

3 α -羟基-4 α -氯-7 α -甲基六氢茛-1,5-二酮和4 α ,5 β -环氧-8 α -甲基十氢萘1,6-二酮的晶体结构和分子构型

张志明,夏宗芴,蔡祖恽,王颖

中国科学院上海有机化学研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 用X射线晶体结构分析法测定了氯代羟基六氢茛二酮(1)和环氧十氢萘二酮(2)的晶体结构和分子构型。化合物1属正交晶系,空间群为Pbca,晶胞参数 $a=10.439(1)$, $b=19.950(2)$, $c=9.455(1)$ Å, $Z=8$;化合物2属单斜晶系,空间群为P2₁/c,晶胞参数 $a=8.355(2)$, $b=9.221(2)$, $c=25.801(4)$ Å, $\beta=94.19(1)^\circ$, $Z=8$ 。在RASA-IIS型四圆衍射仪上收集了这两个化合物的衍射数据,用直接法解晶体结构,经块对角矩阵最小二乘修正,对化合物1的1810个独立的可观察反射, $R=0.043$;对化合物2的1804个独立的可观察反射, $R=0.064$ 。化合物1带有 α -Cl, β -CH₃和 β -OH。由此推断环氧六氢茛二酮(3)的分子构型带有 β -CH₃和 β -环氧。化合物2中的甲基和环氧基均为 β 构型,与3相似,因此Danishefsky等由核磁共振所推断的关于2的分子构型中的 α 环氧应校正为 β 环氧。

关键词 [晶体结构测定](#) [氯化物](#) [X射线衍射分析](#) [环氧化物](#) [酮](#) [酮](#) [茛](#) [P](#) [构型](#) [十氢化萘](#)

分类号 [0629](#)

The crystal structures and molecular configuration of 3 α b-hydroxy-4 α -chloro-7 α b-methylperhydroindan-1,5-dione and 4 α b , 5 b-epoxy-8 α b -methyldecalin-1,6-dione

ZHANG ZHIMING,XIA ZONGXIANG,CAI ZUYUN,WANG YING

Abstract

Key words [CRYSTAL STRUCTURE DETERMINATION](#) [CHLORIDE](#) [X-RAY DIFFRACTION ANALYSIS](#) [EPOXIDE](#) [KETONE](#) [KETONE](#) [INDENE P](#) [CONFIGURATION](#) [DECALIN](#)

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“晶体结构测定” 的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)

- [张志明](#)
- [夏宗芴](#)
- [蔡祖恽](#)
- [王颖](#)