

Crystal structure, conformation and vibrational characteristics of diethyl 4,4'-disulfanediylbis(6-methyl-2-phenylpyrimidine-5-carboxylate) : a new pharmaceutical cure

Autorzy

Wojciech Sąsiadek

Iwona Bryndal

Jadwiga Lorenc

Maciej Ptak

Jerzy Cieplik

Marcin Stolarczyk

Tadeusz Lis

Jerzy Hanuza

Rok wydania

2019

Czasopismo

Arabian Journal of Chemistry

Numer woluminu

12

Strony

881-896

DOI

10.1016/j.arabjc.2016.03.004

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Streszczenie

The crystal and molecular structures of diethyl 4,4'-disulfanediylbis(6-methyl-2-phenylpyrimidine-5-carboxylate) have been determined by X-ray diffraction and quantum chemical DFT analysis. The title compound crystallizes in orthorhombic $Pbca$ (D_{2h}^{15}) space group, with one molecule in the asymmetric unit. The molecular structure of the studied compound has been determined using the DFT B3LYP/6-311G(2d,2p) approach and compared to that derived from X-ray studies. The IR and Raman spectra have been measured and their wavenumbers have been compared to those calculated for the optimized geometry of the studied compound. The characteristic vibrations of the 4,4'-dithiobispyrimidine $N_2C_4SSC_4N_2$ skeleton have been identified and on this basis the correlation between the disulfide bridge conformation and vibrational data have been discussed.

Słowa kluczowe

Disulfide bond, 6-Methyl-2-phenylpyrimidine derivatives, IR and Raman spectroscopy, X-ray diffraction, Synthesis, Quantum chemical calculation

Licencja otwartego dostępu

CC-BY-NC-ND

Licencja ta zezwala na rozpowszechnianie, przedstawianie i wykonywanie utworu jedynie w celach niekomercyjnych oraz pod warunkiem zachowania go w oryginalnej postaci (nie tworzenia utworów zależnych). Jest to najbardziej restrykcyjna z licencji.

Pełny tekst licencji: <https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/legalcode>

Typ publikacji

Artykuł

Adres publiczny

<http://dx.doi.org/10.1016/j.arabjc.2016.03.004>

Strona internetowa wydawcy

<http://www.elsevier.com>

Plik został wygenerowany dnia 2026-08-24 03:59:00

Adres w repozytorium <https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/elB3mJl>.