

СТРОЕНИЕ 2,4-ДИНИТРОБЕНЗОЛСУЛЬФОНАТА ТРИЭТИЛАММОНИЯ

В.В. Шарутин¹✉, Д.П. Шевченко¹, М.В. Кудряшов², Н.В. Сомов²

¹ Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия

² Нижегородский государственный университет, Нижний Новгород, Россия

✉ sharutin50@mail.ru

Аннотация. Структурно охарактеризован 2,4-динитробензолсульфонат триэтиламмония с катионами триэтиламмония и 2,4-динитробензолсульфонатными анионами, в которых атомы серы имеют искаженную тетрагональную координацию. По данным РСА **1** C₁₂H₁₉N₃O₇S, *M* 349,36; сингония триклинная, группа симметрии *P*-1; параметры ячейки: *a* = 7,8092(1), *b* = 8,7035(2), *c* = 12,0245(3) Å; α = 71,790(2)°, β = 78,491(1)°, γ = 87,910(1)°; *V* = 760,44(3) Å³, *Z* = 2, ρ_{выч} = 1,526 г/см³, μ = 0,255 мм⁻¹, *F*(000) = 368,0, диапазон сбора данных по θ, град: 2,567–33,283, размер кристалла 0,55×0,44×0,27 мм; интервалы индексов отражений -11 ≤ *h* ≤ 11, -13 ≤ *k* ≤ 13, -18 ≤ *l* ≤ 18; всего отражений 31325; независимых отражений 4944; *R*_{int} 0,0221; *GOOF* 1,057; *R*₁ = 0,0261, *wR*₂ = 0,0728; остаточная электронная плотность 0,411/–0,452 е/Å³. В катионах триэтиламмония атомы азота имеют тетрагональную координацию, углы CNC в которых составляли 107,1(7)–111,46(6)°, расстояния N–C равны 1,5065(9)–1,5090(9) Å. В аренсульфонатных анионах углы CSO и OSO составляли 103,91(3)–105,89(3)° и 112,52(4)–114,56(4)° соответственно, расстояние S–C равно 1,8037(7) Å. Полные таблицы координат атомов, длин связей и валентных углов для структур депонированы в Кембриджском банке структурных данных (No 2535258 (1); deposit@ccdc.cam.ac.uk; http://www.ccdc.cam.ac.uk).

Ключевые слова: 2,4-динитробензолсульфонат триэтиламмония, строение, рентгеноструктурный анализ

Благодарности. Рентгеноструктурные исследования выполнены в рамках госзадания № FSWR-2026-0004 Министерства науки и высшего образования РФ.

Для цитирования: Строение 2,4-динитробензолсульфоната триэтиламмония / В.В. Шарутин, Д.П. Шевченко, М.В. Кудряшов, Н.В. Сомов // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2026. Т. 18, № 2. С. 183–187. DOI: 10.14529/chem260217

Brief report
DOI: 10.14529/chem260217

STRUCTURE OF 2,4-DINITROBENZENE SULFONATE TRIETHYLAMMONIUM

V.V. Sharutin¹✉, D.P. Shevchenko¹, M.V. Kudryashov², N.V. Somov²

¹ South Ural State University, Chelyabinsk, Russia

² Nizhny Novgorod State University, Nizhny Novgorod, Russia

✉ sharutin50@mail.ru

Abstract. Triethylammonium 2,4-dinitrobenzenesulfonate with tetrahedral triethylammonium cations and 2,4-dinitrobenzenesulfonate anions, in which the sulfur atoms have a distorted tetragonal coordination, has been structurally characterized. According to X-ray diffraction data, **1** C₁₂H₁₉N₃O₇S, *M* 349,36; triclinic syngony, symmetry group *P*-1; cell parameters: *a* = 7,8092(1), *b* = 8,7035(2), *c* = 12,0245(3) Å; α = 71,790(2)°, β = 78,491(1)°, γ = 87,910(1)°; *V* = 760,44(3) Å³, *Z* = 2, ρ_{calc} = 1,526 g/cm³, μ = 0,255 mm⁻¹, *F*(000) = 368,0, θ data acquisition range, deg: 2,567–33,283, crystal size 0,55×0,44×0,27 mm; reflection index ranges -11 ≤ *h* ≤ 11, -13 ≤ *k* ≤ 13, -18 ≤ *l* ≤ 18; total reflections 31325; independent reflections 4944; *R*_{int} 0,0221; *GOOF* 1,057; *R*₁ = 0,0261, *wR*₂ = 0,0728; residual electron density 0,411/–0,452 e/Å³. In triethylammonium cations, the nitrogen atoms have tetragonal coordination, the CNC angles in which were

