

## Краткие сообщения Brief reports

Краткое сообщение  
УДК 546.185+546.141+548.3+548.312.2  
DOI: 10.14529/chem260116

### СТРОЕНИЕ БРОМИДА БРОМБУТИЛТРИФЕНИЛФОСФОНИЯ

**В.В. Шарутин<sup>1</sup>**, **П.А. Слепухин<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия

<sup>2</sup> Институт органического синтеза имени И.Я. Постовского УрО РАН,  
Екатеринбург, Россия

✉ sharutin50@mail.ru

**Аннотация.** Структурно охарактеризован ионный комплекс фосфора  $[\text{Ph}_3\text{P}(\text{CH}_2)_4\text{Br}]\text{Br}$  (**1**), в осфониевых катионах которых атомы фосфора имеют искаженную тетрагональную координацию. По данным РСА **1**  $\text{C}_{22}\text{H}_{24}\text{POBr}$ ,  $M$  415,3; сингония моноклиная, группа симметрии  $P2_1/c$ ; параметры ячейки:  $a = 11,3909(5)$ ,  $b = 10,2409(4)$ ,  $c = 17,4715(6)$  Å;  $\alpha = 90,00^\circ$ ,  $\beta = 104,269(4)^\circ$ ,  $\gamma = 90,00^\circ$ ;  $V = 1975,22(13)$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 8$ ,  $\rho_{\text{calc}} = 1,397$  г/см<sup>3</sup>,  $\mu = 2,169$  мм<sup>-1</sup>,  $F(000) = 856,0$ , диапазон сбора данных по  $2\theta$ , град: 4,64–62,26, размер кристалла 0,6×0,25×0,16 мм; интервалы индексов отражений  $-10 \leq h \leq 16$ ,  $-14 \leq k \leq 14$ ,  $-24 \leq l \leq 23$ ; всего отражений 15820; независимых отражений 5608;  $R_{\text{int}} 0,0265$ ;  $GOOF$  1,013;  $R_1 = 0,0459$ ,  $wR_2 = 0,0993$ ; остаточная электронная плотность 0,80/–0,74 е/Å<sup>3</sup>. В катионах органилтрифенилфосфония **1** атомы фосфора имеют тетрагональную координацию, углы СРС в которых изменялись в интервале 106,65(11)–111,25(13)°, расстояния Р–С составляли 1,794(3)–1,802(3) Å, что несколько ниже суммы ковалентных радиусов атомов-партнеров (1,83 Å). Полные таблицы координат атомов, длин связей и валентных углов для структур депонированы в Кембриджском банке структурных данных (No 2467698 (**1**); deposit@ccdc.cam.ac.uk; <http://www.ccdc.cam.ac.uk>).

**Ключевые слова:** бромид, бромбутилтрифенилфосфоний, строение, рентгеноструктурный анализ

**Для цитирования:** Шарутин В.В., Слепухин П.А. Строение бромид бромбутилтрифенилфосфония // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2026. Т. 18, № 1. С. 185–188. DOI: 10.14529/chem260116

Brief report  
DOI: 10.14529/chem260116

### STRUCTURE OF BROMOBUTYL TRIPHENYLPHOSPHONIUM BROMIDE

**V.V. Sharutin<sup>1</sup>**, **P.A. Slepukhin<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> South Ural State University, Chelyabinsk, Russia

<sup>2</sup> Institute of Organic Synthesis, Ural Branch of the RAS, Yekaterinburg, Russia

