

СИНТЕЗ, МОЛЕКУЛЯРНАЯ И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ТРИС[2-(КАРБАМОИЛМЕТОКСИ)ФЕНИЛ]-ФОСФИНОКСИДА

© 2020 г. Т. В. Баулина^a, И. Ю. Кудрявцев^{a,*}, А. В. Артемьев^b,
И. Ю. Багрянская^c, М. П. Пасечник^a, В. К. Брель^a

^a Институт элементоорганических соединений имени А. Н. Несмеянова Российской академии наук,
ул. Вавилова 28, Москва, 119991 Россия

^b Институт неорганической химии имени А. В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук,
Новосибирск, 630090 Россия

^c Новосибирский институт органической химии имени Н. Н. Ворожцова Сибирского отделения
Российской академии наук, Новосибирск, 630090 Россия

*e-mail: zaq@ineos.ac.ru

Поступило в Редакцию 17 июня 2020 г.

После доработки 17 июня 2020 г.

Принято к печати 30 июня 2020 г.

Синтезирован новый триподальный лиганд – трис[2-(карбамоилметокси)фенил]фосфиноксид алкилированием трис(2-гидроксифенил)фосфиноксида хлорацетамидом. Изучено его строение методами ИК, ЯМР ¹H, ³¹P спектроскопии и рентгеноструктурного анализа.

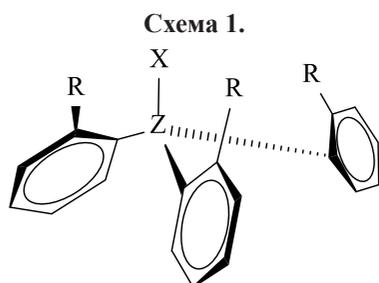
Ключевые слова: триподальный лиганд, трис[2-(карбамоилметокси)фенил]фосфиноксид, кристаллическая структура

DOI: 10.31857/S0044460X20100054

Триподальные лиганды – перспективная группа органических комплексообразователей, гибкая структура которых позволяет создавать соединения, способные связывать субстраты различных классов. Лиганды с карбамоильными группами в боковых цепях образуют прочные комплексы с солями *d*- и *f*-элементов и могут быть использованы в качестве экстрагентов для извлечения и разделения редких и ценных металлов, а также при переработке отработанного ядерного топлива [1–5]. Триподальные лиганды с функциональными протонодонорными группами могут образовывать комплексы с анионами [6–9]. Варьирование структуры триподальных лигандов открывает возможность получения ионофоров для ион-селективных электродов и оптических сенсоров ионов металлов [10–12]. Триподальные лиганды могут связывать нейтральные органические молекулы – карбо-

новые кислоты [13] и углеводы [14] и выступать в качестве сенсоров, рецепторов и искусственных ферментов.

В ряду триподальных ионофоров отличаются своеобразием так называемые пропеллерные лиганды на основе органических соединений пирамидальной структуры с тремя арильными заместителями с функциональными группами в боковой цепи. К ним относятся соединения на основе триарилметанов, триариламинов, триарилфосфинов и триарилфосфиноксидов. В наиболее устойчивой конформации молекулы этих соединений имеют геометрию несимметричного пропеллера, в которой заместители в *орто*-положениях бензольных колец ориентированы в одну сторону (схема 1). Такая геометрия позволяет синтезировать ионофоры, в которых координирующие атомы функциональных групп в боковых цепях сближены в простран-



стве и способны образовывать множество связей с гостевыми ионами и молекулами без существенной перестройки конформации лиганда [15–17].

В отличие от экстрагентов для гидрометаллургии, которые должны обладать значительной липофильностью и низкой растворимостью в воде, в ряде случаев желательнее, чтобы лиганды и их комплексы растворялись в воде. Такое требование предъявляется в технологических процессах, в которых вода используется как самый доступный и дешевый растворитель. Растворимость в воде — обязательное условие для лигандов и их комплексов, предназначенных для использования в физиологических жидкостях: лекарствах, средствах диагностики, контрастных реагентах и т.п. Водорастворимые лиганды и комплексы такого типа могут быть использованы для диагностики и терапии различных заболеваний. Кроме того, для биомедицинского применения желательнее, чтобы лиганды и комплексы имели нейтральный характер и не влияли существенно на pH растворов.

