

Строение сольватов галогенидов тетраорганилфосфония с диметилсульфоксидом: $[\text{Ph}_3\text{PCH}_2\text{Ph}]\text{Br}\cdot 2\text{DMSO}$ и $[\text{Ph}_3\text{PCH}_2\text{C}_6\text{H}_4\text{CN-4}]\text{Cl}\cdot\text{DMSO}$

© Шарутин*⁺ Владимир Викторович и Шарутина Ольга Константиновна

Химический факультет. Национальный исследовательский Южно-Уральский государственный университет. Пр. Ленина, 76. г. Челябинск, 454080. Россия. E-mail: sharutin50@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: сольват, бромид, бензилтрифенилфосфоний, хлорид, 4-цианобензилтрифенилфосфоний, диметилсульфоксид, строение, рентгеноструктурный анализ.

Аннотация

Структурно охарактеризованы сольваты бромида бензилтрифенилфосфония (**1**, $M = 589.56$, триклинная, $P\bar{1}$, $a = 10.4902(4) \text{ \AA}$, $b = 12.3991(4) \text{ \AA}$, $c = 13.4631(4) \text{ \AA}$, $\alpha = 64.2780(10)^\circ$, $\beta = 68.4580(10)^\circ$, $\gamma = 81.698(2)$, $V = 1467.18(9) \text{ \AA}^3$, $Z = 2$, $\rho = 1.335 \text{ г/см}^3$, $\mu = 1.621 \text{ мм}^{-1}$, $F(000) = 612$, $GOOF = 1.053$, $R_1 = 0.0615$, $wR_2 = 0.1817$) и хлорида 4-цианобензилтрифенилфосфония (**2**, $M = 491.99$, моноклинная, $P2_1/n$, $a = 12.5422(11) \text{ \AA}$, $b = 9.2624(10) \text{ \AA}$, $c = 22.639(2) \text{ \AA}$, $\beta = 99.988(3)^\circ$, $V = 2590.1(4) \text{ \AA}^3$, $Z = 4$, $\rho = 1.262 \text{ г/см}^3$, $\mu = 0.311 \text{ мм}^{-1}$, $F(000) = 1032.0$, $GOOF = 1.041$, $R_1 = 0.0701$, $wR_2 = 0.1721$) с диметилсульфоксидом. Кристаллы **1** и **2** состоят из слабо искаженных тетраэдрических катионов тетраорганилфосфония (CPC $107.70(16)^\circ$ – $111.45(17)^\circ$, P–C_{Ph} 1.790(3), 1.793(4), 1.803(3) и P–C_{Alk} 1.803(3) Å для **1** и P–C_{Ph} 1.799(10), 1.774(10), 1.784(10) и CPC $107.6(5)^\circ$ – $111.6(4)^\circ$, P–C_{Alk} 1.790(9) Å для **2**), галоген-анионов и сольватных молекул диметилсульфоксида.