✉ sharutin50@mail.ru

**Abstract.** The ionic phosphorus complex  $[\text{Ph}_3\text{P}(\text{CH}_2)_4\text{Br}]\text{Br}$  (**1**), in whose phosphonium cations the phosphorus atoms have a distorted tetragonal coordination, has been structurally characterized. According to the X-ray diffraction data, **1**  $\text{C}_{22}\text{H}_{24}\text{POBr}$ ,  $M$  415.3; monoclinic syngony, symmetry group  $P2_1/c$ ; cell parameters:  $a = 11.3909(5)$ ,  $b = 10.2409(4)$ ,  $c = 17.4715(6)$  Å;  $\alpha = 90.00^\circ$ ,  $\beta = 104.269(4)^\circ$ ,  $\gamma = 90.00^\circ$ ;  $V = 1975.22(13)$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 8$ ,  $\sigma_{\text{calc}} = 1.397$  g/cm<sup>3</sup>,  $\mu = 2.169$  mm<sup>-1</sup>,  $F(000) = 856.0$ ,  $2\theta$  data acquisition range, deg: 4.64–62.26, crystal size 0.6×0.25×0.16 mm; reflection index ranges  $-10 \leq h \leq 16$ ,  $-14 \leq k \leq 14$ ,  $-24 \leq l \leq 23$ ; total reflections 15820; independent reflections 5608;  $R_{\text{int}} = 0.0265$ ;  $GOOF$  1.013;  $R_1 = 0.0459$ ,  $wR_2 = 0.0993$ ; residual electron density 0.80/–0.74 e/Å<sup>3</sup>. In organyltriphenylphosphonium cations **1**, the phosphorus atoms have a tetragonal coordination, the CPC angles in which vary in the range of 106.65(11)°–111.25(13)°, the P–C distances are 1.794(3)–1.802(3) Å, which is slightly lower than the sum of the covalent radii of the

© Шарутин В.В., Слепухин П.А., 2026.

partner atoms (1.83 Å). Complete tables of atomic coordinates, bond lengths and bond angles for the structure have been deposited with the Cambridge Crystallographic Data Centre (No. 2467698 (**1**); deposit@ccdc.cam.ac.uk; <http://www.ccdc.cam.ac.uk>).

**Keywords:** bromide, bromobutyl triphenylphosphonium, structure, X-ray structural analysis

**For citation:** Sharutin V.V., Slepukhin P.A. Structure of bromobutyl triphenylphosphonium bromide. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Chem.* 2026;18(1):185–188. (In Russ.) DOI: 10.14529/chem260116

### Введение

В банке структурных данных Кембриджского университета задепонировано более 1000 структур бромидов алкилтрифенилфосфония [1], особенности строения которых обсуждались в ряде работ, например [2–19].

В настоящей публикации опубликована кристаллическая структура бромид бромбутилтрифенилфосфония (**1**).

### Экспериментальная часть

В работе использовали кристаллы соединения **1** производства фирмы Alfa Aesar. Элементный анализ выполнен на элементном анализаторе Carlo Erba CHNS-O EA 1108. Температура плавления измерена на синхронном термоанализаторе Netzsch 449C Jupiter.

**ИК-спектр** соединения **1** записывали на ИК-спектрометре Shimadzu IRAffinity-1S в таблетках KBr в области 4000–400 см<sup>-1</sup>.

Рентгеноструктурный анализ (РСА) кристалла **1** проводили на оборудовании ЦКП «САОС» ИОС УрО РАН в соответствии с темой НИР 124020200072-0 на автоматическом 4-кружном дифрактометре с CCD-детектором Xcalibur 3 по стандартной процедуре (MoK<sub>α</sub>-излучение, графитовый монохроматор, ω-сканирование с шагом 1° при T = 295(2) K). Введена эмпирическая поправка на поглощение. Структуры определены прямым статистическим методом и уточнены полноматричным МНК по F<sup>2</sup> в анизотропном приближении для всех неводородных атомов. Атомы водорода C-H связей помещены в геометрически рассчитанные положения и уточнены в изотропном приближении в модели «наездника». Все расчеты проведены в программной оболочке Olex2 [20] с использованием программного пакета SHELX [21].

Основные кристаллографические данные и результаты уточнения структуры **1** приведены в табл. 1. Полные таблицы координат атомов, длин связей и валентных углов депонированы в Кембриджском банке структурных данных (№ 2467698 (**1**); deposit@ccdc.cam.ac.uk; <http://www.ccdc.cam.ac.uk>).

