

研究论文

4,6-二甲氧基-2-[甲氧脲基硫代脲基]嘧啶的合成、晶体结构和理论计算

黄洁¹, 宋纪蓉*¹, 任莹辉¹, 马海霞¹, 王花丽¹, 胡怀明², 文振翼³

(¹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)

(²西北大学化学系 西安 710069)

(³西北大学现代物理研究所 西安 710069)

收稿日期 2005-4-6 修回日期 2005-9-14 网络版发布日期 接受日期

摘要 利用2-氨基-4,6-二甲氧基嘧啶在干燥条件下与硫氰酸钾、氯甲酸甲酯在乙酸乙酯溶液中反应制得4-(4,6-二甲氧基嘧啶-2-基)-3-硫代脲酸甲酯, 在二甲基甲酰胺溶液中培养出单晶, 通过X射线单晶结构分析法测定分子结构和晶体结构, 晶体属单斜晶系, 空间群为C2/m, 晶胞参数为: $a=1.6672(3)$ nm, $b=0.66383(12)$ nm, $c=1.1617(2)$ nm, $\beta=109.275(2)^\circ$, $V=1.2136(4)$ nm³, $D_c=1.490$ g/cm³, $\mu=0.281$ mm⁻¹, $F(000)=568$, $Z=4$, $R_1=0.0341$, $wR_2=0.1042$. 运用Gaussian 03程序, 在6-311G的基组水平上, 用HF, MP2

以及B3LYP三种计算方法对标题化合物进行了几何全优化, 并对其成键情况及自然键轨道(NBO)进行了分析.

关键词 [4-\(4,6-二甲氧基嘧啶-2-基\)-3-硫代脲酸甲酯](#) [2-氨基-4,6-二甲氧基嘧啶](#) [晶体结构](#) [量子化学计算](#) [自然键轨道\(NBO\)](#)

分类号

Preparation, Crystal Structure and Theoretical Calculation of 4,6-Dimethoxy-2-(methoxycarbamidothiocarbamido)pyrimidine

HUANG Jie¹, SONG Ji-Rong*¹, REN Ying-Hui¹, MA Hai-Xia¹, WANG Hua-Li¹, HU Huai-Ming², WEN Zhen-Yi³

(¹ Shaanxi Key Laboratory of Physico-inorganic Chemistry, Department of Chemical Engineering, Northwest University, Xi'an 710069)

(² Department of Chemistry, Northwest University, Xi'an 710069)

(³ Modern Physics Institute, Northwest University, Xi'an 710069)

Abstract 4,6-Dimethoxy-2-(methoxycarbamidothiocarbamido)pyrimidine was synthesized by mixing 2-amino-4,6-dimethoxypyrimidine, KSCN and ClCOOCH₃ in ethyl acetate. The structure was characterized by elemental analysis and IR. The single crystal structure was determined by X-ray diffraction analysis. The crystal belongs to monoclinic system with space group C2/m and cell parameters: $a=1.6672(3)$ nm, $b=0.66383(12)$ nm, $c=1.1617(2)$ nm, $\beta=109.275(2)^\circ$, $V=1.2136(4)$ nm³, $D_c=1.490$ g/cm³, $\mu=0.281$ mm⁻¹, $F(000)=568$, $Z=4$, $R_1=0.0341$, $wR_2=0.1042$. The theoretical investigation of the title compound as a structure unit was carried out by HF/6-311G, MP2/6-311G and B3LYP/6-311G methods, and the atomic charges and natural bond orbital analysis were also discussed.

Key words [4,6-dimethoxy-2-\(methoxycarbamidothiocarbamido\)pyrimidine](#) [2-amino-4,6-dimethoxypyrimidine](#) [crystal structure](#) [theoretical calculation](#) [natural bond orbital \(NBO\)](#)

DOI:

通讯作者 宋纪蓉 huangjie@nwu.edu.cn

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(415KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“4-\(4,6-二甲氧基嘧啶-2-基\)-3-硫代脲酸甲酯”的 相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [黄洁](#)

· [宋纪蓉](#)

· [任莹辉](#)

· [马海霞](#)

· [王花丽](#)

· [胡怀明](#)

· [文振翼](#)