

## КОМПЛЕКСЫ МЕДИ [CuBr<sub>2</sub>(DMSO-O)<sub>3</sub>] и [Cu(DMSO-O)<sub>4</sub>SF<sub>6</sub>]. СИНТЕЗ И СТРОЕНИЕ

**В.С. Сенчури́н, Д.П. Шевченко, В.В. Шару́тин**

Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Россия

Растворением бромиды меди (II) и фторида меди (II) в присутствии плавиково́й кислоты в диметилсульфоксиде с последующим медленным испарением растворителя синтезированы и структурно охарактеризованы комплексы меди [CuBr<sub>2</sub>(DMSO-O)<sub>3</sub>] (1) и [Cu(DMSO-O)<sub>4</sub>SF<sub>6</sub>] (2). По данным рентгеноструктурного анализа, проведенного при 293 К на автоматическом четырехкружном дифрактометре D8 Quest Bruker (двухкоординатный CCD – детектор, MoK<sub>α</sub>-излучение, λ = 0,71073 Å, графитовый монохроматор) кристаллов 1 [C<sub>6</sub>H<sub>18</sub>O<sub>3</sub>S<sub>3</sub>Br<sub>2</sub>Cu, M 457,74; сингония моноклинная, группа симметрии P2<sub>1</sub>/c; параметры ячейки: a = 8,812(6), b = 15,335(11), c = 12,272(8) Å; α = 90,00 град., β = 105,82(3) град., γ = 90,00 град.; V = 1595,5(19) Å<sup>3</sup>; размер кристалла 0,59×0,32×0,24 мм; интервалы индексов отражений -13 ≤ h ≤ 11, -23 ≤ k ≤ 23, -18 ≤ l ≤ 18; всего отражений 45529; независимых отражений 5832; R<sub>int</sub> 0,0971; GOOF 1,001; R<sub>I</sub> = 0,0497, wR<sub>2</sub> = 0,1073; остаточная электронная плотность 0,77/-1,36 e/Å<sup>3</sup>] и 2 [C<sub>8</sub>H<sub>24</sub>O<sub>4</sub>F<sub>6</sub>S<sub>5</sub>Cu, M 522,11; сингония триклинная, группа симметрии P-1; параметры ячейки: a = 10,325(18), b = 10,428(18), c = 10,60(2) Å; α = 77,93(11) град., β = 89,49(9) град., γ = 68,12(6) град.; V = 1033(3) Å<sup>3</sup>; размер кристалла 0,47×0,16×0,13 мм; интервалы индексов отражений -11 ≤ h ≤ 11, -12 ≤ k ≤ 12, -12 ≤ l ≤ 12; всего отражений 9324; независимых отражений 3307; R<sub>int</sub> 0,0709; GOOF 1,029; R<sub>I</sub> = 0,0555, wR<sub>2</sub> = 0,1309; остаточная электронная плотность 0,64/-0,82 e/Å<sup>3</sup>] атомы меди имеют сильно искаженную квадратно-пирамидальную координацию (углы *транс*-OCuO 165,68(11)°, *транс*-OCuBr 143,37(10)° (1) и *транс*-OCuO 163,8(2), 169,0(2)° (2); длины связей Cu–Br 2,4681(14) Å и 2,5922(14) Å (1), Cu–O 1,944(3)–2,054(3) Å (1) и 1,940(6)–1,956(5) Å (2)). Фрагмент SF<sub>6</sub> в 2 (*транс*-углы FSF 178,8(2)–179,7(3)°, *цис*-углы FSF 88,7(2)–91,0(3)°) связан с центральным атомом меди (длина связи Cu–F 2,208(6) Å). Структурная организация в кристаллах 1 и 2 обусловлена слабыми межмолекулярными контактами типа O<sub>(DMSO)</sub>⋯H–C<sub>(DMSO)</sub> (2,57 Å) и Cu–Br⋯H–C<sub>(DMSO)</sub> (2,89–3,04 Å) (1), S–F⋯H–C<sub>(DMSO)</sub> (2,32–2,60 Å) (2). Полные таблицы координат атомов, длин связей и валентных углов для структур 1 и 2 депонированы в Кембриджском банке структурных данных (№ 1883471, 1898916; deposit@ccdc.cam.ac.uk; <https://www.ccdc.cam.ac.uk>).

*Ключевые слова:* бромид меди, фторид меди, диметилсульфоксид, синтез, строение, рентгеноструктурный анализ.

### Введение

Комплексные галогенсодержащие соединения меди с координированными молекулами диметилсульфоксида в большей степени структурно охарактеризованы на примере хлорсодержащих соединений. Известны нейтральные моноядерные комплексы четырех- и шестикоординированной меди [CuHal<sub>2</sub>(DMSO-O)<sub>2</sub>] Hal = Cl [1], Br [2], [CuCl(Ph<sub>3</sub>P)<sub>2</sub>(DMSO-O)] [3], [CuCl<sub>2</sub>(DMSO-O)<sub>2</sub>L<sub>2</sub>] [4, 5], а также биядерные комплексы [Cu<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>(μ-Cl)<sub>2</sub>(DMSO-O)<sub>4</sub>] [6], [Cu<sub>2</sub>(Ph<sub>3</sub>P)<sub>2</sub>(μ-Hal)<sub>2</sub>(DMSO-O)<sub>2</sub>] Hal=Br, I [7], которые получали смешением этанольных растворов галогенида меди (II) и ДМСО с последующим медленным испарением растворителя.