Нами синтезирован трис[2-(карбамоилметокси)фенил]фосфиноксид $(\text{NH}_2\text{COCH}_2\text{OC}_6\text{H}_4)_3\text{PO}$ **1** — перспективный водорастворимый триподальный лиганд для связывания катионов, анионов и органических молекул в водных растворах и биологических жидкостях, изучены его строение и свойства. Благодаря триподальной структуре с согласованной ориентацией функциональных групп,

фосфиноксид **1** потенциально может образовывать комплексы как с катионами, связываясь с ними группами $\text{P}=\text{O}$ и $\text{C}=\text{O}$, так и с анионами и органическими молекулами за счет водородных связей с группами NH_2 .

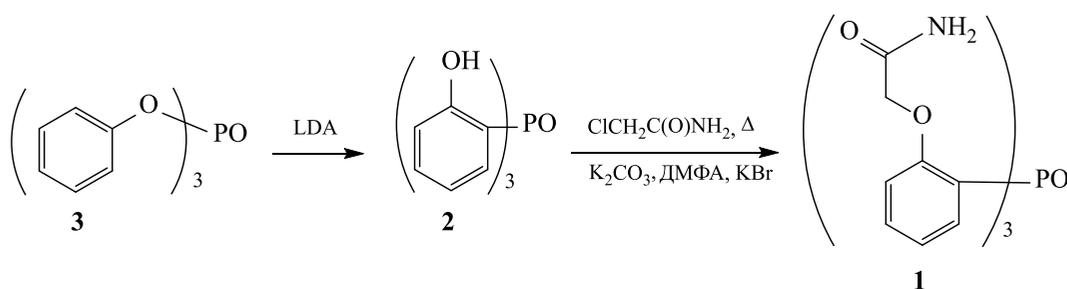
Соединение **1** получено из трис(2-гидроксифенил)фосфиноксида **2** и 2-хлорацетамида (схема 2).

Соединение **2** легко получается при действии металлирующего агента — диизопропиламида лития (LDA) на трифенилфосфат **3** [18]. Алкилирование фосфиноксида **2** 2-хлорацетамидом приводит к триподальному лиганду **1** с амидной функциональной группой в боковой цепи. В качестве промотора в реакции алкилирования использовали KBr . После обработки соединение **1** было выделено из реакционной смеси в виде кристаллогидрата с тремя молекулами воды (по данным элементного анализа). Соединение **1** заметно растворяется в воде, хорошо растворяется в полярных органических растворителях (EtOH , MeOH , ДМФА, ДМСО) и нерастворимо в неполярных растворителях (гексане, эфире, CH_2Cl_2 , CHCl_3).

Состав и строение соединения **1** подтверждено данными элементного анализа, ИК, ЯМР ^1H и $^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$ спектроскопии. Молекулярная структура была окончательно установлена рентгеноструктурным анализом.

Структура трис[2-(карбамоилметокси)фенил]фосфиноксида определена для тригидрата $(\text{NH}_2\text{COCH}_2\text{OC}_6\text{H}_4)_3\text{PO} \cdot 3\text{H}_2\text{O}$, который был получен кристаллизацией из водного раствора. Сольват кристаллизуется в пространственной группе $R\bar{3}$ с $1/3$ молекулы соединения **1** в асимметрической единице. Молекулы фосфиноксида **1** имеют структуру пропеллера (торсионные углы $\text{OPCC} \tau = 51.90^\circ$), группы $\text{OCH}_2\text{C}(\text{O})\text{NH}_2$ повернуты в сторону атомов кислорода O^1 группы $\text{P}=\text{O}$ (рис. 1).

Схема 2.



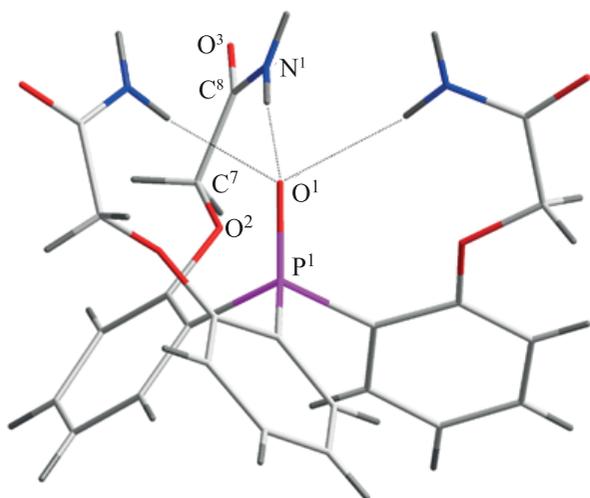


Рис. 1. Общий вид молекулы трис[2-(карбамоилметокси)фенил]фосфиноксида **1** в кристалле.

