

## Polarity and structure of derivatives of bis(2-phenylethyl)selenophosphinic acid

Vereshchagina Y., Khanafieva R., Chachkov D., Ishmaeva E., Malysheva S., Gusarova N., Trofimov B.

Kazan Federal University, 420008, Kremlevskaya 18, Kazan, Russia

---

### Abstract

© 2017 IUPAC & De Gruyter. Conformational analysis of derivatives of bis(2-phenylethyl)selenophosphinic acid was carried out by the method of dipole moments and density functional theory calculations. The conformations of the examined compounds fit into the overall conformational picture for the PIV compounds: These derivatives exist as conformational equilibrium of non-eclipsed gauche and trans forms with propeller arrangement of the substituents relative to the P=Se bond. We stipulate that the eclipsed cis orientation of substituent may be caused by the formation of H-contact.

<http://dx.doi.org/10.1515/pac-2016-0802>

---

### Keywords

conformational analysis, DFT calculations, dipole moments, ICPC-21, phosphine selenides, phosphinoselenoates

### References

- [1] S. Vassiliou, P. Kosikowska, A. Grabowiecka, A. Yiotakis, P. Kafarski, L. Berlicki. *J. Med. Chem.* 53, 5597 (2010).
- [2] F.-R. Alexandre, A. Amador, S. Bot, C. Caillet, T. Convard, J. Jakubik, C. Musiu, B. Poddesu, L. Vargiu, M. Liuzzi, A. Roland, M. Seifer, D. Standring, R. Storer, C. B. Dousson. *J. Med. Chem.* 54, 392 (2011).
- [3] A. Bhattacharyya, T. K. Ghanty, P. K. Mohapatra, V. K. Manchanda. *Inorg. Chem.* 50, 3913 (2011).
- [4] S. Pikul, K. L. M. Dunham, N. G. Almstead, B. De, M. G. Natchus, M. V. Anastasio, S. J. McPhail, C. E. Snider, Y. O. Taiwo, L. Chen, C. M. Dunaway, F. Gu, G. E. Mieling. *J. Med. Chem.* 42, 87 (1999).
- [5] C. Li, R. Pattacini, P. Braunstein. *Inorg. Chim. Acta* 363, 4337 (2010).
- [6] D. V. Aleksanyan, V. A. Kozlov, Y. V. Nelyubina, K. A. Lyssenko, L. N. Puntus, ; E. I. Gutsul, N. E. Shepel, A. A. Vasilev, P. V. Petrovskii, I. L. Odinets. *Dalton Trans.* 40, 1535 (2011).
- [7] D. B. G. Williams, S. J. Evans, H. de Bod, M. S. Mokhadinyana, T. Hughes. *Synthesis* 3106 (2009).
- [8] B. A. Howell, K. E. Carter. *J. Therm. Anal. Calorim.* 102, 493 (2010).
- [9] K. S. Dunne, F. Bisaro, B. Odell, J.-M. Paris, V. Gouverneur. *J. Org. Chem.* 70, 10803 (2005).
- [10] J. S. Harvey, S. J. Malcolmson, K. S. Dunne, S. J. Meek, A. L. Thompson, R. R. Schrock, A. H. Hoveyda, V. Gouverneur. *Angew. Chem. Int.* 48, 762 (2009).
- [11] K. Lam, I. E. Marko. *Org. Lett.* 13, 406 (2011).
- [12] M. Piekutowska, Z. Pakulski. *Carbohydr. Res.* 343, 785 (2008).
- [13] A. Sato, H. Yorimitsu, K. Oshima. *Tetrahedron* 65, 1553 (2009).
- [14] X. Song, M. Bochmann. *Dalton Trans.* 2689 (1997).
- [15] N. K. Gusarova, P. A. Volkov, N. I. Ivanova, Yu. V. Gatilov, B. A. Trofimov. *Tetrahedron Lett.* 54, 3543 (2013).