Таблица

Кристаллографические данные, параметры эксперимента и уточнения структуры **1**

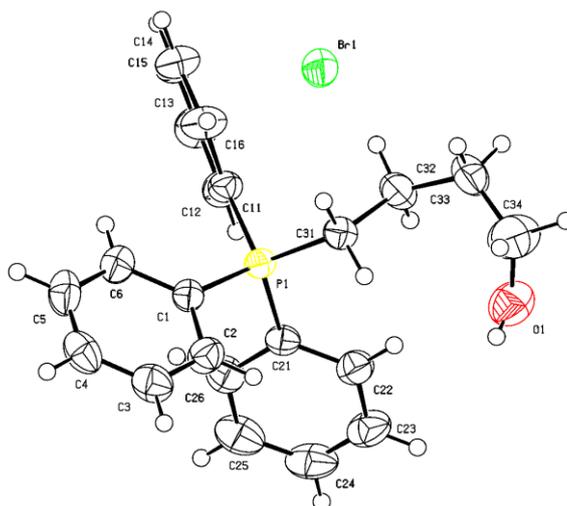
| Параметр                             | <b>1</b>                             |
|--------------------------------------|--------------------------------------|
| Формула                              | C <sub>22</sub> H <sub>24</sub> POBr |
| <i>M</i>                             | 415,3                                |
| Сингония                             | Моноклинная                          |
| Пр. группа                           | <i>P</i> 2 <sub>1</sub> / <i>c</i>   |
| <i>a</i> , Å                         | 11,3909(5)                           |
| <i>b</i> , Å                         | 10,2409(4)                           |
| <i>c</i> , Å                         | 17,4715(6)                           |
| α, град.                             | 90,00                                |
| β, град.                             | 104,269(4)                           |
| γ, град.                             | 90,00                                |
| <i>V</i> , Å <sup>3</sup>            | 1975,22(13)                          |
| <i>Z</i>                             | 8                                    |
| ρ <sub>ввч</sub> , г/см <sup>3</sup> | 1,397                                |
| μ, мм <sup>-1</sup>                  | 2,169                                |
| <i>F</i> (000)                       | 856,0                                |

Окончание таблицы

| Параметр   | <b>1</b>   |
|--|--|
| Размер кристалла (мм)  | 0,6×0,25×0,16  |
| Область сбора данных по 2 $\theta$ , град.                   | 4,64–62,26   |
| Интервалы индексов отражений                                 | $-10 \leq h \leq 16, -14 \leq k \leq 14, -24 \leq l \leq 23$ |
| Измерено отражений   | 15820  |
| Независимых отражений  | 5608   |
| Переменных уточнения   | 227  |
| <i>GOOF</i>  | 1,013  |
| <i>R</i> -факторы по $F^2 > 2\sigma(F^2)$                    | $R_1 = 0,0459, wR_2 = 0,0993$                                |
| <i>R</i> -факторы по всем отражениям                         | $R_1 = 0,0817, wR_2 = 0,1147$                                |
| Остаточная электронная плотность (min/max), e/Å <sup>3</sup> | 0,80/–0,74   |

### Обсуждение результатов

Показано, что структура бромида бромбутилтрифенилфосфония состоит из катионов тетраорганилфосфония и бром-анионов (рис. 1). В катионах бромбутилтрифенилфосфония **1** атомы фосфора имеют тетрагональную координацию (см. рисунок), углы СРС в которых изменялись в интервале 106,65(11)–111,25(13)°, длины связей Р–С составляли 1,794(3)–1,802(3) Å.



Строение комплекса **1**

Геометрические параметры комплекса **1** близки к наблюдаемым в аналогичных соединениях фосфора [1], длины связей Р–С несколько ниже суммы ковалентных радиусов атомов-партнеров [22] и приближаются к наблюдаемым в других подобных катионах органилтрифенилфосфония [23,24].

### Заключение

Таким образом, бромид бромбутилтрифенилфосфония  $[\text{Ph}_3\text{P}(\text{CH}_2)_4\text{Br}][\text{Br}]$  имеет ионную структуру с тетрагональной координацией атомов фосфора в катионах тетраорганилфосфония. Структурные характеристики комплекса **1** близки к наблюдаемым в аналогичных соединениях фосфора.

