Korean J. Crystallography
Vol.9, No.2, pp.114~119, 1998

Imperatorin[$C_{16}H_{14}O_4$]의 결정 및 분자구조

김문집 · 신준철 · 이재혁 · 김대영* · 장성근* · 이윤배** · 이종수***
순천향대학교 물리학과, *화학과, **화학공학과, ***(주)대웅제약 중앙연구소

The Crystal and Molecular Structure of Imperatorin[$C_{16}H_{14}O_4$]

Moon-Jib Kim, Joon-Cheol Shin, Jae-Hyuk Lee, Dae-Young Kim*, Sung-Keun Chang*, Bae Yoon Lee and Jongsoo Lee*****

*Depatment of Physics, *Depatment of Chemistry and **Depatment of Chemical Engineering, Soonchunhyang University, P.O.B. 97, Asan, Seoul 336-600, Korea*
****R&D Center, Dae Woong Pharmaceutical Co., Ltd., Sungnam, Seoul 462-120, Korea*

요 약

Imperatorin,9-[(3-methyl-2-butenyl)oxy]-7H-furo[3,2-g][1]benzopyran-7-one의 분자 및 결정구조를 X-선 회절법으로 연구하였다. 이 결정의 분자식은 $C_{16}H_{14}O_4$, 결정계는 삼사정계이고 공간군은 $P\bar{1}$이다. 단위포상수는 a=11.818(1) Å, b=11.906(1) Å, c=11.059(1) Å이며, α=96.32(1)°, β=90.74(1)°, γ=64.88(1)°, V=1399.3(2) Å^3, T=293 K, Z=4이다. 구조해석에 사용한 X-선은 CuKα선(λ=1.5418 Å)을 사용하였다. 구조는 직접법으로 풀었으며 최소자승법으로 정밀화하였다. 최종 신뢰도 R 값은 $F_0>4\sigma(F_0)$인 3951개의 독립회절데이타로 356개 파라메타에 대해 R=7.02%이다.

Abstract

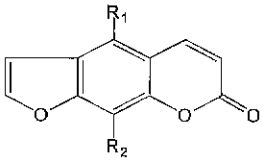
The crystal structure of imperatorin, 9-[(3-methyl-2-butenyl)oxy]-7H-furo[3,2-g][1]benzopyran-7-one, has been determined from single crystal x-ray diffraction study; $C_{16}H_{14}O_4$, Triclinic, $P\bar{1}$, a=11.818(1) Å, b=11.906(1) Å, c=11.059(1) Å, α=96.32(1)°, β=90.74(1)°, γ=64.88(1)°, V=1399.3(2) Å^3, T=293 K, Z=4, CuKα (λ=1.5418 Å). The structure was solved by direct method and refined by full-matrix least squares to a final R=7.02% for 3951 unique observed $F_0>4\sigma(F_0)$ reflections and 356 parameters.

1. 서 론

Imperatorin[$C_{16}H_{14}O_4$; 9-[(3-methyl-2-butenyl)oxy]-7H-furo[3,2-g][1]benzopyran-7-one]은 isoimperatorin의 이성질체로서 한방에서 해열약 및 거습지통약으로 사용되어온 강활의 주성분으로 알려져 있다.[1-7] 최근에는 강활의 종양괴사인자(Tumor necrosis factor-α, TNF-α) 생성억제 작용이 검색되었으며,[8] 그 주성분들의 TNF-α 생성억제 작용에 대하여도 상세히 연구보고 되었다.[9]

그 가운데 isoimperatorin이 imperatorin에 비하여 월등히 높은 TNF-α 생성억제 작용을 갖는 것은 매우 흥미로운데 이것은 두 화합물의 side-chain의 위치가 다르기 때문인 결과로 예측된다. 이와 같이 이들 성분의 구조활성 관계의 중요성이 인식되고 있는데 향후 이들의 분자생물학적 역할에 대한 기초자료로서 3차원적 구조에 대한 연구의 필요성이 대두되었다. 따라서, 저자들은 전보[10]에 이어서 imperatorin의 3차원적 결정 및 분자구조를 X선 회절법으로 밝혀 분자내 원자들의 결합길이, 결합각 및 단위세포내의 분자배열을 규명하고자 한다.

