

بررسی واکنش  $\text{phCONHPOCl}_2$  با مشتقات بنزیل آمین، تهیه،  
ویژگیهای طیفی و بررسی ساختار  
 $\text{phCONHPO}[\text{N}(\text{CH}_3)(\text{CH}_2\text{ph})]_2$

نویسنده (گان): خدایار قلیوند\*، مهرداد پورایوبی، حسین مستعان زاده

آدرس: تهران، دانشگاه تربیت مدرس، بخش شیمی، صندوق پستی: ۱۴۱۱۵-۱۷۵

چکیده:

واکنش  $\text{phCONHPOCl}_2$  با بنزیل آمین، ۲-کلروبنزیل آمین، N-متیل بنزیل آمین،  $\alpha$ -متیل بنزیل آمین، اتیل بنزیل آمین و ۲-آمینو بنزیل آمین منجر به تشکیل N-بنزونیل فسفریک تری آمیدهای مربوطه می گردد که محصولات به دست آمده توسط تکنیکهای طیف سنجی مورد تایید قرار گرفتند و ساختار یکی از ترکیبات با فرمول  $\text{phCONHPO}[\text{N}(\text{CH}_3)(\text{CH}_2\text{ph})]_2$  توسط پرتو ایکس مورد مطالعه قرار گرفت. این مولکول در سیستم تری کلینیک متبلور می گردد با گروه فضایی  $P\bar{1}$  با  $a = 9.832(4) \text{ \AA}$ ،  $b = 10.949(4) \text{ \AA}$ ،  $c = 11.621(5) \text{ \AA}$ ،  $\beta = 100.51(3)^\circ$ ،  $\alpha = 91.99^\circ$  و  $\gamma = 115.35(3)^\circ$  در هر سلول واحد.

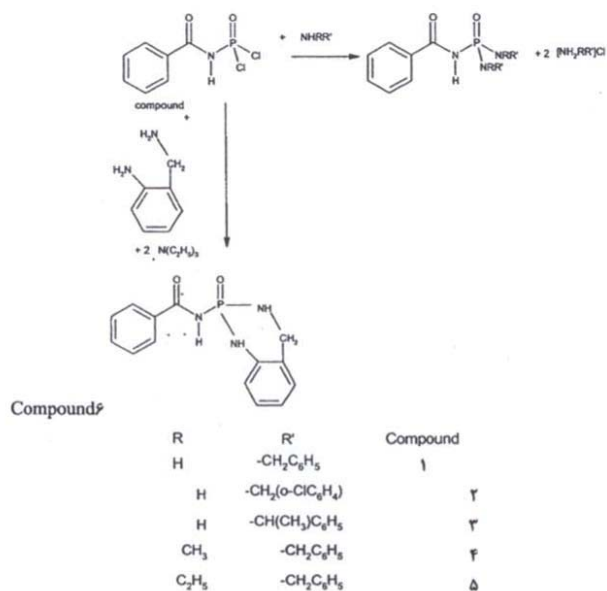
مقدمه:

آمیدها و استرهای اسید فسفریک به دلیل امکان مهار کنندگی آنزیم استیل کولین استراز مورد توجه شیمیدانان و بیوشیمیدانان قرار گرفته اند. این ترکیبات عمدتاً از واکنش جانشینی ترکیبات الکلی، فنلی، آمینها و آمیدها بر روی ترکیبات هالوژن-فسفره حاصل می گردند، به کار گیری آمیدها در واکنش با ترکیبات فسفر با ظرفیت ۵ منجر به تشکیل ترکیباتی از خانواده کربونیل فسفر آمیدها می گردد که این ترکیبات قابلیت انجام عمل مهار کنندگی را بر روی آنزیمهای اوره آز و استراز خواهند داشت. از آنجاییکه یکی از عوامل مؤثر در سمیت یک ترکیب ویژگیهای ساختاری و فضایی آن ترکیب می باشد، بررسی ساختاری چنین ترکیباتی توسط پرتو ایکس می تواند به درک دلایل سمیت یک ترکیب کمک قابل ملاحظه ای کند.

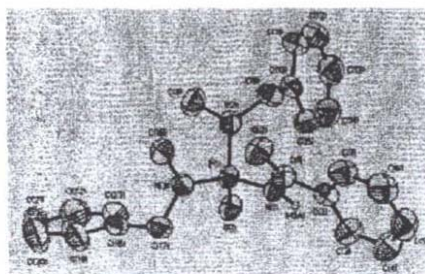
بحث و نتیجه گیری:

سننژ: ۱۰ میلی مول از مشتق بنزیل آمین به محلولی از ۲/۵ میلی مول  $\text{phCONHPOCl}_2$  در حلال کلروفرم افزوده شده و به مدت ۴ ساعت در دمای صفر درجه به هم زده می شود. پس از اتمام واکنش حلال را توسط خلاء کشیده و محصول توسط آب شسته می شود و سپس در مخلوط کلروفرم و هپتان تبلور مجدد می گردد. همه مشتقات تهیه شده در این پژوهش به روش گفته شده در بالا به دست می آیند تنها مشتق حلقوی حاصل از ۲-آمینو بنزیل آمین در حلال استون نیتریل و با استفاده از ماده جاذب HCl تری اتیل آمین حاصل شد. محصولات تهیه شده در این پژوهش و روش تهیه آنها در شکل ۱ نشان داده شده اند. ترکیبات تهیه شده توسط تکنیکهای طیف سنجی  $^1\text{H}$ ،  $^{13}\text{C}$ ،  $^{31}\text{P}$  NMR و IR شناسایی شده و فرمولهای پیشنهادی توسط آنالیز عنصری مورد تایید قرار گرفت.