Три амидных водорода образуют внутримолекулярную трифуркатную (четырёхцентровую) водородную связь $N^1-H\cdots O^1$, в которой расстояния $H\cdots O^1$ и $N^1\cdots O^1$ $d = 2.398$ и 3.251 Å соответственно, а угол $N^1-H\cdots O^1$ равен 171.54° . Торсионные углы $O^2-C^7-C^8-N^1$ равны $-10.768(623)^\circ$. Связь $P=O$ (1.502 Å) длиннее, чем в аналогичных триарилфосфиноксидах без водородных связей (1.486 Å в молекуле соединения $[2-Bu_2NC(O)CH_2OC_6H_4]_3PO$ [1]), но примерно такая же, как в фосфиноксидах, в которых группа $P=O$ образует водородную связь { 1.502 Å в соединении $Ph_2P(O)CH_2CH_2CH(OH)Me$ [20], 1.503 $[2-HO(CH_2)_2OC_6H_4]_3PO$ [21], 1.513 Å $(HOCH_2CH_2CH_2)_3PO$ [22]}.

В кристалле молекулы соединения **1** ассоциированы друг с другом, а также с молекулами воды

сильными межмолекулярными водородными связями $N-H\cdots O$ и $O-H\cdots O$, так что каждая группа $C(O)NH_2$ образует пару межмолекулярных водородных связей $N^1-H\cdots O^3$ с амидной группой соседней молекулы, в 8-членном цикле с расстояниями $H\cdots O^3$ и $N^1\cdots O^3$ 2.071 и 2.923 Å соответственно. В каждой группе NH_2 один протон образует водородную связь $N^1-H\cdots O^1(P)$, а другой протон – более короткую связь $N^1-H\cdots O^3(C)$. Карбонильный кислород ассоциирован с молекулами воды сильными межмолекулярными водородными связями $O^1(W)-H\cdots O^3$ с расстояниями $O^1(W)\cdots O^3$ 2.780 Å. В результате образуется трехмерная супрамолекулярная сеть. На рис. 2 показаны межмолекулярные водородные связи между молекулами соединения **1** и H_2O .

В ИК спектре твердого фосфиноксида **1** полоса $\nu(PO)$ наблюдается при 1117 cm^{-1} , т. е. волновое число колебания связи $P=O$ заметно ниже, чем в триарилфосфиноксидах без водородных связей (1180 cm^{-1} в спектре $[2-Bu_2NC(O)CH_2OC_6H_4]_3PO$ [1]), но несколько выше, чем в спектре трис[2-(тетразол-5-илметокси)фенил]фосфиноксида (1098 cm^{-1}), в котором образуется бифуркатная водородная связь с двумя протонами групп NH [5]. Широкие полосы $\nu(NH)$ имеют максимумы при 3343 и 3172 cm^{-1} , которые можно отнести к колебаниям связей групп NH , ассоциированных с фосфорильной и карбонильной группами соответственно. Полоса $\nu(CO)$ проявляется при 1685 cm^{-1} . Таким образом, ИК спектр соединения согласуется с его установленной структурой.