이 논문은 1998년도 순천향대학교 지원에 의한 결과임.



Imperatorin R_1=H, R_2=O-CH_2-CH=C(CH_3)(CH_3)

Isoimperatorin R_1=O-CH_2-CH=C(CH_3)(CH_3), R_2=H

2. 실 험

본 실험에서 사용한 imperatorin($C_{16}H_{14}O_4$)은 ethanol로 용해하여 단결정으로 육성하였으며, 결정의 크기는 0.60×0.50×0.30 mm이다. 실험실온도 T=293 K에서 $24.5^\circ \le \theta \le 25.0^\circ$ 사이에 25개의 회절반점을 측정하여 a=11.818(1) Å, b=11.906(1) Å, c=11.059(1)Å, α=96.32(1), β=90.74(1)°, γ=64.88 (1)°이고 V=1399.3(2) Å^{3}임을 알았으며, 결정계는 Triclinic, 공간군은 $P\bar{1}$, 단위포당 분자수는 Z=4으로 비대칭 단위에 2개의 분자를 갖는다. 회절데이타 측정은 $4.02^\circ \le \theta \le 62.57^\circ$, $-13 \le h \le 13$, $-13 \le k \le 13$, $-12 \le l \le 0$, 사이에서 4756개의 회절 데이타를 수집하였고, 이중 독립 회절반점수는 4492개로 R_{int}=0.026이다.

사용한 X-ray diffractometer는 Rigaku AFC5R, 파장은 graphite로 단색화한 CuKα이고 ω/2θ로 scan하였다. 측정한 회절 데이타는 Lorentz-polarization factor를 보정하였으며 psi-scan방법으로 흡수보정을 하였다. 결정구조는 SHELXS-86[11]을 사용한 직접법으로 밝혔으며, SHELXL-93[12]을 사용하여 full-matrix least-square 방법으로 정밀화하였다. 비수소원자 20개는 비등방성 온도인자로 수소원자 14개는 등방성 온도인자를 사용하였다. 전체 수소원자 14개의 위치는 기하학적으로 계산하여 정하였다. 정밀화계산은 $\Sigma(|F|^2-|F|^2)^2$을 최소화하였으며, $w=1/[\sigma^2(F_0^2)+(0.1171\times P)^2+1.15\times P]$, $P=[Max(F_0^2, 0)+2\times F_c^2]/3$이고 변수의 수는 356개이다. 최종신뢰도 인자는 $[F_0>4\sigma(F_0)]$인 3951개의 독립회절데이타에 대해 R=0.0702, wR=0.1957이다. 그리고, 분자구조와 관련된 기하학적 계산은 GEOM[13] program을 사용하였고, 그림은 ORTEP III[14]를 이용하였다. 모든 계산은 SPARC STATION IPC와 PC586을 사용하였다.

실험에 대한 사항은 Table 1에 정리하였고, 비수소원자들의 최종원자좌표는 Table 2에, 수소원자들의 최종원자좌표는 Table 3에 비수소원자들간의 결합길이와 결합각은 Table 4에 나타내었으며, 분자내의 torsion angle은 Table 5에 나타내었다.