107,1(7)°–111,46(6)°, the N–C distances were 1,5065(9)–1,5090(9) Å. In arensulfonate anions, the sulfur atoms have tetragonal coordination, the CSO and OSO angles were 103,91(3)–105,89(3)° and 112,52(4)–114,56(4)°, respectively, the S–C distance was 1,8037(7) Å. Complete tables of atomic coordinates, bond lengths and bond angles for the structure have been deposited with the Cambridge Crystallographic Data Centre (No. 2535258 (1); deposit@ccdc.cam.ac.uk; <http://www.ccdc.cam.ac.uk>).

Keywords: 2,4-dinitrobenzenesulfonate triethylammonium, structure, X-ray structural analysis

Acknowledgments. X-ray structural studies were carried out within the framework of state assignment No. FSWR-2026-0004 of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation.

For citation: Sharutin V.V., Shevchenko D.P., Kudryashov M.V., Somov N.V. Structure of 2,4-dinitrobenzene sulfonate triethylammonium. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Chem.* 2026;18(2):183–187. (In Russ.) DOI: 10.14529/chem260217

Введение

Известно, что аренсульфонаты тетраорганилфосфония [1–17], -стибония [18–26] и -висмутония [27–33] могут иметь ионное и молекулярное строение, причем для первых характерны только ионные структуры, а для последних могут наблюдаться еще и примеры молекулярных структур, в которых присутствуют полярные связи Sb–O и Bi–O, что обусловлено устойчивостью катионов $[R_4E]^+$, электронным строением атомов E и их размерами. Именно поэтому в настоящей работе опубликована кристаллическая структура 2,4-динитробензолсульфоната триэтиламмония (1).

Экспериментальная часть

В работе использовали кристаллы соединения **1** производства фирмы Alfa Aesar.

Рентгеноструктурный анализ кристаллов **1** проводили на автоматическом дифрактометре Rigaku XtaLab при 100 °K. Первичные фрагменты структур найдены методом двойного пространства в программных комплексах *SHELX* [34], *ShelXle* [35]. Параметры остальных атомов, включая атомы водорода, определены по разностному синтезу электронной плотности и уточнены по $|F|^2$ методом наименьших квадратов. Положения водородных атомов уточнялись в основном цикле метода наименьших квадратов в изотропном приближении. Полные таблицы координат атомов, длин связей и валентных углов депонированы в Кембриджском банке структурных данных (CCDC 2535258); deposit@ccdc.cam.ac.uk; <http://www.ccdc.cam.ac.uk>). Основные кристаллографические данные и результаты уточнения структуры **1** приведены в таблице.

Таблица

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

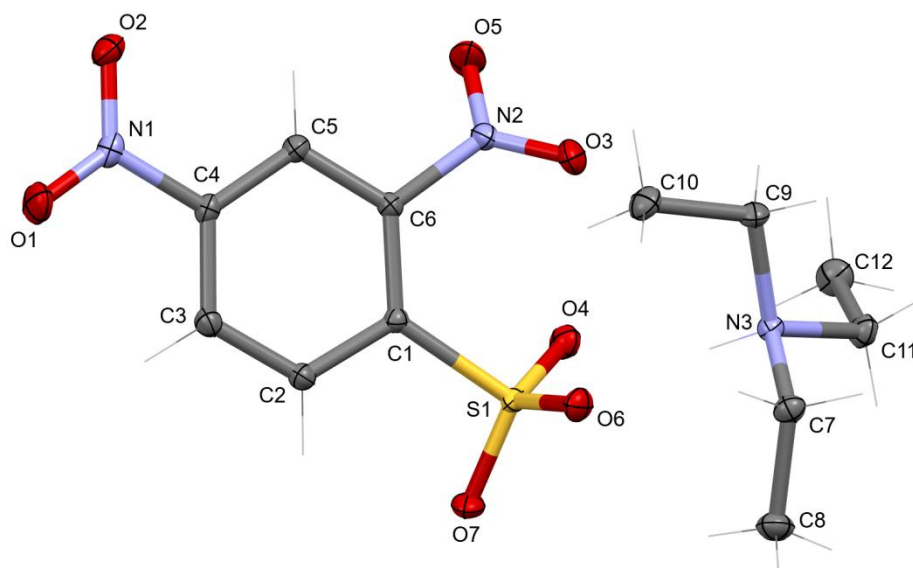
Параметр	Значение
Формула	C ₁₂ H ₁₉ N ₃ O ₇ S
<i>M</i>	349,36
Сингония	Триклинная
Пр. группа	<i>P</i> -1
<i>a</i> , Å	7,8092(1)
<i>b</i> , Å	8,7035(2)
<i>c</i> , Å	12,0245(3)
α , град.	71,790(2)
β , град.	78,491(1)
γ , град.	87,910(1)
<i>V</i> , Å ³	760,44(3)
<i>Z</i>	2
$\rho_{\text{выч}}$, г/см ³	1,526
μ , мм ⁻¹	0,255
<i>F</i> (000)	368,0
Размер кристалла (мм)	0,55×0,44×0,27
Дифрактометр / Излучение / Монохроматор / тип сканирования	Rigaku XtaLab, MM003, P200K / MoK α , λ = 0.71073 Å / MicroMax-003 / ω -сканирование
Область сбора данных по θ , град.	2,567–33,283

