

6-(Chloro)-4-(dimethylamino)-2-(2-methyl-*o*-carboranyl)- 1,3,5-Triazine 화합물의 합성 및 구조

조성일, 강상욱*, 임홍규*, 최동웅*, 서은영

서울시립대학교, *고려대학교

6-(Chloro)-4-(dimethylamino)-2-(2-methyl-*o*-carboranyl)-1,3,5-Triazine $C_8H_{19}B_{10}N_4Cl$ 의 구조를 1H -NMR, ^{13}C -NMR, 원소분석, 그리고 X-선 회절법으로 규명하였다. 결정의 공간군은 $P2_1/n$ 이다. 단위세포 상수는 $a=7.7783(6)$, $b=27.0771(13)$, $c=8.0781(4)\text{\AA}$, $\beta=90.3112(49)^\circ$, $Z=4$, $V=1701.33(18)\text{\AA}^3$ 이다. 회절반점의 세기는 Enraf-Nonius CAD-4 Diffractometer로 얻었으며, Mo-K α radiation ($\lambda=0.7107\text{\AA}$)을 사용하였다. 분자구조는 직접법으로 풀었으며 최소자승법으로 정밀화하였다. 최종신뢰도 R 값은 3331 개의 회절반점에 대하여 0.0643 이었다.

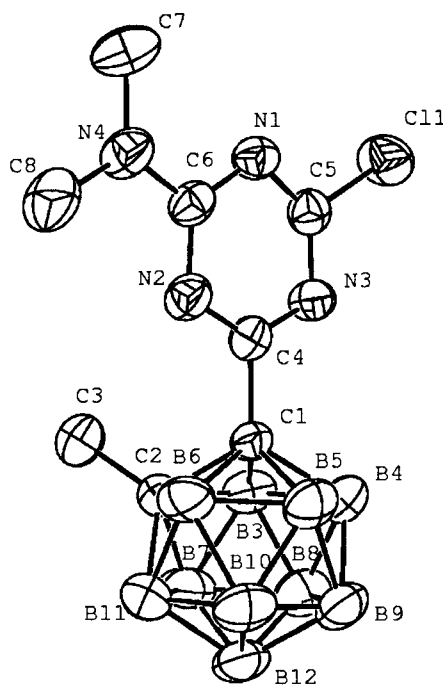


Fig. Structure of 6-(Chloro)-4-(dimethylamino)-2-(2-methyl-*o*-carboranyl)-1,3,5-Triazine