

3-甲基-1a-(4-甲氧基苯基)-1, 1-二氯-1, 1a, 2, 3-四氢-吡丙 啶并[1, 2-d][1, 5]苯并硫氮杂卓的合成和晶体结构

许家喜, 兰若曦, 金声

北京大学化学与分子工程学院

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 通过2-甲基-4-(4-甲氧基苯基)-2,3-二氢-1,5-苯并硫氮杂卓与二氯卡宾的[2+1]环加成反应制备了标题化合物,用X射线单晶衍射测定了其晶体结构。分子式 $C_{18}H_{17}Cl_2NOS$,分子量366.30,晶体属正交晶系,空间群 Pbc_a ,晶胞参数: $a=1.2246(3)nm$, $b=1.5219(4)nm$, $c=1.9272(9)nm$, $V=3.592(2)nm^3$, $Z=8$, $D_c=1.355g\cdot cm^{-3}$ 。位于中心的1,5-硫氮杂卓环为扭曲的类船式构象,船头与苯环并合,船底与吡丙啶环并合。

关键词 [苯并硫代杂卓](#) [吡丙啶](#) [晶体结构](#) [环加成反应](#) [X射线衍射分析](#)

分类号 [0621](#)

Synthesis and crystal structure of 1, 1-dichloro-1a-(4-methoxyphenyl) -3-methyl-1, 1a, 2, 3-tetrahydro-azirino[2, 1-d][1, 5] benzothiazepine

Xu Jiayi, Lan Ruoxi, Jin Sheng

Abstract The title compound has been synthesized by [2+1] cycloaddition reaction of 4-(4-methoxyphenyl)-2-methyl-2,3-dihydro-1,5-benzothiazepine with dichlorocarbene and the crystal structure has been determined by X-ray diffraction method. The single crystals belong to orthorhombic, space group Pbc_a with $a=1.2246(3)nm$, $b=1.5219(4)nm$, $c=1.9272(9)nm$, $V=3.592(2)nm^3$, $Z=8$, $D_c=1.355g\cdot cm^{-3}$.

Key words [CRYSTAL STRUCTURE](#) [CYCLOADDITION REACTION](#) [X-RAY DIFFRACTION ANALYSIS](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(0KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [参考文献](#)

服务与反馈

- ▶ [把本文推荐给朋友](#)
- ▶ [加入我的书架](#)
- ▶ [加入引用管理器](#)
- ▶ [复制索引](#)
- ▶ [Email Alert](#)
- ▶ [文章反馈](#)
- ▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 包含“苯并硫代杂卓”的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)

- [许家喜](#)
- [兰若曦](#)
- [金声](#)