

БЛОХИН Ю. И., КОРНИЛОВ К. Н., АБРАМОВ И. А., БАГАУТДИНОВ А. М.,
ЛЮБИМОВ И. А.

**СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ
МАКРОЦИКЛИЧЕСКОГО АРЕНОВОГО ФЕНИЛФОСФОНИТА И ДАННЫХ ЕГО
РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА**

Аннотация. Проведён сравнительный анализ данных рентгеноструктурного анализа и результатов компьютерного геометрического моделирования самого первого из известных науке макроциклических ареновых фенилфосфонитов.

Ключевые слова: макроциклы; фенилфосфониты; геометрическая модель; рентгеноструктурный анализ.

**BLOKHIN YU. I., KORNILOV K. N., ABRAMOV I. A., BAGAUTDINOV A. M.,
LUBIMOV I. A.**

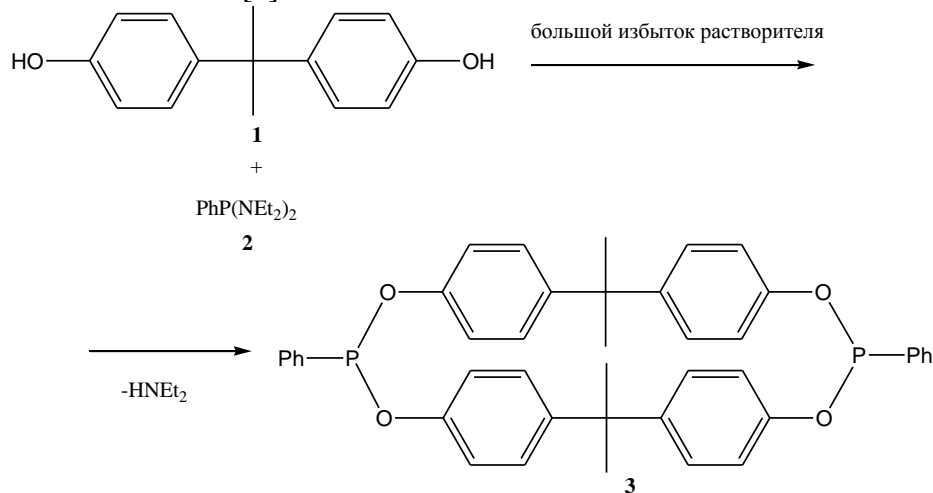
**COMPARATIVE ANALYSIS OF MACROCYCLIC ARENE
PHENYLPHOSPHONITE'S GEOMETRIC MODEL AND IT'S X-RAY ANALYZES
DATA**

Abstract. Have been made a comparative analysis of X-ray data and the results of computer geometric modeling of the first known macrocyclic arene phenylphosphonite.

Keywords: macrocycles; phenylphosphonites; geometrical model; X-ray analyzes.

Известно, что фосфорареновые краун-эфиры, содержащие в своей структуре внутреннюю полость и атомы трехвалентного фосфора с неподелённой электронной парой, способны образовывать с разными металлами супрамолекулярные системы типа «гость-хозяин» [1].

К настоящему моменту уже синтезирован ряд подобных краун-эфиров, например, на основе 2,2-ди(*n*-гидроксифенил)пропана (ДИАНа или Бисфенола А) **1** и тетраэтилдиамида фенилфосфонистой кислоты **2** [2]:



С целью исследования структуры соединения **3** нами проведено математическое моделирование его пространственного строения с помощью программы Chem3D Ultra Version 9.0.

Ранее уже было проведено исследование этого макроцикла рентгеноструктурным анализом (РСА) [3]. В результате этого исследования установлено, что атомы Р(III) в молекуле соединения **3** относительно средней плоскости располагаются в транс-положении (рис.1). При этом длина связей С-О увеличилась с 1.384 Å у исходного Бисфенола А до 1.395 Å в макроцикле. Расстояние между атомами фосфора равно 10.344 Å, между центрами бензольных колец (расположившихся друг напротив друга) - 5.370 Å.

