiß man, daß für die Parasympathikomimetika eine $N^{\oplus}Me_3$ -Gruppe wesentlich ist¹. PFEIFFER² sieht eine besondere Anordnung der verschiedenen Gruppen im Acetylcholin, Physostigmin und Atro-

pin als Voraussetzung für die pharmakologische Wirkung an. Eine systematische Untersuchung der Struktur dieser Verbindungen durch Aufklärung ihrer Kristallstruktur kann weitere Aufschlüsse über die Beziehungen zwischen chemischer Struktur und biologischer Wirkung dieser Substanzen geben.

Es wurden zunächst die kristallographischen Daten der Goldchlorid-Komplexverbindungen des Pilocarpins und Neostigmins bestimmt. Pilocarpin läßt sich in wäßriger Lösung mit Goldchlorid ausfällen und aus Essigsäure kristallisieren³.

Neostigmin bildet ebenfalls ein Chloroaurat, das brauchbare Einkristalle für die Röntgenbeugung liefert. Außerdem wurde Hyoscyaminbromid untersucht⁴.

Die Bestimmung der Symmetrie und der Elementarzelle erfolgte mit Weissenberg- und Präzessionsaufnahmen.

Es ergaben sich folgende kristallographischen Daten:

Pilocarpin-Chloroaurat: monoklin, Raumgruppe C2,

$$a = 14,504 \pm 0,004 \text{ \AA},$$

$$b = 7,651 \pm 0,003 \text{ \AA},$$

$$c = 13,994 \pm 0,005 \text{ \AA},$$

$$\beta = 82,42^\circ \pm 0,04^\circ.$$

Neostigmin-Chloroaurat: orthorhombisch, Raumgruppe $2_12_12_2$,

$$a = 28,96 \pm 0,02 \text{ \AA},$$

$$b = 10,86 \pm 0,02 \text{ \AA},$$

$$c = 12,66 \pm 0,01 \text{ \AA}.$$

Hyoscyaminbromid: monoklin, Raumgruppe $P2_1$,

$$a = 12,021 \pm 0,004 \text{ \AA},$$

$$b = 7,404 \pm 0,002 \text{ \AA},$$

$$c = 10,790 \pm 0,004 \text{ \AA},$$

$$\beta = 65,82^\circ \pm 0,03^\circ.$$

¹ H. P. ING, Science [Washington] **109**, 264 [1949].

² C. C. PFEIFFER, Science [Washington] **107**, 94 [1948].

³ A. B. SPÄTH, Ber. dtsh. chem. Ges. **58**, 517 [1902].

⁴ E. KUSSÄTHER u. J. HAASE, in Vorbereitung.

Sonderdruckanforderungen an Dr. J. HAASE, Zentrum Chemie-Physik-Mathematik, Sektion Röntgen- und Elektronenbeugung, D-7500 Karlsruhe, Hertzstr. 16, Bau 35.