

5-取代丙二酸亚异丙酯的结构研究 II: 5-(α -异丙基)-2,2-二甲基-1,3-二氧杂环乙烷-4,6-二酮的晶体结构及量子化学计算

董南, 吴念慈, 黄宪, 胡盛志, 麦松威

杭州大学化学系; 厦门大学化学系; 香港中文大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 5-(α -异丙基)-2,2-二甲基-1,3-二氧杂环己烷-4,6-二酮 C₉H₁₄O₄, MT=186.21, 正交晶系, 空间群为 P2₁2₁2₁, 晶胞参数为: a=5.228(1), b=11.079(4), c=16.955埃. V=892.1(5)埃³, D_c=1.286g.cm⁻³. Z=4, μ (MoK α)=0.92cm⁻¹. 用直接法解出结构, 经最小二乘法修正, 最后的偏离因子 R=0.062. 结构测定表明, 分子内六元环具有扭曲船式结构. 对 5-(α -苯乙基)-2,2-二甲基-1,3-二氧杂环己烷-4,6-二酮的 CNDO/2 计算表明, 最稳定构型是扭曲船式结构, 与 X 射线晶体分析结果相一致.

关键词 [晶体结构](#) [量子化学](#) [微分重叠全忽略近似](#) [二元酮](#) [二氧六环](#) [P](#)

分类号 [074](#) [0621](#)

Conformational investigations of 5-substituted isopropylidene malonates II: Structure of 5-(α -isopropyl)-2, 2-dimethyl-1,3-dioxan-4,6-dione

DONG NAN, WU NIANCI, HUANG XIAN, HU SHENGZHI, MAK THOMAS C. W.

Abstract The structure of the title compound (I) was determined by x-ray crystallog. The 1,3-dioxane-4,6-dione ring had a twist-boat conformation. A CNDO/2 study of 5-(α -phenylethyl)-2,2-dimethyl-1,3-dioxane-4,6-dione showed that the most stable conformation was the twist-boat form.

Key words [CRYSTAL STRUCTURE](#) [QUANTUM CHEMISTRY](#) [CNDO APPROXIMATION](#) [DIKETONE](#) [DIOXANE](#) [P](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(314KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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”的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

- [董南](#)
- [吴念慈](#)
- [黄宪](#)
- [胡盛志](#)
- [麦松威](#)