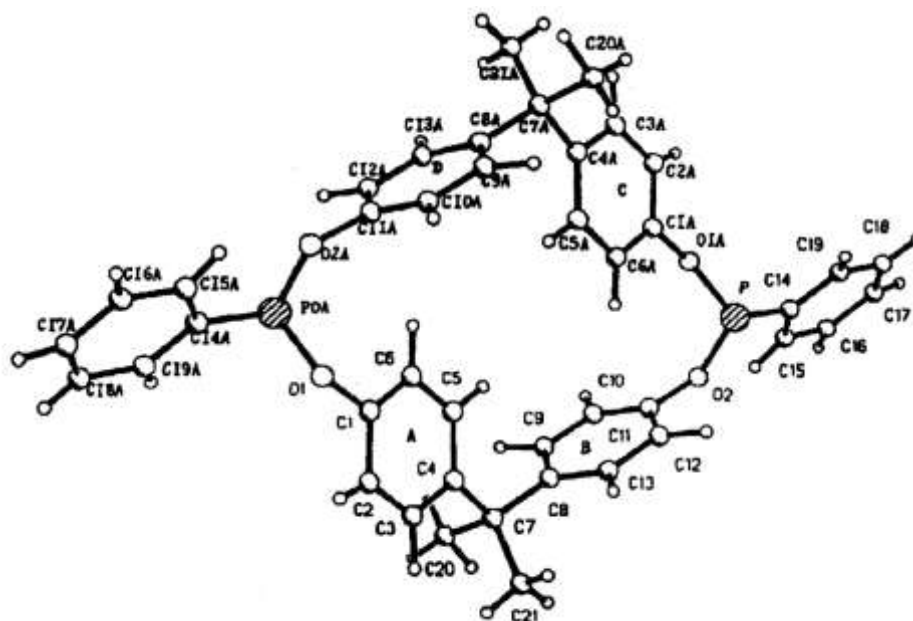


Рис. 1. Молекулярная структура макроцикла **3** согласно данным РСА
 В начале нашей работы нами был смоделирован макроцикл **3** (рис. 2).

