



## Crystal structure, Anti-cervical Cancer Activity and Docking Study of Novel Pyran Derivatives

Zhen-Zhen LV & Yong-Li YANG \*

*Department of Gynaecology, Qinghai University Affiliated Hospital,  
Xining, Qinghai, China*

**SUMMARY.** The synthesis and characterization of four novel pyran derivatives (**1-4**) were realized by means of IR, <sup>1</sup>H NMR, HRMS and single crystal X-ray crystallography. The anticancer activity of the four compounds were investigated against four human cervical cancer cell lines (HCC94, MEG-01, MS751, and Hela) by MTT assay. The relationship between biological activity and structure in compounds **1** and **2** was further investigated by molecular docking study.

**RESUMEN.** La síntesis y caracterización de cuatro nuevos derivados de piran (**1-4**) se realizaron mediante IR, <sup>1</sup>H NMR, HRMS y cristalografía de rayos X de cristal único. La actividad anticancerígena de los cuatro compuestos se investigó contra cuatro líneas celulares de cáncer de cuello uterino humano (HCC94, MEG-01, MS751 y Hela) mediante ensayo MTT. La relación entre la actividad biológica y la estructura en los compuestos **1** y **2** se investigó adicionalmente mediante un estudio de acoplamiento molecular.