

N-[1-(benzotriazol-1-yl)butyl]-p-nitroaniline의 구조

조소라, 김문집, 성낙도*

순천향대학교 자연과학대학 물리학과

*충남대학교 농과대학 농화학과

Crystal Structure of N-[1-(benzotriazol-1-yl)butyl]-p-nitroaniline

So-Ra Cho, Moon-Jib Kim, Nack-Do Sung*

Department of Physics, Soonchunhyang University

*Department of Agricultural Biology, Chungnam National University

요 약

N-[1-(benzotriazol-1-yl)butyl]-p-nitroaniline [BBN, $C_{16}H_{17}N_5O_2$] 의 분자 및 결정구조를 X-선 회절법 Abstract으로 연구하였다. 이 결정은 단사정계이고 공간군은 $P2_1/n$ 이다. 단위세포 길이는 $a = 17.542(2) \text{ \AA}$, $b = 10.755(3) \text{ \AA}$, $c = 8.891(1) \text{ \AA}$ 이며 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, $\beta = 104.58(1)^\circ$, $Z=4$ 이다. 구조해석에 사용한 X-선은 $CuK\alpha$ 선($\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$)을 사용하였다. 분자구조는 직접법으로 풀었으며 최소자승법으로 정밀화하였다. 최종 신뢰도 R값은 255개 파라미터, $F \geq 4\sigma(F)$ 인 2248개의 회절반점에 대하여 $R = 0.0411$ 이었다.

분자간 결합은 1개의 수소결합인 $N(11)-H11(N11) \cdots N(3)$ 로 결합되어 있으며, $N(11) \cdots N(3) = 3.136(2) \text{ \AA}$, $N(11)-H11(N11) \cdots N(3) = 164.1(15)^\circ$ 이다.

Abstract

The crystal structure of N-[1-(benzotriazol-1-yl)butyl]-p-nitroaniline [$C_{16}H_{17}N_5O_2$] has been determined from single crystal x-ray diffraction study : $C_{16}H_{17}N_5O_2$, monoclinic, $P2_1/n$, $a = 17.542(2) \text{ \AA}$, $b = 10.755(3) \text{ \AA}$, $c = 8.891(1) \text{ \AA}$, $\beta = 104.58(1)^\circ$, $V = 1623.4(5) \text{ \AA}^3$, $T = 293(2) \text{ K}$, $Z = 4$, $CuK\alpha$ ($\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$), The molecular struture was solved was by direct method refined by full-matrix least squares to a final $R = 0.0411$ for 2248 unique observed [$F \geq 4\sigma(F)$] reflections and 255 parameters. The crystal structure is stabilized by intermolecular $N(11)-H11(N11) \cdots N(3)$ hydrogen bond with $N(11) \cdots N(3) = 3.136(2) \text{ \AA}$ and $N(11)-H11(N11) \cdots N(3) = 164.1(15)^\circ$

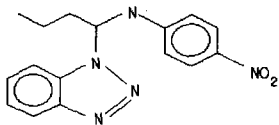
1. 서 론

N-치환 benzotriazole과 그의 유도체들은 이론적인 흥미 이외에도 광범위한 생물활성으로 인하여 농업분야에 있어서 뿐만 아니라 그 유용성이 다양하여 합성 대상물질로써 가치가 큰 화합물로 알려져 있다.¹⁾

Sung등은 일련의 N-[1-(benzotriazol-1-yl)benzyl]aniline 유도체를 합성하여 C-phenyl group과 N-phenyl group에 치환기 변화에 따른 가수분해 반응을 검토한 바, pH12.0 이하에서는 A-SN₂형 반응 그리고 pH13.0의 강알칼리성 용액에서는 SN₂형 반응메카니즘으로 진행됨을 보고한 바 있다.²⁾ 또한 N-[1-(benzotriazol-1-yl)aryl]aryllarylaniline³⁾ 및 1-(phenoxymethyl)benzotriazole⁴⁾ 유도체들은 참깨시들음병균(*Fusarium oxysporum* f. sp. *sesami*), 벼 도열병균(*Pyricularia oryzae*), 사과부란병균(*Valsaceratosperma*), 잣빛곰팡이병(*Botrytis cinerea*)등의 곰팡이균을 효과적으로 방제할수 있는 항균활성(Fungicidal activity)이 있음을 알았으며⁵⁾ 뿐만 아니라, 벼(*Oryza sativa* L.)와 피(*Echinochloa crys-galli*)의 광합성(PS-II)을 저해하는 제초활성(herbicidal activity)이 있음을 확인한 바 있다.⁶⁾

