

К ВОПРОСУ О СТРОЕНИИ ДИАЦИЛПРОИЗВОДНЫХ БЕНЗИЛМОЧЕВИНЫ

Н. С. ДОБЫЧИНА.

(Представлена научно-методическим семинаром ХТФ)

Ранее нами [1] при ацилировании бензилмочевины замещенными бензойными кислотами, содержащими заместитель в пара-положении, были получены диацилпроизводные. Представлялось интересным выяснить, к которой из амидных группировок (замещенной ацилом или алкилом) становится второй ацильный радикал.

В предыдущих исследованиях нами [2] при помощи расчета методом МО ЛКАО и встречного синтеза было установлено, что при ацилировании алкилмочевины кислотами жирного ряда получаются N, N'-алкилацилпроизводные мочевины, т. е. ацилирование происходит по незамещенной амидной группировке. Аналогия в структуре ацилпроизводных алкилмочевин сохраняется при ацилировании последних бензойной кислотой и гетероциклическими кислотами. Однако при ацилировании бензилмочевины пара-замещенными бензойными кислотами возникает отклонение от указанной аналогии.

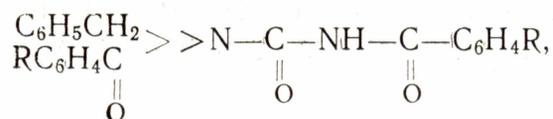
Для выяснения структуры полученных нами диацилпроизводных бензилмочевины были сняты инфракрасные и ПМР-спектры. Интерпретация ИК-спектров не дает соответствующей информации о строении полученных соединений. Спектры ПМР ди-(*n*-хлорбензоил) и ди-(*n*-нитробензоил)—бензилмочевин сняты в диметилсульфоксиде и хлороформе на приборе с рабочей частотой 60 Мгц, с использованием в качестве эталона гексаметилдисилоксана.

Величины химических сдвигов приведены в миллионных долях (*м. д.*) относительно тетраметилсилана (δ -шкала). Сигналы образцов прописываются четко, причем интегральная интенсивность их соответствует количеству протонов. Так, в области 9,25 *м. д.* и 9,17 *м. д.* прописывается протон группы NH с интенсивностью, равной 1. Судить о характере заместителей в данном случае представляется возможным только по характеру химического сдвига.

Поскольку в литературе сведений о ПМР-спектрах производных мочевины очень мало, а для исследуемых соединений спектры снимаются впервые, то о химическом сдвиге приходится судить по спектрам соединений, содержащим протоны в аналогичном химическом окружении. Так, например, в N-толилсульфонил — N'-бутилмочевине протон, принадлежащий NH-группе, связанной с алкильным радикалом, прописывается в области 6,53 *м. д.* [3] или, например, в β -фенилэтилацетамиде амидный протон прописывается в области 6,50 *м. д.* [4]. В то же время для ациламидов, не связанных с алкильными радикалами, на-

пример, в фенилациламидах, протон амидной группы прописывается в более слабом поле — от 7,5 до 9,5 м. д. [4].

Исходя из приведенных литературных данных, можно полагать, что в исследуемых соединениях (пик протона NH — группы прописывается в области 9—9,25 м. д.) протон принадлежит NH-группе, не связанной с алкильным радикалом. Вероятно, что ацильная группировка входит вместо атома водорода к амидной группе, связанной с бензильным радикалом, тогда как вторая амидная группа, содержащая протон, связана со второй ацильной группой. Таким образом, более вероятно следующая структура диацилпроизводных:



где R = Cl, Br, NO₂ и находится в пара-положении.

Выводы

На основании интерпретации спектров ПМР предполагается структура диацилпроизводных бензилмочевины.

ЛИТЕРАТУРА

1. Н. С. Добычина, А. Г. Печенкин, С. Г. Вешнурцева. Изв. ТПИ (в печати).
2. Н. С. Добычина. Диссертация, Томск, 1966.
3. Varian analytical instrument division high resolution NMR spectra catalog, volume 2.
4. Л. А. Казицына, Н. Б. Куллетская. Применение УФ, ИК и ЯМР спектроскопии в органической химии, «Химия», 1970.