Параметр	Значение
Интервалы индексов отражений	$-11 \leq h \leq 11, -13 \leq k \leq 13, -18 \leq l \leq 18$
Измерено отражений	31325
Независимых отражений	4944
Переменных уточнения	265
<i>GOOF</i>	1,057
<i>R</i> -факторы по $F^2 > 2\sigma(F^2)$	$R_1 = 0,0261, wR_2 = 0,0728$
Остаточная электронная плотность (min/max), $e/\text{Å}^3$	-0,452/0,411

Обсуждение результатов

Из приведенных во введении данных следовало, что аренсульфонаты тетраорганилфосфония обладают ионной структурой, поэтому можно предположить, что подобные аренсульфонатные производные тетраорганиламмония также будут иметь в своем составе аренсульфонатные анионы. Однако для подтверждения этой гипотезы следовало определить кристаллическое строение одного из них, тем более что на практике иногда встречались случаи необычных структур [36].

Нами показано, что кристалл 2,4-динитробензолсульфоната триэтиламмония (**1**) состоит из катионов триэтиламмония и 2,4-динитробензолсульфонатных анионов (см. рисунок).



Строение комплекса **1**

В катионах триэтиламмония **1** атомы азота имеют тетрагональную координацию, с углами CNC 107,1(7)–111,46(6)° и длинами связей N–C 1,5065(9)–1,5090(9) Å. В сульфонатной группе аниона углы OSC изменялись в интервале 103,91(3)–105,89(3)°, для углов OSO этот интервал составлял 112,52(4)–114,56(4)°, длины связей S–O равны 1,4471(6), 1,4495(6), 1,4624(6) Å, S–C 1,8037(6) Å. Геометрические параметры комплекса **1** близки к наблюдаемым в аналогичных соединениях азота [36].

Заключение

Таким образом, 2,4-динитробензолсульфонат триэтиламмония имеет ионное строение с тетрагональной координацией атомов азота в катионах тетраорганиламмония и атомов серы в сульфонатной группе аниона.

Список источников

1. Sharutin V.V., Senchurin V.S., Sharutina O.K. // Russ. J. Gen. Chem. 2009. V. 79, No. 1. P. 78. DOI: 10.1134/S1070363209010125