N-치환 benzotriazole 유도체중에서 결정구조에 관한 연구로는 N,N' - is(benzotriazolylmethyl)-N,N'-diocylethylendiamine⁷⁾에 관하여 연구된 바가 있었다.

본 연구에서는 N-치환 benzotriazole의 유도체의 하나인 N-[1-(benzotriazol-1-yl)butyl]-p-nitroaniline(이하 BBN, scheme I)의 구조를 X-선 회절방법으로 규명하고자 한다.



scheme (I)

2. 실험

본 실험에 사용한 BBN의 결정의 크기는 0.23×0.23×0.26 mm이다. 50.7° ≤ θ ≤ 60.9° 사이에 25개의 회절반점을 측정한다 a=17.542(2) Å, b = 10.755(3) Å, c=8.8910(10) Å, α = γ = 90°, β = 104.58(10)°, V = 1623.4(5) Å³ 이었으므로 본 시료의 결정계는 monoclinic임을 알았다. 실험은 도는 T = 293(2)K이며 단위포당 분자수는 Z = 4이다. -19 ≤ h ≤ 19, 0 ≤ k ≤ 12, 0 ≤ l ≤ 10 사이에서 2924개의 회절데이터를 수집하였으며, 독립 회절반점수는 2481개이고, 사용한 파장은 graphite로 단색화한 CuK α (= 1.5418 Å)이고 ω/2θ 로 scan하였다.

측정한 회절 데이터는 Lorentz-polarization factor를 보정하였으나 흡수보정은 하지 않았다. 측정된 회절데이터로부터 소멸관계를 조사하여 (h0l: h+l=2n+1), (h00: h=2n+1), (0k0: k=2n+1), (00l: l=2n+1)일 때 회절현상이 일어나지 않은 것으로 부터 공간군이 centrosymmetry인 P2₁/n임을 알았다.

결정구조는 MULTAN87⁸⁾을 사용한 직접법으로 밝혔으며, SHELXL93⁹⁾을 사용하여 full-matrix least-square방법으로 정밀화하였다. 비수소원자 23개에 대하여 비등방성 온도인자를, 수소원자 17개는 등방성 온도인자를 사용하였다. Refine은 ∑ω(F₀²-F_c²)²을 최소화하였으며, 여기서

$$\omega = [\sigma^2(F_0) + (0.07639P)^2 + 0.2139P]^{-1},$$

P = (F₀² + 2F_c²)/3이고, parameter수는 225개이다. 최종 신뢰도인자는 [F > 4σ(F)] 인 2248개의 독립회절 데이터에 대해

$$R1 = 0.0411, \left[R1 = \frac{\sum |F_0| - |F_c|}{\sum |F_0|} \right],$$

$$\omega R2 = 0.1212 \left[\omega R2 = \frac{\sum [\omega (F_0^2 - F_c^2)]^2 }{\sum \omega F_0^4} \right]^{1/2}$$

이다. 실험에 대한 사항은 Table.1에 정리하였다.

비수소원자의 최종 원자좌표와 온도인자는 Table.2에, 수소원자의 최종 원자좌표와 온도인자는 Table.3에, 등가온도인자들은 Table.4에 비수소원자들간의 결합거리와 결합각은 Table.5 정리하였다. 분자구조와 관련한 기하학적인 계산은 GEOM program¹⁰⁾을 이용하였으며 모든 계산은 SPARC STATION IPC와 PC486을 사용하였다.