Table 1. Crystal data and structure refinement for imperatorin

Crystal data	
[$C_{16}H_{14}O_4$]	Z=4
M_r=270.28	D_x=1.283 Mg m^{-3}
Triclinic	CuKα radiation
$P\bar{1}$	λ=1.5418 Å
a=11.818(1) Å	Cell parameters from 25 reflections
b=11.906(1) Å	
c=11.059(1) Å	θ=24.5°~25.0°
α=96.32(1)°	μ=0.761 mm^{-1}
β=90.74(1)°	T=293 K
β=64.88(1)°	Prismatic
V=1399.3(2) Å^3	0.60×0.50×0.30 mm
Data collection	
Rigaku AFC5R diffractometer	θ_{max}=62.57°
ω/2θ scans	h=-13→13
Absorption correction : none	k=-13→13
	l=-12→0
4756 measured reflections	3 standard reflections
4492 independent reflections	monitored every 100 reflections
R_{int}=0.026	intensity decay : 0.81
Refinement	
Refinement on F^2	$(\Delta/\sigma)_{max}$<0.001
R=0.0702	$\Delta\rho_{max}$=0.297 eÅ^{-3}
wR=0.1957	$\Delta\rho_{min}$=-0.660 eÅ^{-3}
3951 reflections[$F_0>4\sigma(F_0)$]	Extinction correction : none
356 parameters	Atomic scattering factors from international Tables for Crystallography (1992, Vol. C)
Only coordinates of H atoms refined	
$w=1/[\sigma^2(F_0^2)+(0.1171\times P)^2+1.15\times P]$ where $P=[Max(F_0^2, 0)+2\times F_c^2]/3$	

3. 결론 및 고찰

Imperatorin($C_{16}H_{14}O_4$)의 결정계는 삼사정계이고, 공간군은 $P\bar{1}$, 단위포내 분자수는 Z=4로서 결정학적으로 서로 다른 두 개의 거울상체 분자가 비대칭 단위를 형성하는 형태로 밝혀졌다. 이에 대한 분자구조와 번호부여는 Fig. 1에 나타내었고 Fig. 2에

Table 2. Fractional atomic coordinates and equivalent isotropic displacement parameters ($Å^2$) for non-hydrogen atoms of imperatorin. The e.s.d.'s are in parentheses. $U_{eq} = (1/3)\sum_i\sum_j U_{ij} a_i^* a_j^* \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j$.

Atom	Molecule 1				Molecule 2			
	x	y	z	Ueq	x	y	z	Ueq
C(1)	0.9089(3)	0.1540(3)	-0.2331(3)	0.052(1)	0.4020(4)	0.1600(4)	0.9123(3)	0.066(1)
C(2)	0.8276(3)	0.1196(3)	-0.1880(3)	0.049(1)	0.3019(4)	0.1616(3)	0.8580(3)	0.063(1)
C(3)	0.8392(2)	0.1291(2)	-0.0574(2)	0.039(1)	0.3228(3)	0.1601(3)	0.7295(3)	0.047(1)
C(4)	0.7845(2)	0.1051(3)	0.0402(3)	0.042(1)	0.2571(3)	0.1587(3)	0.6254(3)	0.049(1)
C(5)	0.8253(2)	0.1229(2)	0.1567(2)	0.037(1)	0.3105(2)	0.1574(2)	0.5138(3)	0.041(1)
C(6)	0.7773(3)	0.0978(3)	0.2640(3)	0.046(1)	0.2517(3)	0.1525(3)	0.3998(3)	0.052(1)
C(7)	0.8219(3)	0.1120(3)	0.3732(3)	0.050(1)	0.3065(3)	0.1509(3)	0.2947(3)	0.055(1)
C(8)	0.9168(3)	0.1564(3)	0.3892(2)	0.046(1)	0.4249(3)	0.1559(3)	0.2901(3)	0.049(1)
C(9)	0.9186(2)	0.1655(2)	0.1725(2)	0.032(1)	0.4276(2)	0.1597(2)	0.5085(2)	0.035(1)
C(10)	0.9739(2)	0.1928(2)	0.0770(2)	0.034(1)	0.4956(2)	0.1628(2)	0.6113(2)	0.036(1)
C(11)	0.9318(2)	0.1718(2)	-0.0367(2)	0.037(1)	0.4407(3)	0.1597(3)	0.7199(2)	0.041(1)
C(12)	1.0224(4)	0.3648(3)	0.1008(5)	0.091(2)	0.5962(3)	0.2949(3)	0.6052(3)	0.053(1)
C(13)	1.1240(4)	0.4020(3)	0.1258(4)	0.068(1)	0.5342(3)	0.3748(3)	0.7178(4)	0.061(1)
C(14)	1.1391(4)	0.4641(4)	0.2228(5)	0.086(1)	0.4213(4)	0.4652(4)	0.7307(5)	0.081(1)
C(15)	1.2488(6)	0.4935(6)	0.2335(6)	0.133(2)	0.3701(7)	0.5321(6)	0.8581(6)	0.130(2)
C(16)	1.0567(10)	0.5063(9)	0.3324(8)	0.208(5)	0.3313(5)	0.5061(6)	0.6315(6)	0.135(2)
O(17)	0.9763(2)	0.1877(2)	-0.1442(2)	0.046(1)	0.4920(2)	0.1588(2)	0.8313(2)	0.053(1)
O(18)	1.0664(2)	0.2320(2)	0.0940(2)	0.040(1)	0.6089(2)	0.1675(2)	0.6058(2)	0.040(1)
O(19)	0.9603(2)	0.1845(2)	0.2872(2)	0.040(1)	0.4815(2)	0.1617(2)	0.3996(2)	0.043(1)
O(20)	0.9620(3)	0.1739(3)	0.4837(2)	0.072(1)	0.4812(2)	0.1577(3)	0.2006(2)	0.072(1)