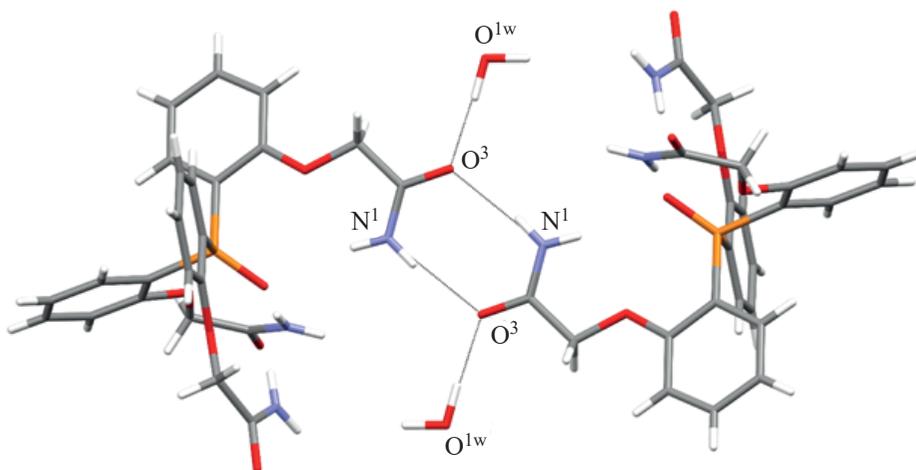


Рис. 2. Межмолекулярные водородные связи между молекулами соединения **1** и H_2O .

При растворении в ДМСО, как правило, разрушаются межмолекулярные водородные связи и сохраняются внутримолекулярные. Однако в структуре соединения **1** разрыв межмолекулярных ассоциаций $C=O \cdots HN$ может повлечь за собой их участие во внутримолекулярных взаимодействиях, т. е. перестройку системы водородных связей. Сравнение ИК спектра раствора фосфиноксида **1** в ДМСО- d_6 со спектром твердого образца показало отсутствие полосы $\nu(PO)$ при 1117 см^{-1} , отсутствует также поглощение в области свободной группы $P=O$. Нам не удалось надежно идентифицировать положение полосы $\nu(PO)$, возможно, она маскируется поглощением растворителя, то есть сдвигается в более низкочастотную сторону {например, в ИК спектре (2-НОС₆Н₄)₃РО $\nu(PO)$ 1090 см^{-1} [18]}. Положение полосы $\nu(CO)$ практически не изменилось, так же, как и полос $\nu(NH)$. Можно предположить, что в растворе имеют место конкурирующие взаимодействия между обеими протоноакцепторными группами и группами NH_2 , причем возможно равновесие разных форм.

В спектре ЯМР 1H раствора фосфиноксида **1** в ДМСО- d_6 проявляется синглетный сигнал метиленовых протонов при 4.45 м. д. В области ароматических протонов наблюдается триплет дублетов при 7.12 м. д. от протона H^4 и триплет при 7.66 м. д. протона H^6 . Сигналы протонов H^3 , H^5 перекрываются и проявляются в виде сложного мультиплета при 7.16–7.29 м. д. Сигналы протонов группы NH_2 проявляются в виде двух значительно раздвинутых синглетов при 7.31 и 7.85 м. д., вероятно, вследствие затрудненного вращения группы NH_2 вокруг связи $C-N$ [19]. Такое различие в сигналах протонов группы NH_2 может быть обусловлено образованием различных водородных связей с группами PO и CO . В спектре ЯМР $^{31}P\{^1H\}$ наблюдается синглет при 30.5 м. д., что соответствует химическому сдвигу триарилфосфиноксидов с фосфорильной группой, вовлеченной в сильные водородные связи, например, в спектре ЯМР $^{31}P\{^1H\}$ (2-НОС₆Н₄)₃РО δ_p 35.9 м. д. (ДМСО) [18].

Синтезированный нами новый триподальный лиганд – трис[2-(карбамоилметокси)фенил]фосфиноксид – может служить основой для получения разнообразных комплексных соединений с *d*- и *f*-элементами, а также с различными органическими молекулами, содержащими полярные

группы. Полученные структурные данные будут полезны при моделировании молекулярного докинга соединений на этой платформе.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Органические растворители марки ХЧ обезвоживали и очищали по стандартным методикам [23]. Дейтерированный растворитель ДМСО- d_6 (Aldrich) использовали без дополнительной очистки.

ИК спектры получали на спектрометре FTIR Tensor 37 Bruker. Спектр кристаллического образца (таблетки с KBr) регистрировали в диапазоне $4000\text{--}400 \text{ см}^{-1}$, спектр раствора образца в ДМСО- d_6 в диапазоне $4000\text{--}1090 \text{ см}^{-1}$. Спектры ЯМР 1H и $^{31}P\{^1H\}$ соединения **1** регистрировали на приборе Bruker AV-300, рабочие частоты – $300.13 (^1H)$ и $121.49 \text{ МГц } (^{31}P\{^1H\})$. Внутренний эталон для спектров ЯМР 1H – сигналы остаточных протонов дейтерированного растворителя, внешний эталон для спектров ЯМР $^{31}P\{^1H\}$ – 85%-ная H_3PO_4 . Элементный анализ выполнен в лаборатории микроанализа Института элементоорганических соединений РАН.