3. 결과 및 고찰

BBN [C₁₆H₁₇N₅O₂] 는 butyl기, aniline nitro기, benzotriazole기인 4가지 부분으로 나누어져 있으며 이의 ORTEP¹¹⁾ 그림을 Fig.1에 표시하였다. butyl기에서 C-C결합길이의 평균값은 1.516(2)Å, butyl기의 C(10)과 aniline기의 N(11)과의 결합길이

Table 1. Crystal data and structure refinement for BBN.

Empirical formula	C ₁₆ H ₁₇ N ₅ O ₂
Formula weight	311.35
Temperature	293(2) K
Wavelength	1.54178 Å
Crystal system	Monoclinic
Space group	P2 ₁ /n
Unit cell dimensions	a = 17.542(2) Å α = 90° b = 10.755(3) Å β = 104.58(1)° c = 8.891(1) Å γ = 90°
Volume	1623.4(5) Å ³
Z	4
Density (calculated)	1.274 Mg/m ³
Absorption coefficient	0.720 mm ⁻¹
F(000)	656
Crystal size	0.3 × 0.2 × 0.2 mm
Theta range for data collection	4.87 to 62.09 deg.
Index ranges	-19 ≤ h ≤ 19, 0 ≤ k ≤ 12, 0 ≤ l ≤ 10
Reflections collected	2924
Independent reflections	2481
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	2479 / 0 / 225
Goodness-of-fit on F ²	1.062
Final R indices [F > 4 σ(F)]	R1 = 0.0411, ωR2 = 0.1212
R indices (all data)	R1 = 0.0580, ωR2 = 0.1397
Largest diff. peak and hole	0.151 and -0.159 e. Å ⁻³

Table 2. Atomic coordinates (×10⁴) and equivalent isotropic displacement parameters (Å²×10³) for BBN. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

$$U_{eq} = \frac{1}{3} \sum_i \sum_j U_{ij} a_i^* a_j^* a_i \cdot a_j$$

	x	y	z	U(eq)
N(1)	7411(1)	1038(1)	1636(1)	55(1)
N(2)	7192(1)	57(1)	684(2)	68(1)
N(3)	6491(1)	-300(1)	759(2)	77(1)
C(4)	5550(1)	456(2)	2310(3)	92(1)
C(5)	5500(1)	1307(2)	3417(3)	99(1)
C(6)	6104(1)	2152(2)	4004(3)	91(1)
C(7)	6778(1)	2186(2)	3511(2)	70(1)
C(8)	6840(1)	1316(1)	2375(2)	56(1)
C(9)	6246(1)	460(1)	1789(2)	67(1)
C(10)	8180(1)	1643(1)	1731(2)	56(1)
N(11)	8572(1)	1895(1)	3316(1)	60(1)
C(12)	8821(1)	997(1)	4422(2)	53(1)
C(13)	8823(1)	-266(1)	4039(2)	57(1)
C(14)	9113(1)	-1136(2)	5160(2)	58(1)
C(15)	9399(1)	-766(2)	6681(2)	57(1)
C(16)	9394(1)	474(2)	7104(2)	62(1)
C(17)	9099(1)	1345(2)	5983(2)	60(1)
N(18)	9726(1)	-1695(2)	7852(2)	69(1)
O(19)	9602(1)	-2791(1)	7529(2)	97(1)
O(20)	10119(1)	-1351(1)	9122(2)	88(1)
C(21)	8090(1)	2827(2)	773(2)	64(1)
C(22)	7756(1)	2634(2)	-958(2)	83(1)
C(23)	7743(2)	3837(3)	-1850(3)	112(1)

Table 3. Hydrogen coordinates (×10⁴) and isotropic displacement parameters (Å²×10³) for BBN.

	x	y	z	U(eq)
H(4)	5144(1)	-102(2)	1915(3)	102(7)
H(5)	5051(1)	1324(2)	3792(3)	118(8)
H(6)	6044(1)	2714(2)	4760(3)	120(9)
H(7)	7177(1)	2756(2)	3908(2)	84(6)
H(10)	8507(1)	1064(1)	1316(2)	54(4)
H(11)	8656(1)	2659(1)	3593(1)	71(5)
H(13)	8626(1)	-516(1)	3014(2)	62(4)
H(14)	9117(1)	-1972(2)	4897(2)	68(5)
H(16)	9588(1)	711(2)	8135(2)	72(5)
H(17)	9084(1)	2177(2)	6262(2)	64(4)
H(21A)	7747(1)	3393(2)	1147(2)	70(5)
H(21B)	8601(1)	3222(2)	939(2)	81(5)
H(22A)	8074(1)	2026(2)	-1331(2)	95(6)
H(22B)	7225(1)	2308(2)	-1144(2)	94(6)
H(23A)	7529(2)	3685(3)	-2939(3)	148(10)
H(23B)	8269(2)	4153(3)	-1682(3)	120(9)
H(23C)	7421(2)	4435(3)	-1495(3)	159(13)