Table 3. Fractional atomic coordinates for hydrogen atoms of imperatorin

Atom	Molecule 1			Molecule 2		
	x	y	z	x	y	z
H(1)	0.9201	0.1555	-0.3159	0.4119	0.1596	0.9958
H(2)	0.7732	0.0941	-0.2317	0.2310	0.1634	0.8954
H(6)	0.7218	0.0778	0.0286	0.1786	0.1587	0.6301
H(7)	0.7138	0.0710	0.2574	0.1739	0.1504	0.3995
H(10)	0.7906	0.0926	0.4407	0.2666	0.1465	0.2225
H(12A)	0.9577	0.4047	0.1647	0.5481	0.3304	0.5362
H(12B)	0.9859	0.3926	0.0243	0.6785	0.2930	0.5956
H(13)	1.1854	0.3779	0.0643	0.5805	0.3594	0.7877
H(15A)	1.2437	0.5414	0.3106	0.2862	0.5945	0.8528
H(15B)	1.2499	0.5409	0.1690	0.4219	0.5711	0.8912
H(15C)	1.3240	0.4173	0.2279	0.3702	0.4726	0.9100
H(16A)	1.0858	0.5527	0.3912	0.2544	0.5729	0.6644
H(16B)	1.0573	0.4352	0.3662	0.3153	0.4371	0.5961
H(16C)	0.9731	0.5588	0.3115	0.3661	0.5345	0.5702

는 단위포내의 packing을 표시하였다.

본 화합물은 furan ring(A)와 pyrone ring(C) 그리고 ring(B)에 사슬부분으로 되어있다. 두 개의 분자들은 molecule 1과 molecule 2로 나누어 설명하고자 한다.

먼저 furan ring(A)에서 C-C 평균결합길이는 1.393 (4) Å, 1.392(4) Å이고 C-C-C 평균결합각도는 119.9(2)°, 120.0(3)°이며 pyrone ring(C) 내의 C-C 평균결합길이는 1.383 (4) Å, 1.382(4) Å이고 C-C-C 평균결합각도도 108.0(2)°, 107.9(2)°이며 ring(B)의 경우에도 각각의 평균결합길이는 1.390 (2) Å, 1.390(2) Å이고 평균결합각도는 120.0(3)°, 119.9 (2)°으로 참고문헌과[10,15,18] 잘 일치한다.