- [16] N. K. Gusarova, P. A. Volkov, N. I. Ivanova, L. I. Larina, B. A. Trofimov. *Synthesis* 3723 (2011).
- [17] N. K. Gusarova, P. A. Volkov, N. I. Ivanova, L. I. Larina, B. A. Trofimov. *Tetrahedron Lett.* 52, 2367 (2011).
- [18] B. A. Trofimov, T. N. Rakhmatulina, N. K. Gusarova, S. F. Malysheva. *Russ. Chem. Rev.* 60, 1360 (1991).
- [19] N. K. Gusarova, L. Brandsma, S. N. Arbuzova, S. F. Malysheva, B. A. Trofimov. *Zh. Org. Khim.* 32, 269 (1996).
- [20] *Sovremennyyi organicheskiy sintez (Modern Organic Synthesis)*, D. L. Rakhmankulov (Ed.), pp. 160. Khimiya, Moscow (2003).
- [21] B. A. Trofimov, N. K. Gusarova, *Mendeleev Commun.* 19, 295 (2009).
- [22] N. K. Gusarova, S. N. Arbuzova, B. A. Trofimov. *Pure Appl. Chem.* 84, 439 (2012).
- [23] Y. A. Vereshchagina, A. E. Klimovitskii, E. A. Ishmaeva, A. Z. Alimova, S. F. Malysheva. *Russ. J. Org. Chem.* 48, 1003 (2012).
- [24] Y. A. Vereshchagina, D. V. Chachkov, A. Z. Alimova, E. A. Ishmaeva, S. F. Malysheva. *Russ. J. Org. Chem.* 48, 1320 (2012).
- [25] Y. A. Vereshchagina, D. V. Chachkov, A. Z. Alimova, S. F. Malysheva, N. K. Gusarova, E. A. Ishmaeva, B. A. Trofimov. *J. Mol. Struct.* 1076, 285 (2014).
- [26] S. F. Malysheva, N. A. Belogorlova, Y. A. Vereshchagina, A. Z. Alimova, E. A. Ishmaeva, D. V. Chachkov. *Russ. J. Gen. Chem.* 86, 590 (2016).
- [27] E. A. Ishmaeva, A. P. Timosheva, N. V. Timosheva, Ya. A. Vereshchagina. *Spravochnik po dipolnym momentam fosfororganicheskikh soedinenii (Handbook of dipole moments of organophosphorus compounds)*. Kazan University, Kazan (1998).
- [28] O. A. Osipov, V. I. Minkin, A. D. Garnovskii. *Spravochnik po dipolnym momentam (Dipole moments handbook)*. Vysshaya Shkola, Moscow (1971).
- [29] E. Arunan, G. R. Desiraju, R. A. Klein, J. Sadlej, S. Scheiner, I. Alkorta, D. C. Clary, R. H. Crabtree, J. J. Dannenberg, P. Hobza, H. G. Kjaergaard, A. C. Legon, B. Mennucci, D. J. Nesbitt. *Pure Appl. Chem.* 83, 1637 (2011).
- [30] G. C. Pimentel, A. L. McClellan. *The Hydrogen Bond*, pp. 21. WH Freeman, San Francisco (1960).
- [31] E. A. Guggenheim. *Trans. Faraday Soc.* 45, 714 (1949).
- [32] J. W. Smith. *Trans. Faraday Soc.* 46, 394 (1950).
- [33] M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H. P. Hratchian, A. F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J. A. Montgomery, Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J. M. Millam, M. Klene, J. E. Knox, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, V. G. Zakrzewski, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, S. Dapprich, A. D. Daniels, O. Farkas, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, J. Cioslowski, D. J. Fox. *Gaussian Inc., Wallingford, CT* (2009).
- [34] Y. A. Vereshchagina, E. A. Ishmaeva, V. V. Zverev. *Russ. Chem. Rev.* 74, 297 (2005).