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for BBN.

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$$-2\pi^2 [h^2 a^2 U_{11} + k^2 b^2 U_{22} + l^2 c^2 U_{33} + 2hka^2 b^2 U_{12} + 2kib^2 c^2 U_{23} + hla^2 c^2 U_{13}]$$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
N(1)	61(1)	49(1)	53(1)	-3(1)	11(1)	1(1)
N(2)	80(1)	56(1)	64(1)	-8(1)	9(1)	1(1)
N(3)	77(1)	58(1)	86(1)	-2(1)	3(1)	-10(1)
C(4)	64(1)	76(1)	132(2)	31(1)	8(1)	-8(1)
C(5)	83(1)	93(2)	134(2)	24(1)	55(1)	12(1)
C(6)	96(1)	84(1)	107(2)	6(1)	54(1)	11(1)
C(7)	78(1)	62(1)	75(1)	2(1)	30(1)	3(1)
C(8)	59(1)	47(1)	60(1)	10(1)	14(1)	4(1)
C(9)	64(1)	50(1)	82(1)	13(1)	10(1)	0(1)
C(10)	56(1)	59(1)	56(1)	-1(1)	16(1)	3(1)
N(11)	68(1)	50(1)	59(1)	-2(1)	9(1)	-2(1)
C(12)	48(1)	55(1)	56(1)	-3(1)	14(1)	0(1)
C(13)	60(1)	57(1)	53(1)	-7(1)	11(1)	1(1)
C(14)	58(1)	55(1)	63(1)	-4(1)	15(1)	3(1)
C(15)	51(1)	66(1)	55(1)	2(1)	16(1)	5(1)
C(16)	62(1)	74(1)	51(1)	-7(1)	14(1)	1(1)
C(17)	62(1)	56(1)	60(1)	-10(1)	14(1)	0(1)
N(18)	68(1)	80(1)	63(1)	6(1)	21(1)	12(1)
O(19)	124(1)	71(1)	91(1)	15(1)	20(1)	18(1)
O(20)	91(1)	111(1)	58(1)	9(1)	9(1)	15(1)
C(21)	64(1)	65(1)	65(1)	7(1)	20(1)	-1(1)
C(22)	92(1)	99(1)	62(1)	11(1)	23(1)	8(1)
C(23)	119(2)	138(2)	84(2)	43(2)	31(1)	3(2)

Table 5. Bond lengths [\AA] and angles [$^\circ$] for BBN.