Furan ring(A)에서 이중결합인 C(8)-O(20)의 결

Table 4. Bond lengths (Å) and angles (°) for non-hydrogen atoms of imperatorin. The e.s.d.'s are in parenthese

	Molecule 1	Molecule 2		Molecule 1	Molecule 2
C(1)-C(2)	1.315(5)	1.314(5)	C(2)-C(1)-O(17)	112.9(3)	112.8(3)
C(1)-O(17)	1.388(4)	1.393(4)	C(1)-C(2)-C(3)	106.8(3)	106.9(3)
C(2)-C(3)	1.446(4)	1.442(4)	C(4)-C(3)-C(11)	119.4(2)	119.4(3)
C(3)-C(4)	1.381(4)	1.383(4)	C(4)-C(3)-C(2)	135.8(3)	135.9(3)
C(3)-C(11)	1.395(4)	1.396(4)	C(11)-C(3)-C(2)	104.8(2)	104.7(3)
C(4)-C(5)	1.396(4)	1.389(4)	C(3)-C(4)-C(5)	118.5(2)	118.8(2)
C(5)-C(9)	1.399(4)	1.398(4)	C(4)-C(5)-C(9)	119.8(2)	119.9(3)
C(5)-C(6)	1.435(4)	1.439(4)	C(4)-C(5)-C(6)	123.2(2)	123.3(3)
C(6)-C(7)	1.334(4)	1.332(5)	C(9)-C(5)-C(6)	117.0(2)	116.8(3)
C(7)-C(8)	1.429(4)	1.427(5)	C(7)-C(6)-C(5)	121.2(3)	121.3(3)
C(8)-O(20)	1.206(4)	1.207(4)	C(6)-C(7)-C(8)	121.7(3)	121.7(3)
C(8)-O(19)	1.375(3)	1.385(3)	O(20)-C(8)-O(19)	115.9(3)	115.7(3)
C(9)-O(19)	1.385(3)	1.376(3)	O(20)-C(8)-C(7)	126.8(3)	127.0(3)
C(9)-C(10)	1.386(4)	1.390(4)	O(19)-C(8)-C(7)	117.3(2)	117.3(3)
C(10)-O(18)	1.362(3)	1.366(3)	O(19)-C(9)-C(10)	115.9(2)	115.8(2)
C(10)-C(11)	1.383(4)	1.384(4)	O(19)-C(9)-C(5)	120.9(2)	121.3(2)
C(11)-O(17)	1.369(3)	1.366(3)	C(10)-C(9)-C(5)	123.2(2)	122.9(2)
C(12)-O(18)	1.433(4)	1.460(3)	O(18)-C(10)-C(11)	122.9(2)	122.3(2)
C(12)-C(13)	1.460(5)	1.471(5)	O(18)-C(10)-C(9)	122.2(2)	122.6(2)
C(13)-C(14)	1.289(6)	1.308(5)	C(11)-C(10)-C(9)	114.8(2)	115.1(2)
C(14)-C(16)	1.467(9)	1.490(7)	O(17)-C(11)-C(10)	124.9(2)	125.1(2)
C(14)-C(15)	1.480(7)	1.533(8)	O(17)-C(11)-C(3)	110.8(2)	111.0(2)
			C(10)-C(11)-C(3)	124.3(2)	123.8(3)
			O(18)-C(12)-C(13)	111.1(3)	112.1(3)
			C(14)-C(13)-C(12)	128.0(5)	127.3(4)
			C(13)-C(14)-C(16)	124.9(6)	125.5(5)
			C(13)-C(14)-C(15)	121.0(5)	119.4(5)
			C(16)-C(14)-C(15)	114.0(6)	115.0(4)
			C(11)-O(17)-C(1)	104.7(2)	104.5(2)
			C(10)-O(18)-C(12)	113.4(2)	112.2(2)
			C(8)-O(19)-C(9)	121.8(2)	121.6(2)

Table 5. Torsion angles(°) for non-hydrgen atoms of imperatorin. The e.s.d.'s are in parenthese