Трис(2-гидроксифенил)фосфиноксид **2** был получен по методике [18].

Трис[2-(карбамоилметокси)фенил]фосфиноксид (1). Смесь 0.98 г (0.003 моль) трис(2-гидроксифенил)фосфиноксида **2**, 20 мл диметилформамида и 2.50 г (0.18 моль) карбоната калия, 1.68 г (0.18 моль) амида хлоруксусной кислоты и 0.25 г (0.002 моль) KBr перемешивали 26 ч при $90^\circ C$. После удаления растворителя в вакууме к остатку добавляли 50 мл воды и 50 мл хлороформа. образовавшийся творожистый осадок отфильтровывали, промывали водой, эфиром и растирали в смеси эфира с метанолом, 20:1. Образовавшийся порошок сушили на воздухе. Выход трис[2-(карбамоилметокси)фенил]фосфиноксида в виде тригидрата 1.51 г (91.2%), т. пл. $191\text{--}193^\circ C$ (метанол-эфир). ИК спектр, $\nu, \text{ см}^{-1}$: 3343 с. ш (NH), 3172 с. ш (NH), 1685 с (C=O), 1117 с (P=O). Спектр ЯМР 1H (ДМСО- d_6), $\delta, \text{ м. д. } (J, \text{ Гц})$: 4.45 с (6H, CH_2O), 7.12 т. д (3H, H^4 , $^4J_{HH} = 2.0$, $^3J_{HH} = 7.0$), 7.16–7.29 м (6H, H^3, H^5), 7.31 с (3H, NH), 7.66 т (3H, H^6 , $^3J_{HH} = ^3J_{HP} = 7.8$), 7.85 с (3H, NH). Спектр ЯМР $^{31}P\{^1H\}$ (ДМСО- d_6): δ_p 30.5 м. д. Найдено, %: C 52.16; H 5.41; N 7.58. $C_{24}H_{24}N_3O_7P \cdot 3H_2O$. Вычислено, %: C 52.27; H 5.48; N 7.62.

Рентгеноструктурный анализ проводили на дифрактометре Bruker APEX-II CCD, оснащенном CCD-детектором, с использованием излучения молибденового анода ($\lambda = 0.71073 \text{ \AA}$) и графитового монохроматора. Поглощение учтено эмпирически по программе SADABS [24]. Структура решена с помощью программы SHELXS97 [25], все не водородные атомы локализованы в разностных синтетах электронной плотности и уточнены с помощью программы SHELXL-2014/7 [26] в анизотропном приближении. Атомы водорода в молекуле соединения **1** найдены геометрически и уточнены в модели *наездника*, атомы водорода в молекуле H_2O локализованы из разностного синтеза и уточнены изотропно с ограничением на длину связей O–H.

Кристаллы соединения **1** тригональные, $\text{C}_{24}\text{H}_{24}\text{N}_3\text{O}_7\text{P}\cdot 3\text{H}_2\text{O}$ (M 551.48), пространственная группа $R\bar{3}$; параметры элементарной ячейки при 296(2) К: $a = 13.9869(17)$, $b = 13.9869(17)$, $c = 23.896(3) \text{ \AA}$, $\alpha = 90.00$, $\beta = 90.00$, $\gamma = 120.00^\circ$, $V = 4048.6(11) \text{ \AA}^3$, $Z = 6$, $d_{\text{выч.}} = 1.357 \text{ г/см}^3$, $\mu(\text{MoK}\alpha) = 0.161 \text{ мм}^{-1}$, измерено 21932 отражений до $2\theta = 50.8^\circ$, из них 1654 независимых ($R_{\text{int}} = 0.097$) и 1034 наблюдаемых; $R_1(\text{obs}) = 0.062$, $wR_2(\text{all}) = 0.177$, GOF = 1.058. Кристаллографические данные депонированы в Кембриджской базе структурных данных (CCDC 1937005).