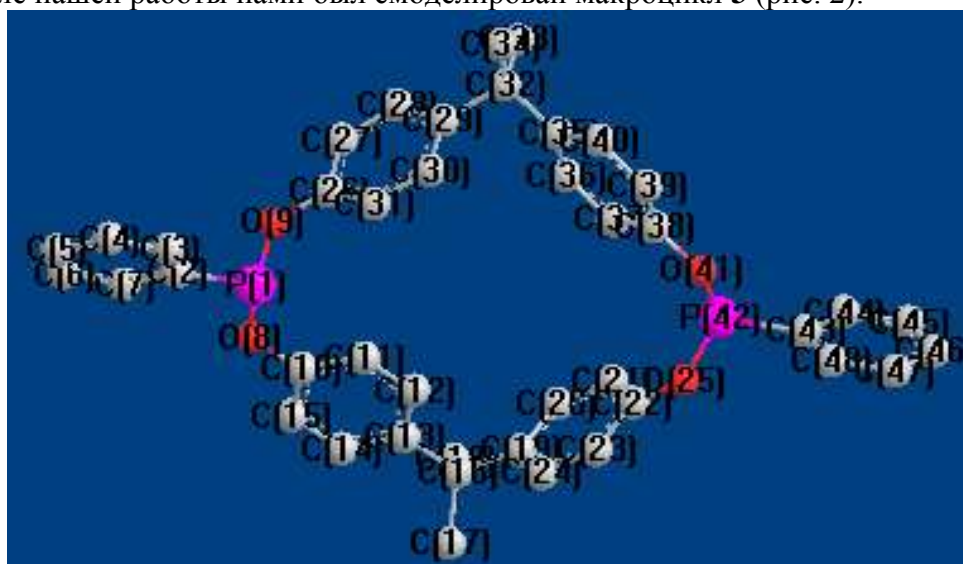


Рис. 2. Компьютерная модель пространственного строения макроцикла **3**

Согласно компьютерному расчету длина связей С-О равна 1.371 Å. В реальности эта длина составляет 1.395 Å (данные РСА [3]). Таким образом, программа по данному параметру даёт погрешность всего в 2%. Расстояние между атомами Р (III) составило 10.078 Å (по данным РСА – 10.344 Å), т.е. погрешность программы 3%. Центры бензольных колец, действительно, расположились напротив друг друга, и видно, что рисунки 1 и 2 очень похожи друг на друга. Кратчайшее расстояние между бензольными кольцами (между атомами С₁₂ и С₃₆) по расчётам составляет 5.650 Å (по данным РСА – 5.370 Å), погрешность 5%.

На основании проведённых расчётов нами составлена сводная таблица данных.

Таблица. Геометрические параметры макроцикла **3** согласно данным РСА и компьютерного моделирования

Длины связей	Данные РСА	С-О	Р-Р	Ar-Ar	Дополнительная информация
		1.395	10.344	5.370	

	Расчетные данные	1.371, погрешность 2%	10.078, погрешность 3%	5.650, погрешность 5%	Компьютерная модель полностью подтверждает данные РСА
--	------------------	-----------------------	------------------------	-----------------------	---

В результате проведенного нами геометрического моделирования структуры **3** макроциклического аренового фенилфосфонита можно сделать вывод, что использованная программа Chem3D Ultra Version 9.0 вполне пригодна для предположения реального строения подобных макроциклических систем, т.к. её данные соответствуют результатам рентгеноструктурного анализа.

Список литературы

1. Yu.I. Blokhin, K.N. Kornilov, Yu.V. Osipova, A.M. Bagautdinov, M.V. Tabardak, I.A. Lubimov. Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements. 2013. V.188. №11. p.1478-1496.
2. Нифантьев Э.Е., Блохин Ю.И., Эргашов М.Я. Докл.АН. 1992. №1.С.73-76.
3. Blokhin Yu.I., Gusev D.V., Belsky V.K., Stash A.I., Nifantsev E.E. Phosphorus, Sulfur, and Silicon. 1995. V.102. №1-4. p.143-154.

ДАнные ОБ АВТОРАХ

Блохин Юрий Иванович заведующий кафедрой Органической, физической и коллоидной химии, доктор химических наук, профессор. Московский государственный университет технологий и управления им. К. Г. Разумовского, ул. Земляной вал, д.73, г. Москва, 109004, Россия. E-mail: orgchem@mgutm.ru

Корнилов Кирилл Николаевич доцент кафедры Органической, физической и коллоидной химии, кандидат химических наук. Московский государственный университет технологий и управления им. К. Г. Разумовского, ул. Земляной вал, д.73, г. Москва, 109004, Россия. E-mail: strazhnik-1@mail.ru

Абрамов Иван Анатольевич заведующий лабораторией кафедры Органической, физической и коллоидной химии, аспирант. Московский государственный университет технологий и управления им. К. Г. Разумовского, ул. Земляной вал, д.73, г. Москва, 109004, Россия. E-mail: orgchem@mgutm.ru

Багаудинов Алмаз Мирхатович учебный мастер кафедры Органической, физической и коллоидной химии, аспирант. Московский государственный университет технологий и управления им. К. Г. Разумовского, ул. Земляной вал, д.73, г. Москва, 109004, Россия. E-mail: orgchem@mgutm.ru

Любимов Иван Анатольевич инженер кафедры Органической, физической и коллоидной химии, аспирант. Московский государственный университет технологий и управления им. К. Г. Разумовского, ул. Земляной вал, д.73, г. Москва, 109004, Россия. E-mail: orgchem@mgutm.ru