				Molecule 1	Molecule 2					Molecule 1	Molecule 2
O(17)	-C(1)	-C(2)	-C(3)	-.4(2)	.6(3)	C(2)	-C(1)	-O(17)	-C(11)	.2(3)	.0(3)
C(1)	-C(2)	-C(3)	-C(4)	-178.4(5)	178.8(6)	C(1)	-C(2)	-C(3)	-C(11)	.4(2)	-1.0(3)
C(2)	-C(3)	-C(4)	-C(5)	177.8(5)	-180.0(6)	C(11)	-C(3)	-C(4)	-C(5)	-.9(2)	-.2(3)
C(2)	-C(3)	-C(11)	-C(10)	-179.2(3)	-177.6(4)	C(2)	-C(3)	-C(11)	-O(17)	-.3(2)	1.0(2)
C(4)	-C(3)	-C(11)	-C(10)	-.2(2)	2.6(3)	C(4)	-C(3)	-C(11)	-O(17)	178.7(3)	-178.8(4)
C(3)	-C(4)	-C(5)	-C(6)	-178.4(4)	178.3(5)	C(3)	-C(4)	-C(5)	-C(9)	.7(2)	-1.1(3)
C(4)	-C(5)	-C(6)	-C(7)	177.6(5)	-179.7(5)	C(9)	-C(5)	-C(6)	-C(7)	-1.4(3)	-.3(3)
C(4)	-C(5)	-C(9)	-C(10	.5(2)	.3(3)	C(4)	-C(5)	-C(9)	-O(19)	179.7(3)	-178.3(4)
C(6)	-C(5)	-C(9)	-C(10	179.7(3)	-179.1(4)	C(6)	-C(5)	-C(9)	-O(19)	-1.2(2)	2.3(2)
C(5)	-C(6)	-C(7)	-C(8)	2.0(3)	-1.0(3)	C(6)	-C(7)	-C(8)	-O(19)	.2(3)	.4(3)
C(6)	-C(7)	-C(8)	-O(20)	179.0(6)	-178.3(6)	C(7)	-C(8)	-O(19)	-C(9)	-2.9(3)	1.5(3)
O(20)	-C(8)	-O(19)	-C(9)	178.2(4)	-179.6(4)	C(5)	-C(9)	-C(10)	-C(11)	-1.5(2)	1.8(3)
C(5)	-C(9)	-C(10)	-O(18)	-178.7(3)	-178.7(4)	O(19)	-C(9)	-C(10)	-C(11)	179.3(3)	-179.5(3)
O(19)	-C(9)	-C(10)	-O(18)	2.1(2)	.0(2)	C(5)	-C(9)	-O(19)	-C(8)	3.4(2)	-2.9(3)
C(10)	-C(9)	-O(19)	-C(8)	-177.4(3)	178.4(3)	C(9)	-C(10)	-C(11)	-C(3)	1.3(2)	-3.3(3)
C(9)	-C(10)	-C(11)	-O(17)	-177.4(3)	178.3(4)	O(18)	-C(10)	-C(11)	-C(3)	178.6(4)	177.2(4)
O(18)	-C(10)	-C(11)	-O(17)	-.2(2)	-1.2(2)	C(9)	-C(10)	-O(18)	-C(12)	-97.9(3)	84.3(3)
C(11)	-C(10)	-O(18)	-C(12)	85.1(3)	-96.3(3)	C(3)	-C(11)	-O(17)	-C(1)	.1(2)	-.6(3)
C(10)	-C(11)	-O(17)	-C(1)	179.0(3)	178.0(4)	O(18)	-C(12)	-C(13)	-C(14)	-112.4(6)	-108.3(4)
C(13)	-C(12)	-O(18)	-C(10)	176.8(4)	62.8(3)	C(12)	-C(13)	-C(14)	-C(15)	179.6(7)	175.7(6)
C(12)	-C(13)	-C(14)	-C(16)	2.7(6)	-.3(4)						

