

α -氰基- α -(2, 4-二硝基苯基)苯乙酸乙酯的分子和晶体结构及¹H NMR谱特征

贾志胜, 齐陈泽, 杨第伦

兰州大学化学系; 兰州大学应用有机化学国家重点实验室

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 用X射线晶体结构分析方法测定了具有R和S构型的 α -氰基- α -(2, 4-二硝基苯基)苯乙酸乙酯的晶体结构和分子结构,

结合光谱测定结果研究了分子内取代基的空间效应和电子效应对分子结构的影响。根据结构特性解释了在2, 4-二硝基卤代苯与 α -氰基苯乙酸乙酯苯碳负离子反应合成该化合物机理研究中所涉及的问题, 并使分子中乙氧基的异常键参数和NMR谱得到充足的证据进行解释。

关键词 [苯乙酸 P](#) [晶体结构](#) [分子结构](#) [乙酯](#) [硝基苯 P](#) [质子磁共振谱法](#) [氰基](#) [立体电子效应](#)

分类号 [0621](#)

Crystal and molecular structure of ethyl α -cyano- α -(2, 4- dinitrophenyl) phenylacetate and its special spectroscopy information

JIA ZHISHENG, QI CHENZE, YANG DILUN

Abstract The crystal and molecular structure of ethyl α -cyano- α -(2, 4- dinitrophenyl) phenylacetate was determined. The data of the crystal and molecular structure were collected at space group P21/c, a=0.8903(1), b=1.2303(1), c=1.5119(3)nm, β =94.23(1) $^\circ$, V=1.6515nm³, μ (MoK α)=8.951cm⁻¹, Dc=1.429(g/cm³), Z=4, final R=0.075, Rw=0.069 for 3283 observed unique reflections. By the comparison with ethyl α - cyano- α -(2-nitrophenyl) acetate, it was studied the influence of steric and electronic effects in molecule to the bond parameters and special spectroscopy information. So was that to the bond parameters and ¹H NMR spectroscopy of ethoxy group in molecule.

Key words [BENZENEACETIC ACID P](#) [CRYSTAL STRUCTURE](#) [MOLECULAR STRUCTURE](#) [ETHYL ESTER](#) [NITROBENZENE P](#) [PROTON MAGNETIC RESONANCE SPECTROMETRY](#) [CYANO GROUP](#) [STEREOELECTRONIC EFFECT](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(518KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [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“苯乙酸 P”的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)

- [贾志胜](#)
- [齐陈泽](#)
- [杨第伦](#)