### Список источников

1. Cambridge Crystallographic Data Center. 2023 (deposit@ccdc.cam.ac.uk; <http://www.ccdc.cam.ac.uk>).
2. Biskup D., Bergmann T., Schnakenburg G. et al. // RSC Adv. 2023. V. 13. P. 21313. DOI: 10.1039/D3RA04352E
3. Mancinelli J.P., Liu S., Wilkerson-Hill S.M. // Org. Biomol. Chem. 2022. V. 20. P. 6183. DOI: 10.1039/D2OB00505K

4. Darmandeh H., Scherpf T., Feichtner K.-S. et al. // Chem.-Eur. J. 2019. V. 25. P. 2793. DOI: 10.1002/zaac.201900333
5. Sengoden M., Bhat G.A., Darensbourg D.J. // RSC Advances. 2022. V. 12. P. 32440. DOI: 10.1039/D2RA06358A
6. Hui J., Wang X., Yao X., Li Z. // Polym. Chem. 2022. V. 13. P. 6551. DOI: 10.1039/D2PY01001A
7. Шарутин В.В. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2021. Т. 13, № 2. С. 5. DOI: 10.14529/chem210201
8. Romanov S.R., Khafizova A.I., Gerasimov A.V. et al. // Mendeleev Comm. 2023. V. 33. P. 249. DOI: 10.1016/j.mencom.2023.02.032
9. Taakili R., Lepetit C., Duhayon C. et al. // Dalton Trans. 2019. V. 48. P. 1709. DOI: 10.1039/C8DT04316G
10. Ong H.C., Coimbra J.T.S., Kwek G. et al. // RSC Chem. Biol. 2021. V. 2. P. 1643. DOI: 10.1039/d1cb00099c
11. Yang W., Liu L., Guo J. et al. // Angew. Chem., Int. Ed. 2022. V. 61. Art. e2022057. DOI: 10.1002/anie.202205743
12. Шарутин В.В., Шевченко Д.П., Шарутина О.К., Баранов Е.В. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2025. Т. 17, № 3. С. 97. DOI: 10.14529/chem250309
13. De Marco R., Giuso V., Achard T. et al. // Eur. J. Inorg. Chem. 2023. 26. DOI: 10.1002/ejic.202300184
14. Benaissa I., Taakili R., Lugan N., Canac Y. // Dalton Trans. 2017. V. 46. P. 12293. DOI: 10.1039/C7DT02759A
15. Burgess K.M.N., Korobkov I., Bryce D.L. // Chem.-Eur. J. 2012. V. 18. P. 5748. DOI: 10.1002/chem.201103478
16. Stromyer M.L., Southerland M.R., Satyal U. et al. // Eur. J. Med. Chem. 2020. V. 185. P. 111832. DOI: 10.1016/j.eurjmed.2020.111832
17. Veinot A.J., Todd A.D.K., Robertson K.N., Masuda J.D. // Can. J. Chem. 2018. V. 96. P. 8. DOI: 10.1139/cjc-2017-0482
18. Ameskal M., Taakili R., Gulyaeva E.S. et al. // Inorg. Chem. 2023. V. 62. P. 20129. DOI: 10.1016/j.inorg.2022.132628
19. Шарутин В.В. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2024. Т. 16, № 3. С. 89. DOI: 10.14529/chem240302
20. Dolomanov O.V., Bourhis L.J., Gildea R.J. et al. // J. Appl. Cryst. 2009. V. 42. P. 339. DOI: 10.1107/S0021889808042726
21. Sheldrick G.M. // Acta Cryst. 2008. A64, P. 112. DOI:10.1107/S0108767307043930
22. Бацанов С.С. // Журн. неорганической химии. 1991. Т. 36, № 12. С. 3015. EDN: ZSYPJG
23. Шарутин В.В., Шарутина О.К., Механошина Е.С. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2024. Т. 16, № 2. С. 108. DOI: 10.14529/chem240212
24. Шарутин В.В., Механошина Е.С., Сахаутдинова М.Э. и др. // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Химия». 2024. Т. 16, № 1. С. 83. DOI: 10.14529/chem240106

**Шарутин Владимир Викторович** – доктор химических наук, профессор, главный научный сотрудник управления научной и инновационной деятельности, Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия. E-mail: sharutin50@mail.ru

**Слепухин Павел Александрович** – кандидат химических наук, руководитель группы РСА, Институт органического синтеза имени И.Я. Постовского УрО РАН, Екатеринбург, Россия. E-mail: slepukhin@ios.uran.ru

*Статья поступила в редакцию 31 октября 2025 г.  
The article was submitted 31 October 2025.*