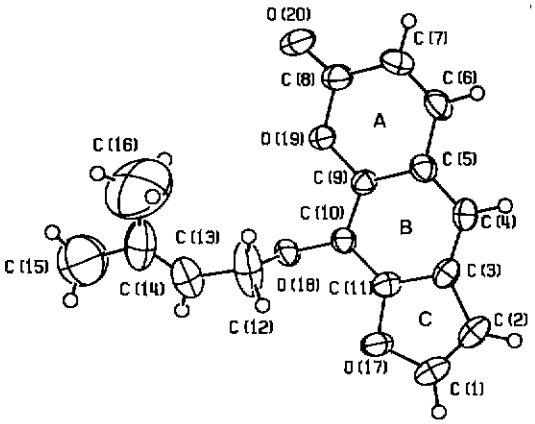


Fig. 1. An ORTEP(III) drawing of imperatorin with the atomic numbering scheme. The displacement ellipsoids are drawn on the 30% probability level. H atom are drawn as small circles of arbitrary radii.

합길이는 각각 1.206(4) Å와 1.207(4) Å이고, furan ring(A)와 pyrone ring(C)내의 C-O 결합길이는 각각 1.369(4) Å, 1.388(4) Å과 1.366(3) Å, 1.393(4) Å이고 C-O-C 결합각도는 104.7(2)°, 104.5(2)°로 타문헌의 값[10,16,18]과 잘 일치하고 있다.

사슬부분에서 C(10)-O(18)의 결합길이는 1.362(3) Å와 1.366(3) Å으로 C(12)-O(18)의 1.446(3) Å보다 상대적으로 작은 값을 나타내므로 C(10)-O(18)의 경우 약간의 이중결합의 특성을 보이고 있다. C(15)-C(14)-C(16)의 사이의 각도는 114.0(6)°, 115.0(4)°이고 평균결합길이는 1.486(7) Å으로 보고된 Mark 등[17]의 실험 값과 잘 일치된다.

C(11)-C(10)-C(18)-C(12)의 torsion angle은 85.1(3)°, -96.3(3)°이고, C(9)-C(10)-C(18)-C(12)의 torsion angle은 -97.9(3)°, 84.3(3)°로 되어있다.

Ring(A), (B), (C)내의 비수소원자 14개에 대한 평면성을 계산한 결과 이들 원자 14개는 각각 0.081 Å, 0.071 Å 범위에서 평면을 이루고 있는데 isoimperatorin의 경우 ring(A), (B), (C)내의 비수소원자 14개는 0.075 Å 범위에서 평면을 이루고 있었다.[10] molecule 1의 C(14)와 C(7)이 최적평면으로부터 각각 0.033 Å, 0.047 Å 떨어져 있고, molecule 2의 C(7)와 C(19)은 각각 0.037 Å, 0.033 Å 떨어져있다. 또한, ring(A), (B), (C)의 근방에 있는 O(18)과 O(20)은 3중고리가 만든 최적 평면으로부터 molecule 1은 각각 0.002 Å, 0.070 Å로 molecule 2는 각각 0.050 Å, 0.010 Å 떨어져 있어 거의 완전한평면을 이루고 있다. 사슬부분에 있는 6개의 비수소 원자들은 ring(A), (B), (C)의 최적평면으로부터 약 1 Å 이내에 존재하여 모든 원자들이 한평면에 존재하는 평평한 형태를 취하고 있다. isoimperatorin의 경우에도 비수소원자 20개는 ring(A), (B), (C)의 최적평면으로부터 약 1 Å 이내에 존재함을 알 수 있었다.[10] 사슬 말단에 결합되어 있는 C(15)와 C(16)의 온도 인자가 큰 값을 가지나 이는 말단에 있는 원자들이 다른 원자들에 비하여 활발한 열 진동을 하고 있음을 반영하는 것이다.

