

双环笼状磷酸酯衍生物的研究III. 双环笼状磷酸酯酰氯与邻氨基酚和邻苯二胺反应的研究及1-氧代-4-(2'-苯并 唑基)-2,6,7-三氧杂-1-磷杂双环[2.2.2]辛烷的晶体结构分析

缪方明,刘小兰,李玉桂,王建基,刘云山,包建春,曹金鸿,周伟

天津师范大学化学系;南开大学元素有机化学研究所;中国军事医学科学院

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 本文报道双环笼状磷酸酯酰氯(1)与邻氨基酚和邻苯二胺的反应。1. 与邻氨基酚在硼酸和三乙胺存在下一锅反应可得关环产的1-氧代-4-(2'-苯并 唑基)-2,6,7-三氧杂-1-磷杂双环[2.2.2]辛烷(2)。改变1和邻苯二胺反应的加料顺序可得单酰化产物1-氧代-4-(N-邻苯二胺甲酰基)-2,6,7-三氧杂-1-磷杂双环[2.2.2]辛烷(5)和双酰化产物1,1'-氧代-4,4'-(N,N'-邻苯二胺二甲酰基)-双(2,6,7-三氧杂-1-磷杂双环[2.2.2]辛烷)(4)。对产物的IR, ¹H, ³¹P NMR和MS谱进行了研究,并确定了2的晶体和分子结构。结构分析表明,笼状结构OP(OCH₂)₃C中基本上不存在应力,仍保持C_{3v}的对称性。晶体属单斜晶系,空间群P2₁/c,晶胞参数:a=0.6176(1), b=1.6105(2), c=1.1354(1)nm,β=92.52(1)°, Z=4,最终偏离因子R=0.056。

关键词 [晶体结构测定](#) [红外分光光度法](#) [质谱法](#) [酰氯](#) [氨基酚](#) [质子磁共振谱法](#) [磷酸酯类](#) [磷杂环化合物](#) [苯二胺](#) [氧杂二环辛烷](#) [P](#) [笼状结构](#) [双环化合物](#) [磷31核磁共振谱法](#) [苯并恶唑](#)

分类号 [0621](#)

Study of caged bicyclic phosphate derivatives. III. Study on the reaction of caged bicyclic phosphate acyl chloride with o-aminophenol or o-phenylenediamine and the crystal and molecular structure of 1-oxo-4-(2'-benzoxazolyl)-2,6,7-trioxa-1-phosphabicyclo

MIAO FANGMING,LIU XIAOLAN,LI YUGUI,WANG JIANJI,LIU YUNSHAN,BAO JIANCHUN,CAO JINHONG,ZHOU WEI

Abstract

Key words [CRYSTAL STRUCTURE DETERMINATION](#) [INFRARED SPECTROPHOTOMETRY](#) [MASS SPECTROGRAPHY](#) [ACYL CHLORIDES](#) [AMINOPHENOL](#) [PROTON MAGNETIC RESONANCE SPECTROMETRY](#) [PHOSPHORIC ACID ESTER](#) [PHOSPHOROUS HETEROCYCLIC COMPOUNDS](#) [BENZENEDIAMINE](#) [OXABICYCLOCTANE](#) [P](#) [CAGE STRUCTURE](#) [BICYCLIC COMPOUND](#) [PHOSPHORUS 31 MAGNETIC RESONANCE SPECTROMETRY](#) [BENZOXAZOLE](#)

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

- [缪方明](#)
- [刘小兰](#)
- [李玉桂](#)
- [王建基](#)
- [刘云山](#)
- [包建春](#)
- [曹金鸿](#)
- [周伟](#)