N(1)-N(2)	1.347(2)	N(11)-C(12)	1.369(2)
N(1)-C(8)	1.363(2)	C(12)-C(17)	1.401(2)
N(1)-C(10)	1.480(2)	C(12)-C(13)	1.401(2)
N(2)-N(3)	1.306(2)	C(13)-C(14)	1.368(2)
N(3)-C(9)	1.374(2)	C(14)-C(15)	1.377(2)
C(4)-C(5)	1.363(3)	C(15)-C(16)	1.386(2)
C(4)-C(9)	1.411(3)	C(15)-N(18)	1.453(2)
C(5)-C(6)	1.393(3)	C(16)-C(17)	1.371(2)
C(6)-C(7)	1.362(3)	N(18)-O(19)	1.220(2)
C(7)-C(8)	1.401(2)	N(18)-O(20)	1.223(2)
C(8)-C(9)	1.389(2)	C(21)-C(22)	1.517(2)
C(10)-N(11)	1.430(2)	C(22)-C(23)	1.515(3)
C(10)-C(21)	1.518(2)		
N(2)-N(1)-C(8)	110.2(1)	N(1)-C(10)-C(21)	111.8(1)
N(2)-N(1)-C(10)	119.5(1)	C(12)-N(11)-C(10)	124.2(1)
C(8)-N(1)-C(10)	130.3(1)	N(11)-C(12)-C(17)	119.5(1)
N(3)-N(2)-N(1)	108.8(1)	N(11)-C(12)-C(13)	122.0(1)
N(2)-N(3)-C(9)	108.4(1)	C(17)-C(12)-C(13)	118.6(1)
C(5)-C(4)-C(9)	116.9(2)	C(14)-C(13)-C(12)	120.6(1)
C(4)-C(5)-C(6)	121.8(2)	C(13)-C(14)-C(15)	119.6(2)
C(7)-C(6)-C(5)	122.5(2)	C(14)-C(15)-C(16)	121.2(2)
C(6)-C(7)-C(8)	116.4(2)	C(14)-C(15)-N(18)	119.0(2)
N(1)-C(8)-C(9)	104.3(1)	C(16)-C(15)-N(18)	119.7(1)
N(1)-C(8)-C(7)	133.9(1)	C(17)-C(16)-C(15)	119.2(1)
C(9)-C(8)-C(7)	121.8(2)	C(16)-C(17)-C(12)	120.7(2)
N(3)-C(9)-C(8)	108.3(2)	O(19)-N(18)-O(20)	122.4(2)
N(3)-C(9)-C(4)	131.1(2)	O(19)-N(18)-C(15)	118.8(2)
C(8)-C(9)-C(4)	120.5(2)	O(20)-N(18)-C(15)	118.8(2)
N(11)-C(10)-N(1)	110.2(1)	C(22)-C(21)-C(1)	114.4(2)
N(11)-C(10)-C(21)	110.5(1)	C(23)-C(22)-C(21)	111.4(2)

는 1.430(2) \AA 이고 benzotriazole기의 N(1)과의 결합길이는 1.480(2) \AA 으로 나타났다. benzotriazole기의 N(1)-N(2)의 결합길이는 1.347(2) \AA 이고 N(2)-N(3)는 이중결합으로 결합길이는 1.306(2) \AA 이었다. N(3)-C(9), N(1)-C(8)의 결합길이는 각각 1.374(2) \AA, 1.363(2) \AA 이고 benzene의 C-C결합길이는 평균 1.387 \AA 이다. aniline기의 N(11)과 C(12)와의 결합길이는 1.369(2) \AA 이고 benzene의 C-C 결합길이의 평균값은 1.384 \AA 으로 나타났다. aniline기의 C(15)와 nitro기의 N(18)과의 결합길이는 1.453(2) \AA 이고 nitro기의 N(18)-O(19), N(18)-O(20)과의 결합길이는 각각 1.220(2) \AA, 1.223(2) \AA 이었으며 이 값들을 Table.6에 정리하였다.

Benzotriazole기의 benzene ring의 결합각은 116.4(2) $^\circ$ 에서 122.5(2) $^\circ$ 까지이고 평균값은 119.9 $^\circ$ 이며, aniline기의 benzene ring의 결합각은 118.6(1) $^\circ$ 에서 121.2(2) $^\circ$ 까지이고 평균값은 119.9 $^\circ$ 로 두개 모두 benzene ring의 일반적인 결합각 120 $^\circ$ 와 잘 일치한다. triazole ring의 결합각은 104.3(1) $^\circ$ 에서 110.2(1) $^\circ$ 까지이며 평균값은 108.0 $^\circ$ 이다.