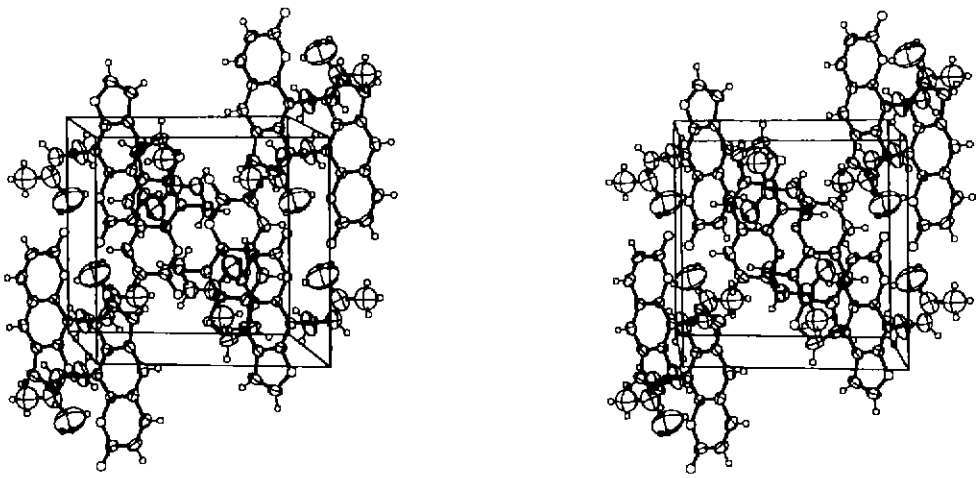


Fig. 2. A stereoscopic view of the packing for imperatorin. The c-axis is vertical and a-axis horizontal.

참고문헌

1) 전재인. 도설한방의학대사전(중국약학대전), 구담사, p. 62, 1982.
2) 지형준, 김학성. *J. of Pharm. Soc. of Korea*, **14**, 21 (1970).
3) K. Hata, M. Kozawa, K. Baba. H. Chi and M. Konoshima, *Chem. Pharm. Bull.*, **19**, 1963-1967 (1971).
4) 신현식, 김학성. 석사학위논문, 충북대학교 약학대학, 1973.
5) W. S. Woo, C. K. Lee and K. H. Shin, *Planta Medica*, **45**, 234-236 (1982).
6) 권용수, 우은란, 김창민. 생약학회지, **22**, 156-161 (1991).
7) 지종명. 석사학위논문, 충남대학교 약학대학, 1992.
8) S. H. Chae, P. S. Kim, J. Y. Cho, J. Park, J. H. Lee, E. S. Yoo, K. U. Baik, J. Lee and M. H. Park, The Spring Convention of Pharmaceutical Society of Korea, Abstr., p. 186, 1997.
9) J. Y. Cho, J. Lee, J. Park and M. H. Park, *Yakhak Hoeji*, **42**(2), 125-131 (1998).
10) M. J. Kim, J. C. Shin, J. H. Kim, J. Lee and T. Ishida, *Korean J. Crystallography*, **8**(2), 138-143 (1997).
11) G. M. Sheldrick, "SHELX-86", program for crystal structure determination, Univ. of Cambridge, England (1986).
12) G. M. Sheldrick, "SHELX-93", program for crystal structure determination, Univ. of Cambridge, England, 1993.
13) W. Shin, GEOM, Seoul National University, KOREA, 1978.
14) C. K., Johson, M. N. Burnett, and L. J. Farrugia, "ORTEP III", Dept. of Chemistry, Univ. of Glasgow. U.K (1997).
15) G. Ruggiero and E. J. Valente, *Acta Cryst.*, C **45**, 1182-1184 (1989).
16) O. Cox, J. Rios Steiner, C. L. Barnes and H. R. Retammozo, *Acta Cryst.*, C**45**, 1263-1265 (1989).
17) M. S. Erickson, M. L. McLaughlin and F. R. Fronczek, *Acta Cryst.*, C**45**, 1260-1261 (1989).
18) N. Padha, E. Subramanian, A. K. Dass, S. K. Mazumdar, K. N. Goswami, *Cryst. Res. and Technol.*, **30**, 205 (1995).