2. Шарутин В.В., Мукушева Н., Уржумова А.В. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2018. Т. 10, № 2. С. 48. DOI: 10.14529/chem180206
3. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Gubanov Yu.O. // Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol. 2019. V. 62, No. 2. P. 4. DOI: 10.6060/ivkkt.20196202.5823
4. Шарутин В.В. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2024. Т. 16, № 3. С. 89. DOI: 10.14529/chem240302
5. Шарутин В.В., Механошина Е.С., Сахаутдинова М.Э. и др. // Вестник ЮУрГУ. Серия: «Химия». 2024. Т. 16, № 1. С. 83. DOI: 10.14529/chem240106
6. Шарутин В.В., Шарутина О.К., Механошина Е.С. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2024. Т. 16, № 2. С. 108. DOI: 10.14529/chem240212
7. Шарутин В.В., Шарутина О.К., Механошина Е.С. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2022. Т. 14, № 4. С. 45. DOI: 10.14529/chem220404
8. Ефремов А.Н., Шарутин В.В. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2022. Т. 14, № 3. С. 34. DOI: 10.14529/chem220304
9. Механошина Е.С. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2023. Т. 15, № 2. С. 55. DOI: 10.14529/chem230204
10. Механошина Е.С. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2023. Т. 15, № 1. С. 31. DOI: 10.14529/chem230103
11. Шарутин В.В., Механошина Е.С., Головин М.С. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2024. Т. 16, № 1. С. 68. DOI: 10.14529/chem240104
12. Шарутин В.В., Шарутина О.К., Механошина Е.С. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2024. Т. 16, № 2. С. 86. DOI: 10.14529/chem240209
13. Шарутин В.В., Механошина Е.С., Вершинина Е.А. и др. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2024. Т. 16, № 2. С. 58. DOI: 10.14529/chem240205
14. Шарутин В.В., Механошина Е.С. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2024. Т. 16, № 4. С. 61. DOI: 10.14529/chem240404
15. Шарутин В.В., Механошина Е.С. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2025. Т. 17 № 1. С. 133. DOI: 10.14529/chem2501
16. Шарутин В.В., Механошина Е.С. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2025. Т. 17, № 2. С. 83. DOI: 10.14529/chem250205
17. Шарутин В.В., Шевченко Д.П., Шарутина О.К. и др. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2025. Т. 17, № 3. С. 97. DOI: 10.14529/chem250309
18. Шарутин В.В., Шарутина О.К., Панова Л.П. и др. // Коорд. химия. 1997. Т. 23, № 7. С. 513. EDN: ZPNXGO
19. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Panova L.P. et al. // Russ. J. Gen. Chem. 1997. V. 67, No. 9, P. 1531. EDN: LEGVGL
20. Тарасова Н.М. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2022. Т. 14, № 2. С. 25. DOI: 10.14529/chem220203
21. Красносельская В.В. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2022. Т. 14, № 2. С. 33. DOI: 10.14529/chem220204
22. Шарутин В.В. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2022. Т. 14, № 4. С. 64. DOI: 10.14529/chem220406
23. Шарутина О.К. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2022. Т. 14, № 1. С. 24. DOI: 10.14529/chem220103
24. Шарутин В.В. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2023. Т. 15, № 4. С. 109. DOI: 10.14529/chem230402
25. Шарутин В.В., Морозова К.Д. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2024. Т. 16, № 3. С. 111. DOI: 10.14529/chem240305
26. Шарутин В.В., Дегтярева Д.А. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2024. Т. 16, № 3. С. 118. DOI: 10.14529/chem240306
27. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Egorova I.V. et al. // Russ. J. Gen. Chem. 1999. V. 69, No. 9. P. 1414. EDN: LFNAAP
28. Шарутин В.В., Шарутина О.К., Егорова И.В. и др. // Изв. АН. Сер. хим. 1999, № 12. С. 2350. EDN: TMAFPX

29. Sharutin V.V., Egorova I.V. Ivanenko T.K. et al. // Russ. J. Gen. Chem. 2002. V. 72, No. 12. P. 1952. DOI: 10.1023/A:1023475615290
30. Красносельская В.В. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2022. Т. 14, № 4. С. 72. DOI: 10.14529/chem220407
31. Шарутин В.В., Шарутина О.К., Сенчурин В.С. и др. // Журн. неорганической химии. 2022. Т. 67, № 12. С. 1773. DOI: 10.31857/S0044457X22600803
32. Рыбакова А.В. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2022. Т. 14, № 1. С. 32. DOI: 10.14529/chem220104
33. Шарутин В.В., Сенчурин В.С., Штоль Е.Е. и др. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2024. Т. 16, № 2. С. 103. DOI: 10.14529/chem240211
34. Dolomanov O.V., Bourhis L.J., Gildea R.J. et al. // J. Appl. Cryst. 2009. V. 42. P. 339. DOI: 10.1107/S0021889808042726
35. Sheldrick G.M. // Acta Cryst. 2008. A64, P. 112. DOI:10.1107/S0108767307043930
36. Cambridge Crystallographic Database. Release 2022. Cambridge.

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

Шевченко Дмитрий Павлович – аспирант кафедры теоретической и прикладной химии, Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия. E-mail: Shepher56@gmail.com

Кудряшов Михаил Викторович – аспирант, инженер 2-й категории кафедры кристаллографии и экспериментальной физики, Нижегородский государственный университет, Нижний Новгород, Россия. E-mail: m.v.kudryashov@phys.unn

Сомов Николай Викторович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры кристаллографии и экспериментальной физики, Нижегородский государственный университет, Нижний Новгород, Россия. E-mail: somov@phys.unn.ru

*Статья поступила в редакцию 2 марта 2026 г.
The article was submitted 2 March 2026.*