Benzotriazole기에 속해있는 9개의 원자는 모두 0.05 \AA 사이에서 동일 평면을 구성하고 있으며 이들 중 N(2)는 best plane으로부터 0.025(2) \AA 떨어져 있다. C(10)은 benzotriazole기의 best plane 으로부터 0.048(3) \AA 떨어져 있으므로 동일 평면상에 존재함을 알 수 있다. aniline기의 benzene에 속해 있는 6개의 원자 모두 0.021 \AA 사이의 동일 평면상에

Table. 6 Bonding distances between C of aromatic ring and N of Nitro group

ϕ -NO ₂	N $\begin{matrix} \text{O}_1 \\ \text{O}_2 \end{matrix}$	
1.446(8)	1.229(8)	Ref(12)
	1.222(8)	
1.434(8)	1.216(8)	
	1.217(8)	
1.472(9)	1.241(7)	Ref(13)
	1.236(6)	
1.450(9)	1.220(5)	Ref(14)
	1.217(4)	
1.461(2)	1.213(2)	Ref(15)
	1.227(2)	
1.468(1)	1.225(0)	Ref(16)
	1.217(1)	
1.436(4)	1.230(4)	Ref(17)
	1.242(4)	
mean	mean	
1.45(5)	1.225(5)	
1.453(2)	1.220(2)	This Exp.
	1.223(2)	

Bonding distances between C of aromatic ring and N of amino group

ϕ -NH	
1.351(4)	Ref(17)
1.355(4)	Ref(18)
mean	
1.353(4)	
1.369(2)	This Exp.

Bonding distances between C and N of triazole

	Ref(19)	This Exp.
C-C	1.375(5)	1.389(2)
C-N	1.366(4)	1.374(2)
	1.339(4)	1.363(2)
N-N	1.307(4)	1.306(2)
	1.358(4)	1.347(2)

Table 7 Torsion angles for BBN

C(8)-N(1)-N(2)-N(3)	1.1(1)	C(10)-N(1)-N(2)-N(3)	-178.4(2)
N(2)-N(1)-C(8)-C(7)	176.6(2)	N(2)-N(1)-C(8)-C(9)	-1.3(1)
C(10)-N(1)-C(8)-C(7)	-4.1(2)	C(10)-N(1)-C(8)-C(9)	178.0(2)
N(2)-N(1)-C(10)-N(11)	-136.1(2)	N(2)-N(1)-C(10)-C(21)	106.6(2)
C(8)-N(1)-C(10)-N(11)	44.6(2)	C(8)-N(1)-C(10)-C(21)	-78.7(2)
N(1)-N(2)-N(3)-C(9)	-3(1)	N(2)-N(3)-C(9)-C(4)	-178.4(3)
N(2)-N(3)-C(9)-C(8)	-6(1)	C(9)-C(4)-C(5)-C(6)	.5(2)
C(5)-C(4)-C(9)-N(3)	176.6(3)	C(5)-C(4)-C(9)-C(8)	-1.1(2)
C(4)-C(5)-C(6)-C(7)	.3(2)	C(5)-C(6)-C(7)-C(8)	-4(2)
C(6)-C(7)-C(8)-N(1)	-177.9(3)	C(6)-C(7)-C(8)-C(9)	-3(2)
N(1)-C(8)-C(9)-N(3)	1.1(1)	N(1)-C(8)-C(9)-C(4)	179.3(2)
C(7)-C(8)-C(9)-N(3)	-177.1(2)	C(7)-C(8)-C(9)-C(4)	1.0(2)
N(1)-C(10)-N(11)-C(12)	63.9(2)	C(21)-C(10)-N(11)-C(12)	-172.0(2)
N(1)-C(10)-C(21)-C(22)	-62.9(2)	N(11)-C(10)-C(21)-C(22)	174.0(2)
C(10)-N(11)-C(12)-C(13)	10.3(1)	C(10)-N(11)-C(12)-C(17)	-171.1(2)
N(11)-C(12)-C(13)-C(14)	176.6(2)	C(17)-C(12)-C(13)-C(14)	-2.0(2)
N(11)-C(12)-C(17)-C(16)	-176.2(3)	C(13)-C(12)-C(17)-C(16)	2.4(2)
C(12)-C(13)-C(14)-C(15)	.6(2)	C(13)-C(14)-C(15)-C(16)	.5(2)
C(13)-C(14)-C(15)-N(18)	-178.2(3)	C(14)-C(15)-C(16)-C(17)	-1.1(2)
N(18)-C(15)-C(16)-C(17)	178.6(3)	C(14)-C(15)-N(18)-O(19)	-14.1(2)
C(14)-C(15)-N(18)-O(20)	165.4(3)	C(16)-C(15)-N(18)-O(19)	167.1(3)
C(16)-C(15)-N(18)-O(20)	-13.3(2)	C(15)-C(16)-C(17)-C(12)	-1.4(2)
C(10)-C(21)-C(22)-C(23)	-175.5(2)		