تک بلور ترکیب ۴ از تبخیر آرام محلول شامل کلروفرم و هپتان نرمال حاصل شد. ساختار این مولکول در شکل ۲ و بعضی از داده های ساختاری آن در جدول ۱ و تعدادی از فواصل پیوندی در جدول ۲ و تعدادی از زوایای پیوندی در جدول ۳ آورده شده است.



شکل ۱- مولکولهای تهیه شده در این پژوهش.



شکل ۲- ساختار مولکولی  $C_6H_5CONHPO[N(CH_3)(CH_2C_6H_5)]$

جدول ۱- تعدادی از داده های کریستالوگرافی برای ترکیب ۴.

فرمول تجربی	$C_{22}H_{26}N_3O_2P$
وزن فرمولی	۴۰۷/۴۴
طول موج	۰/۷۱۰۷۳ Å
سیستم بلوری	تری کلینیک
گروه فضایی	$P \bar{1}$
ابعاد سلول	$a = 9/832(4) \text{ \AA}$ $b = 10/949(4) \text{ \AA}$ $c = 11/621(5) \text{ \AA}$ $\alpha = 91/99(3)^\circ$ $\beta = 100/51(3)^\circ$ $\gamma = 115/35(3)^\circ$
$\bar{a} \bar{1} \bar{1}$	$\text{Å}^3 110.25(8)$
Z	۲
دانشیه (محاسبه شده)	$1/326 \text{ Mg.m}^{-3}$

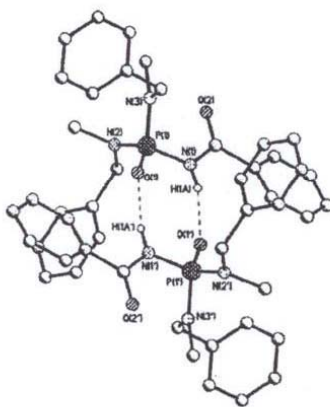
جدول ۲- تعدادی از فواصل پیوندی (بر حسب آنگستروم) در ترکیب ۴.

P(1)-N(1)	۱/۶۷۸(۳)	P(1)-(O1)	۱/۲۷۶(۳)
P(1)-N(2)	۱/۶۳۱(۳)	N(2)-C(8)	۱/۲۴۹(۴)
P(1)-N(3)	۱/۶۳۱(۳)	N(3)-C(16)	۱/۲۵۱(۳)
O(2)-C(1)	۱/۲۱۲(۳)	N(2)-C(9)	۱/۲۶۰(۴)

جدول ۳- تعدادی از زوایای پیوندی در ترکیب ۴.

O(1)-P(1)-N(1)	105.43(11)	C(1)-N(1)-P(1)	127.26(19)
O(1)-P(1)-N(2)	118.22(13)	C(8)-N(2)-C(9)	113.3(3)
O(1)-P(1)-N(3)	109.62(12)	C(8)-N(2)-P(1)	118.4(2)
N(2)-P(1)-N(3)	104.66(13)	C(16)-N(3)-C(17)	115.0(2)
N(2)-P(1)-N(1)	106.05(13)	C(16)-N(3)-P(1)	125.5(2)
N(3)-P(1)-N(1)	113.05(13)	O(2)-C(1)-N(1)	121.7(3)

در ترکیب تهیه شده گروههای فسفوریل و کربونیل آنتی بوده و پیوند هیدروژنی بین PO از مولکول و NH آمیدی مولکول مجاور باعث به وجود آمدن دایمر مرکز متقارن می گردد، شکل ۳.



شکل ۳- دایمر مرکز متقارن از مولکول ۴ به وجود آمده توسط پیوند هیدروژنی.

مراجع:

- [1] Bioorg & Medicinal Chem. Lett., 2001, 11, pp. 2433 – 2435.
- [2] Yu. G. Gololobov and et. al., Tetrahedron, 1981, 33, pp. 437 – 472.
- [3] L. Morris and J. V. Pustinger, J. of Physical Chemistry, 1964, 68, pp. 152 – 158.
- [4] J. P. Harger, J. Chem. Soc., Perkin Trans., 2001, 2, pp. 41 – 47.
- [5] Ch. Guo Zhan and et. al., J. Am. Chem. Soc., 2001, 123, pp. 2835 – 2838.
- [6] S. P. Ghosh and et. al. J. Indian Chem. Soc., 1977, LIV, pp. 230 – 238.
- [7] R. Holmes and et. al., Inorganic Chemistry, 2002, 41, pp. 1645 – 1651.