

#### 4,4'-二氧二(苯胺灵)的合成和晶体结构

王文芝; 樊能廷

中国林业科学研究院, 森林生态环境与保护研究所, 北京 100091

##### 摘要:

通过4,4'-二氧二(异氰酸苯酯)与异丙醇加成反应, 合成标题化合物 4,4'-二氧二(苯胺灵) (I) (C<sub>20</sub>H<sub>24</sub>N<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, Mr=372.41), 并用X射线衍射、红外光谱、<sup>13</sup>C核磁共振、电子轰击质谱和元素分析对标题化合物进行表征. 晶体属于三斜晶系, 空间群为P1晶体学参数为: a=0.85107(17), b=0.90145701(3) nm, α=80.44(3)°, β=85.25(3)°, γ=62.88(3)°, V=0.9922(3) nm<sup>3</sup>, Z=2, Dc=1.247 g·cm<sup>-3</sup>, μ(Mo Kα)=0.90 cm<sup>-1</sup>, F(000)=396, 两个苯环平面之间的夹角为62.06° (0.06°). 晶体结构经全矩阵最小二乘法修正, 最终偏离因子R=0.0520, wR=0.1434(对可观察点). 此化合物的性质.

关键词: 4,4'-二氧二(苯胺灵) 合成 晶体结构

收稿日期 2002-04-12 修回日期 2002-06-06 网络版发布日期 2003-01-15

通讯作者: 樊能廷 Email: wangwzh@forestry.ac.cn

本刊中的类似文章