ФОНДОВАЯ ПОДДЕРЖКА

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (проект № 20-13-00329). Спектральные исследования проведены с использованием научного оборудования Центра исследования строения молекул Института элементорганических соединений РАН.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Matveeva A.G., Kudryavtsev I.Yu., Pasechnik M.P., Vologzhanina A.V., Baulina T.V., Vavina A.V., Sukat G.Ya, Matveev S.V., Godovikov I.A., Turanov A.N., Karandashev V.K., Brel V.K. // Polyhedron. 2018. Vol. 142. P. 71. doi 10.1016/j.poly.2017.12.025
2. Turanov A.N., Matveeva A.G., Kudryavtsev I.Yu., Pasechnik M.P., Matveev S.V., Godovikova M.I., Baulina T.V., Karandashev V.K., Brel V.K. // Polyhedron. 2019. Vol. 161. P. 276. doi 10.1016/j.poly.2019.01.036
3. Кудрявцев И.Ю., Баулина Т.В., Пасечник М.П., Айсин Р.Р., Матвеев С.В., Петровский П.В., Нуфантьев Э.Е. // Изв. АН. Сер. хим. 2013. № 4. С. 1085; Kudryavtsev I.Yu., Baulina T.V., Pasechnik M.P., Matveev S.V., Petrovskii P.V., Nifant'ev E.E. // Russ. Chem. Bull. 2013. Vol. 62. N 4. P. 1086. doi 10.1007/s11172-013-0146-6
4. Kudryavtsev I.Yu., Baulina T.V., Pasechnik M.P., Matveev S.V., Matveeva A.G. // Phosphorus, Sulfur, Silicon, Relat. Elem. 2014. Vol. 189. N 7–8. P. 946. doi 10.1080/10426507.2014.904865
5. Быховская О.В., Матвеева А.Г., Пасечник М.П., Вологжанина А.В., Матвеев С.В., Кудрявцев И.Ю., Баулина Т.В., Брель В.К. // ЖОХ. 2019. Т. 89. Вып. 12. С. 1885. doi 10.1134/S0044460X19120126; Bykhovskaya O.V., Matveeva A.G., Pasechnik M.P., Vologzhanina A.V., Matveev S.V., Kudryavtsev I.Yu., Baulina T.V., Brel V.K. // Russ. J. Gen. Chem. 2019. Vol. 89. N 12. P. 2400. doi 10.1134/S1070363219120120
6. Singh A. S., Sun S.-S. // Chem. Commun. 2011. Vol. 47. N 3. P. 8563. doi 10.1039/c1cc12757h
7. Kuswandi B., Nuriman, Verboom W., Reinhoudt D.N. // Sensors. 2006. Vol. 6. N 8. P. 978. doi 10.3390/s6080978
8. Santacroce P.V., Okunola O.A., Zavalija P.Y., Davis J.T. // Chem. Commun. 2006. N 30. P. 3246. doi 10.1039/b607221f
9. Gale P.A. // Acc. Chem. Res. 2011. Vol. 44. N 3. P. 216. doi 10.1021/ar100134p
10. Reinoso-García M.M., Dijkman A., Verboom W., Reinhoudt D.N., Malinowska E., Wojciechowska D., Pietrzak M., Selucky P. // Eur. J. Org. Chem. 2005. N 10. P. 2131. doi 10.1002/ejoc.200500002
11. Kuswandi B., Nuriman, Dam H.H., Reinhoudt D.N., Verboom W. // Analyt. Chim. Acta. 2007. Vol. 591. N 2. P. 208. doi 10.1016/j.aca.2007.03.064
12. Nuriman, Kuswandi B., Verboom W. // Analyt. Chim. Acta. 2009. Vol. 655. N 1–2. P. 75. doi 10.1016/j.aca.2009.09.045
13. Le Gac S., Luhmer M., Reinaud O., Jabin I. // Tetrahedron. 2007. Vol. 63. N 44. P. 10721. doi 10.1016/j.tet.2007.06.122
14. Welti R., Diederich F. // Helv. Chim. Acta. 2003. Vol. 86. N 2. P. 494. doi 10.1002/hlca.200390049

