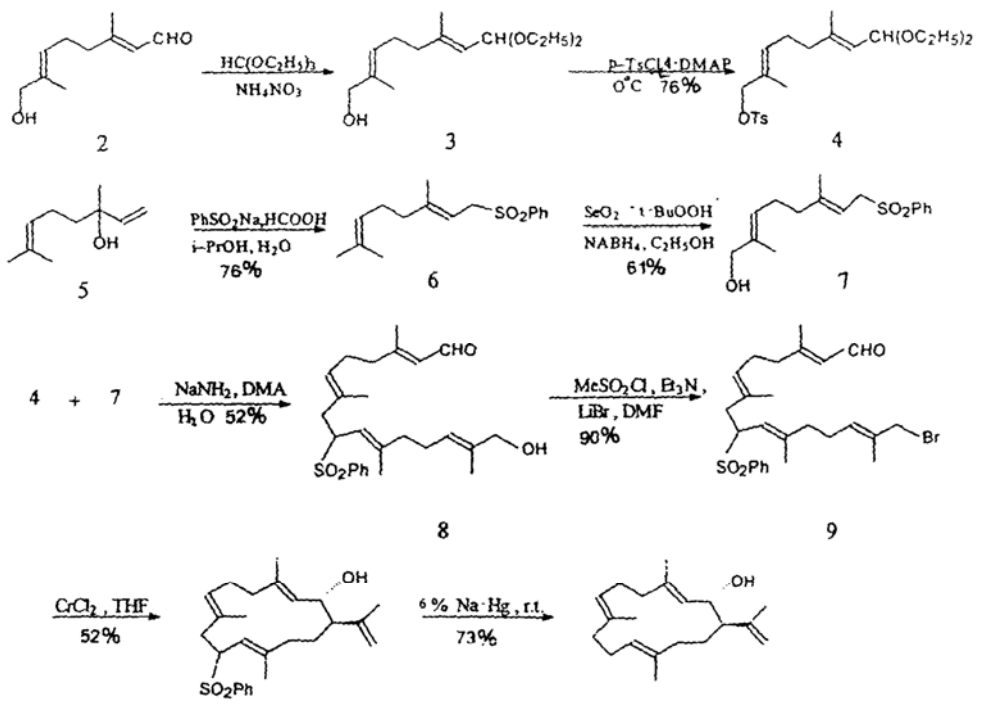
(±)-表-马氏醇全合成研究(Ⅱ)*

西松烯内酯类(*cembrenolides*)化合物广泛存在于海洋生物软珊瑚中. 它们大多具有抗肿瘤细胞的活性[1]. 表-马氏醇(epi-mayol) (**1**)可作为合成反式骈联的西松烯内酯的重要中间体,而且结构与 **1** 极相似的肉芝软珊瑚醇(*sarcophytol*)[2]已知有明显抗白血病作用. 因此研究 **1** 的全合成有重要意义. 文献[3]曾报道(±)-表-马氏醇的全合成,本文报道合成(±)-表-马氏醇的另一有效途径. 这两种方法的主要区别是环化前的中间体及环化方式不同.

本文的方法是通过中间体 **9** 在 Cr(Ⅱ)试剂存在下进行环化. 此法的优点是环化反应可在室温下进行,而且环化产率较高,并能立体选择地生成以苏式构型为主的产物 **10**. 用硅胶快速层析可分离得纯化合物 **10**,产率 52%. 最后,应用 Na-Hg 一齐脱去苯基亚砜保护基即得目标化合物 **1**. 波谱数据与文献



1 为 $HC(OC_2H_5)_3$; 2 为 NH_4NO_3; 3 为 p-$TsCl_4$·DMAP; 4 为 0℃, 76%; 5 为 $PhSO_2NaHCOOH$; 6 为 i-PrOH, H_2O 76%; 7 为 SeO_2-t-BuOOH; 8 为 $NABH_4$, C_2H_5OH 61%; 9 为 $NaNH_2$, DMA; 10 为 H_2O 53%; 11 为 $MeSO_2Cl$, Bt_3N; 12 为 LiBr, DMF 90%; 13 为 $CrCl_2$, THF; 14 为 52%; 15 为 6%Na-Hg, r.t.; 16 为 73% (11～16 未划出)

