

研究论文

1-(4-甲氧基)苯甲酰基-3-(4,6-二甲基嘧啶-2-氨基)硫脲的晶体结构、理论计算及生物活性

张杜蓓^a 任莹辉^{*},^a 傅丁薇^a 严彪^a 宋纪蓉^{*,a,b} 吕兴强^a

(^a西北大学化工学院陕西省物理无机化学重点实验室 西安 710069)

(^b故宫博物院文保科技部 北京 100009)

收稿日期 2008-1-9 修回日期 2008-4-15 网络版发布日期 2008-11-17 接受日期 2008-7-16

摘要

2-氨基-4,6-二甲基嘧啶与硫氰酸钾、4-甲氧基苯甲酰氯在乙酸乙酯中反应,合成了1-(4-甲氧基)苯甲酰基-3-(4,6-二甲基嘧啶-2-氨基)硫脲,并用X射线单晶衍射法测定其晶体结构,晶体属单斜晶系,空间群为P21/n,晶胞参数为: a=1.0134(4) nm, b=1.3172(5) nm, c=1.0988(4) nm, $\beta=91.671(8)^\circ$, V=1.4661(9) nm³, D_c=1.433 g/cm³, $\mu=0.234$ mm⁻¹, F(000)=664, Z=4, R1=0.0571, wR2=0.1328. 运用Gaussian 03程序,对标题化合物进行了HF/6-31+g(d)和B3LYP/6-31+g(d)水平的几何全优化和频率计算,并对其成键情况及自然键轨道(NBO)进行了分析. 初步实验证明该化合物具有良好的生物活性.

关键词

[酰基硫脲](#) [晶体结构](#) [量子化学计算](#) [自然键轨道](#) [生物活性](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

任莹辉 songji@nwu.edu.cn

作者个人主页:

张杜蓓^a 任莹辉^{*};^a 傅丁薇^a 严彪^a 宋纪蓉^{*,a,b} 吕兴强^a

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF](#)(341KB)

▶ [\[HTML全文\]](#)(0KB)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [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](#)

▶ [引用本文](#)

▶ [Email Alert](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含 “](#)

[酰基硫脲” 的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [张杜蓓,任莹辉,傅丁薇,严彪,宋纪蓉,吕兴强](#)