15. Кудрявцев И.Ю., Быховская О.В., Аладжева И.М., Баулина Т.В., Брель В.К. // ЖОХ. 2017. Т. 87. Вып. 11. С. 1922; Kudryavtsev I.Y., Bykhovskaya O.V., Aladzheva I.M., Baulina T.V., Brel V.K. // Russ. J. Gen. Chem. 2017. Vol. 87. N 11. P. 2744. doi 10.1134/S10703632171110366
16. Баулина Т.В., Кудрявцев И.Ю., Сукат Г.Я., Брель В.К. // ЖОХ. 2018. Т. 88. Вып. 9. С. 1559. doi 10.1134/S0044460X1809024X; Baulina T.V., Kudryavtsev I.Yu., Sykat G.Ya., Brel V.K. // Rus. J. Gen. Chem. 2018. Vol. 88. N 9. P. 1927. doi 10.1134/S1070363218090281
17. Baulina T.V., Kudryavtsev I.Y., Smolyakov A.F., Pasechnik M.P., Brel V.K. // Heteroatom Chem. 2018. P. e21454. doi 10.1002/hc.21454
18. Кудрявцев И.Ю., Баулина Т.В., Хрусталеv В.Н., Петровский П.В., Пасечник М.П., Нифантьев Э.Е. // Докл. АН. 2013. Vol. 448. № 6. P. 657. doi 10.7868/S0869565213060121; Kudryavtsev I.Yu., Baulina T.V., Khrustalev V.N., Petrovskii P.V., Pasechnik M.P., Nifant'ev E.E. // Doklady Chem. 2013. Vol. 448. N 2. P. 55. doi 10.1134/S0012500813020092
19. Stewart W. E., Siddall T. H. // Chem. Rev. 1970. Vol. 70. N 5. P. 517. doi 10.1021/cr60267a001
20. Pasechnik M.P., Matveeva A.G., Lyssenko K.A., Aysin R.R., Smol'yakov A.F., Zubavichusc Y.V., Godovikov I.A., Goryunov E.I. // J. Mol. Struct. 2019. Vol. 1175. P. 874. doi 10.1016/j.molstruc.2018.08.009
21. Baulina T.V., Pasechnik M.P., Kudryavtsev I.Yu., Bykhovskaya O.V., Sukat G.Ya., Smol'yakov A.F., Anikina L.V., Brel V.K. // J. Mol. Struct. 2020. Vol. 1217. P. 128324. doi 10.1016/j.molstruc.2020.128324
22. Durrell A.C., Gray H.B., Hazari N., Incarvito C.D., Liu J., Yan E.C.-Y. // Cryst. Growth Des. 2010. Vol. 10. N 4. P. 1482. doi 10.1021/cg1001286
23. Armarego W.L.F. Purification of Laboratory Chemicals. Amsterdam: Elsevier, 2017. doi 10.1016/B978-0-12-805457-4.50008-2
24. SADABS program, vers. 2008/1, Bruker AXS, Madison, WI, USA, 2008.
25. Sheldrick G.M. SHELX-97. Programs for Crystal Structure Analysis (Release 97-2). University of Göttingen, Germany, 1997.
26. Sheldrick G.M. // Acta Crystallogr. (C). 2015. Vol. 71. N 1. P. 3. doi 10.1107/S2053229614024218

Synthesis, Molecular, and Crystal Structure of Tris(2-carbamoylmethoxyphenyl)phosphine Oxide

T. V. Baulina^a, I. Yu. Kudryavtsev^{a,*}, A. V. Artem'ev^b, I. Yu. Bagryanskaya^c, M. P. Pasechnik^a, and V. K. Brel^a

^a Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds, Russian Academy of Sciences, Moscow, 119991 Russia

^b Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, 630090 Russia

^c Vorozhtsov Institute of Organic Chemistry, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, 630090 Russia

*e-mail: zaq@ineos.ac.ru

Received June 17, 2020; revised June 17, 2020; accepted June 30, 2020

New tripodal ligand, tris(2-carbamoylmethoxyphenyl)phosphine oxide was synthesized by the alkylation of triphenol with chloroacetamide. The structure of the ligand has been studied by IR, NMR (¹H, ³¹P) spectroscopy and X-ray diffraction.

Keywords: tripodal ligand, tris(2-carbamoylmethoxyphenyl)phosphine oxide, crystal and molecular structure