* 国家自然科学基金及高等学校博士学科点专项基金资助项目

[3]合成的 **1** 一致. MS (EI, 70 eV): m/z 288(M^+), 270(32), 247(25), 229(20); IR υ_{max}: 3 452, 3 068, 1 642, 1 002, 889 cm^{-1}; ^1HNMR δ_H($CDCl_3$): 1.60(3H, s, CH_3), 1.70 (6H, s, $2XCH_3$), 1.76 (3H, s, CH_3), 1.56 (1H, brs, 可交换), 1.80～2.31 (13H, m), 4.16 (1H, t, J=9.0 Hz), 4.60～5.30 (5H, m), 分子式 $C_{20}H_{32}O$, 元素分析: 理论值 C, 83.33, H, 11.11; 实测值, C, 83.21, H, 11.19.

参 考 文 献

1 Faulkner D J. Marine natural products. Nat Prod Rep, 1987, 49(12): 555～560

2 Kobayashi M, Nakashi T, Mitsuhashi H. Marine terpenes and terpenoids. Chem Pharm Bull, 1979, 27: 2 382～2 387

3 苏镜娱, 王贵阳生, 曾陇梅. 二萜(±)-表-马氏醇的合成(Ⅰ). 化学学报, 1995, 53: 294～298

曾陇梅 王贵阳生 苏镜娱
(中山大学化学系, 广州 510275)

用人工神经网络研究合金相晶型和原子结构的关系

我们曾用化学键参数和模式识别方法研究合金相的晶型规律, 取得较好结果[1,2]. 但所用的参数(金属半径和元素的电负性)系半经验参数, 其物理意义和数值准确性两方面均有不够严格之处. 在本工作中, 我们试用描述原子核外电子各壳层结构的几个数值(组分原子的价电子数 Z_1, Z_2; 价电子主量子数 n_1, n_2; 次内层的 d 电子数 nd_1, nd_2 等)作为人工神经网络输入值, 用已知合金相晶型训练求得多种合金相形成条件的人工神经网络判据. 我们用 AB 价型的合金相样本(包括 CsCl 型、NaTl 型、CoSn 型、AuCu 型、CrB 型), AB_2 型合金相样本(包括 Laves 相、AlB_2 型、$CuAl_2$ 型)以及 AB_3 型合金相样本(包括 A15 型、$AuCu_3$ 型)训练 3 层人工神经网络. 求得晶型判据后试行对新发现的 AB 型、AB_2 型和 AB_3 型合金相的晶型作计算机预报. 其中 $DyMg_2$, $LuAl_2$, $NdMg_2$ 预报为 Laves 相, SmHg, HoTl, NdHg, DyTl, AuPr, AuNd, AuTb, AuHo, CaTl, AuTm, AuLu, AgYb, AuYb 预报为 CsCl 结构, $GaLa_3$, $ZrRh_3$, $TaIr_3$, $SmPd_3$, $GaNi_3$, $GaSm_3$ 预报为 $AuCu_3$ 结构. 预报结果均与实测结果符合, 证明用人工神经网络关联合金相晶型和组分原子结构, 求得晶型判据是有效的.

参 考 文 献

1 Chen Nianyi. Chemical pattern recognition research in China. Acta Analatica Chemica, 1988, 210(1): 175～180

2 Chen Nianyi, Jiang Naixiong, Xie Leiming *et al*. Computerized pattern recognition applied to chemical bond research. Scientia Sinica, 1981, 24(11): 1 528～1 535

姚树文 刘 刚 陈念贻
(中国科学院上海冶金研究所, 上海 200050)