위치해 있다. 이들중 C(12)는 best plane으로부터 0.012(1)Å 떨어져 있다. Aniline기의 benzene고리의 최인접 원자인 N(11)과 N(18)은 best plane으로부터 각각 0.078(2)Å, 0.047(3)Å 떨어져 있으므로 이들은 모두 같은 평면상에 존재함을 알 수 있다. benzotriazole기의 평면과 aniline기의 benzene 평면사이의 이면각(dihedral angle)은 86.8(5)° 이다. aniline기의 benzene평면과 nitro기 평면은 C(15)와 N(18)축에 대하여 비틀림각이(torsion angle) 13.97(8)° 이다. BBN과 관련된 비틀림각들을 Table.7에 요약하였다.

BBN은 N(3)와 N(11) 사이에 (1.5-X, 0.5+Y, 0.5-Z)의 대칭으로 한개의 수소 결합, N(11)-H11(N11)...N(3) 사이의 각도는 164.1(15)° 이었으며, N(11)과 N(3)과의 거리는 3.136(2)Å 이고, H(11)과 N(3)거리는 2.300(11)Å 이다. 분자간 수소결합은 Fig.2에 실선으로 표시하였다.

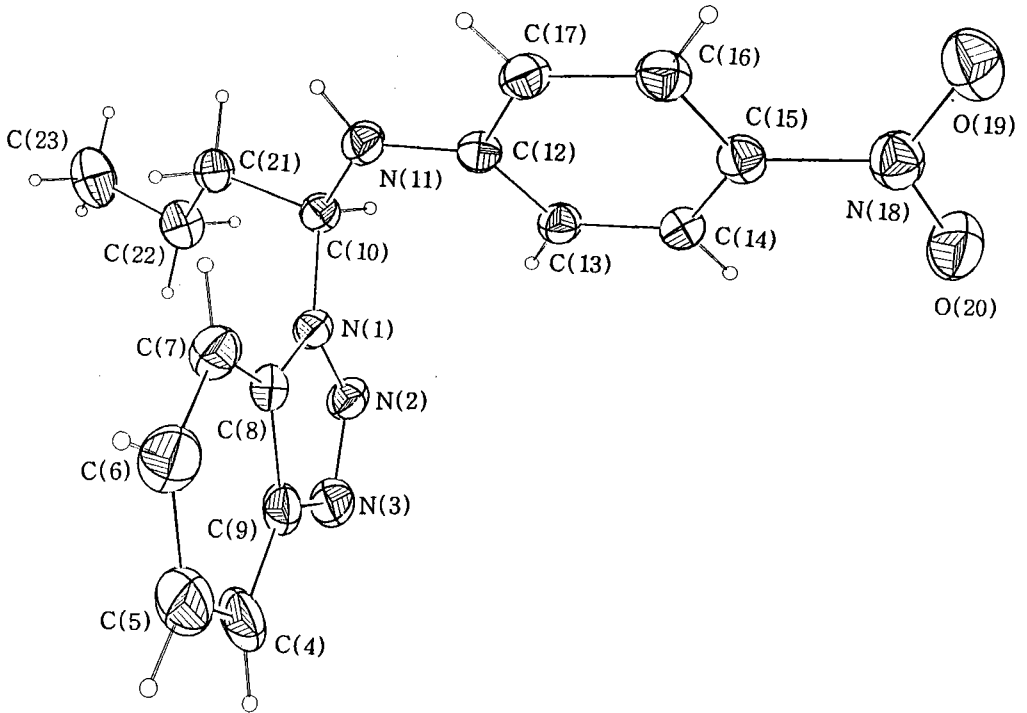


Fig. 1 A view of BBN molecule showing the atomic numbering and 50% thermal ellipsoid.

