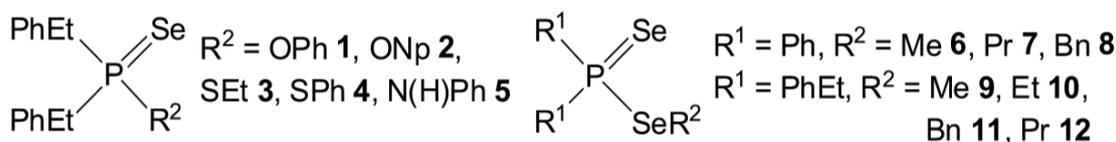


КОНФОРМАЦИОННЫЙ АНАЛИЗ ФОСФОРОРГАНИЧЕСКИХ
СОЕДИНЕНИЙ СО СВЯЗЯМИ P=SE И P-SE В РАСТВОРЕ.
ЭКСПЕРИМЕНТ И ТЕОРИЯВерещагина Я.А.,^а Исмагилова Р.Р.,^а Чачков Д.В.,^б Малышева С.Ф.,^в Белогорлова Н.А.^в^аХимический институт им. А.М. Бутлерова, Казанский федеральный университет,
420008, Казань, ул. Кремлевская, 18,
e-mail: yavereshchagina@gmail.com^бКазанское отделение Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН – филиал ФГУ
«ФНЦ Научно-исследовательский институт системных исследований РАН»,
420111, Казань, ул. Лобачевского, 2/31^вИркутский институт химии имени А.Е. Фаворского СО Российской академии наук,
664033, Иркутск, ул. Фаворского, 1

Производные селено- и диселенофосфиновых кислот используются в качестве лигандов, прекурсоров наноматериалов и фармпрепаратов, экстрагентов тяжелых металлов, строительных блоков в синтезе.¹

Экспериментальный и теоретический конформационный анализ селенофосфинатов 1-5 и диселенофосфинатов 6-12 осуществлен методами дипольных моментов, ИК спектроскопии и квантово-химических расчетов DFT в газовой фазе и в растворе бензола (B3PW91/6-311++G(df,p)+CPCM).



Сопоставление экспериментальных данных (дипольные моменты, ИК спектры) и теоретических результатов для возможных конформеров 1-12 свидетельствует, что в растворе эти фосфинаты существуют в виде конформационного равновесия нескольких форм с заторможенной *гош*- и *транс*- или заслоненной *цис*-ориентацией заместителей, расположенных в виде пропеллера, относительно связи P=Se. В предпочтительных конформерах наличие *цис*-ориентаций обусловлено образованием внутримолекулярных связей H...Se с участием одного из атомов водорода тиоэтильного (3), Se-алкильных(бензильных) или фенильных (6-12) заместителей у атома фосфора и атома селена группы P=Se. Для 1-12 экспериментальные и теоретические данные хорошо согласуются. Модель CPCM, учитывающая влияние бензола, является наилучшим выбором для расчета теоретической полярности замещенных диселенофосфинатов 6-12.

Литература

1. Artem'ev A.V., Chernysheva N.A., Gusarova N.K., Malysheva S.F., Yas'ko S.V., Albanov A.I., Trofimov B.A. Synthesis, 2011, 1309.