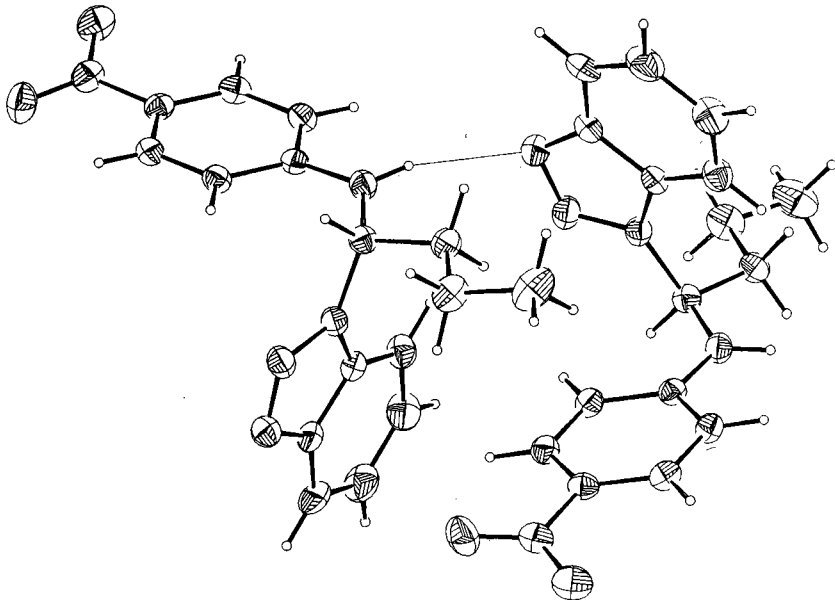


Fig. 2 The hydrogen bond between two molecules.

참고 문헌

1. A. R. KatriAzky, Hand book of Heterocyclic Chemistry, Pergamon Press (1985).
2. Sung, N. D., Park, C. K. ad Kwon, K. S. : *J. Korean Chem. Soc.*, 37:1060-7 (1993).
3. Sung, N. D., Kim, K. H., : *J. Korean Agri. Chem. Soc.*, 35: 14-22 (1992).
4. Sung, N. D., Lim, C. W., *ibid.*, 33, 231-8 (1990).
5. Sung, N. D., Kwon, K. S., *Korean Material Papent Pending* (Feb. 14. 1994).
6. Sung, N. D., Park, H. J., *ibid.*, 34, 287-294 (1991).
7. A. R. KatriAzky, *J. Chem. Soc. Perkin Trcms. I.*, 2673-7 (1987).
8. Debaerdemaeker. T., Germain. G., Main. P., Tate, C., and Woolfson, M. M., MULTAN87. Computer Programs For The Automatic solution of Crystal Structures From X-ray Diffraction Data. (1987).
9. Sheldrick, G. M., "SHELXL93", program for crystal structure determination, Univ. of Cambridge, England. (1993).
10. Shin, W., GEOM, Seoul National University, KOREA(1978).
11. Johnson, C. K., ORTEP. Report ORNL-3794. Oak Ridge National Laboratory. Tennessee, U.S.A.(1975).
12. Garcia, M. S., Toscano, R. A., Martinez, J. G., Salmeron, U. A., and Lezama, R. R., *Acta Cryst.* C45, 1442 (1989).
13. Nalini, V., and Desiraju, R. G., *Acta Cryst.* C45, 1528 (1989).
14. Punte, G., Rivero, B. E., Socolovsky, S. E., and Nudelman, N. S., *Acta Cryst.* C45, 1952 (1989).
15. Jackisch, M. A., Fronczek, F. R., and Butler, L. G., *Acta Cryst.* C45, 2016 (1989).
16. Fronczek, F. R., Parodi, F. J., and Hsieh, C. Y. T., and chang, B. Y., *Acta Cryst.* C45, 2027 (1989).
17. Kaida, S., Wakita, K., Shnoda, N., Miki, K., and kasai, N., *Acta Cryst.* C45, 2025 (1989).
18. Bott S. G., Ahn K-H., Lippard S. J., *Acta Cryst.* C45, 1738 (1989).
19. Singh P., Hodgson D. J., *Acta Cryst.* C45, 1586 (1989).