В настоящей работе описан синтез двух диметилсульфоксидных комплексов меди и рассмотрены особенности их строения методом рентгеноструктурного анализа (РСА).

### Экспериментальная часть

**Синтез [CuBr<sub>2</sub>(DMSO-O)<sub>3</sub>] (1).** 0,200 г бромиды меди(II) растворяли при перемешивании в 5 мл диметилсульфоксида. После концентрирования раствора до половины от первоначального объема наблюдали образование желто-зеленых игольчатых кристаллов комплекса **1**, которые от-

бирали и сушили. Выход 0,155 г (38 %), т. разл. 97 °С. ИК-спектр ( $\nu$ ,  $cm^{-1}$ ): 2997, 2984, 2905, 1431, 1402, 1317, 1022, 988, 918, 718, 496.

**Синтез  $[Cu(DMSO-O)_4SF_6]$  (2).** 0,100 г фторида меди(II) растворяли при перемешивании в 5 мл диметилсульфоксида и добавляли 0,2 мл концентрированной плавиковой кислоты. Нерастворившийся осадок отфильтровывали, после концентрирования фильтрата до половины от первоначального объема наблюдали образование светло-зеленых кристаллов комплекса **2**, которые отбирали и сушили. Выход 0,108 г (21 %), т. разл. 201 °С. ИК-спектр ( $\nu$ ,  $cm^{-1}$ ): 2995, 2972, 2907, 1420, 1404, 1024, 988, 951, 937, 739, 482.

**ИК-спектры** соединений **1** и **2** записывали на ИК-Фурье спектрометре Shimadzu IRAffinity-1S в таблетке KBr в области 4000–400  $cm^{-1}$ .

**Рентгеноструктурный анализ (РСА)** проводили на автоматическом четырехкружном дифрактометре D8 QUEST фирмы Bruker (Mo  $K_{\alpha}$ -излучение,  $\lambda = 0,71073 \text{ \AA}$ , графитовый монохроматор). Сбор, редактирование данных и уточнение параметров элементарной ячейки, а также учет поглощения проведены с помощью программ SMART и SAINT-Plus [8]. Все расчеты по определению и уточнению структур выполнены с помощью программ SHELXL/PC [9] и OLEX2 [10]. Структуры определены прямым методом и уточнены методом наименьших квадратов в анизотропном приближении для неводородных атомов. Положение атомов водорода уточняли по модели наездника ( $U_{\text{изо}}(H) = 1,2U_{\text{эв}}(C)$ ). Кристаллографические данные и результаты уточнения структуры приведены в табл. 1, длины связей и валентные углы – в табл. 2.

Таблица 1

Кристаллографические данные, параметры эксперимента и уточнения структур **1** и **2**

Параметр	<b>1</b>	<b>2</b>
Формула	$C_6H_{18}O_3S_3Br_2Cu$	$C_8H_{24}O_4F_6S_5Cu$
$M$	457,74	522,11
$T$ , К	293,15	293,15
Сингония	Моноклинная	Триклинная
Пр. группа	$P2_1/c$	$P-1$
$a$ , $\text{\AA}$	8,812(6)	10,325(18)
$b$ , $\text{\AA}$	15,335(11)	10,428(18)
$c$ , $\text{\AA}$	12,272(8)	10,60(2)
$\alpha$ , град.	90,00	77,93(11)
$\beta$ , град.	105,82(3)	89,49(9)
$\gamma$ , град.	90,00	68,12(6)
$V$ , $\text{\AA}^3$	1595,5(19)	1033(3)
$Z$	4	2
$\rho$ (выч.), $g/cm^3$	1,906	1,679
$\mu$ , $mm^{-1}$	6,757	1,624
$F(000)$	900,0	534,0
Форма кристалла (размер, мм)	обломок (0,59×0,32×0,24)	обломок (0,47×0,16×0,13)
Область сбора данных по $\theta$ , град.	4,36–66,28	6,46–49,16
Интервалы индексов отражений	$-13 \leq h \leq 11$ , $-23 \leq k \leq 23$ , $-18 \leq l \leq 18$	$-11 \leq h \leq 11$ , $-12 \leq k \leq 12$ , $-12 \leq l \leq 12$
Измерено отражений	45529	9324
Независимых отражений	5832	3307
$R_{\text{int}}$	0,0971	0,0709
Переменных уточнения	142	225
GOOF	1,001	1,029
$R$ -факторы по $F^2 > 2\sigma(F^2)$	$R_1 = 0,0497$ , $wR_2 = 0,1073$	$R_1 = 0,0555$ , $wR_2 = 0,1309$
$R$ -факторы по всем отражениям	$R_1 = 0,1191$ , $wR_2 = 0,1292$	$R_1 = 0,1096$ , $wR_2 = 0,1602$
Остаточная электронная плотность (min/max), $e/\text{\AA}^3$	0,77/–1,36	0,64/–0,82

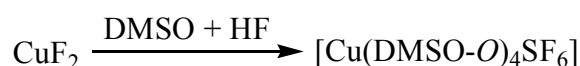
Длины связей и валентные углы для структур 1 и 2

Связь <i>d</i> , Å		Угол $\omega$ , град.	
<b>1</b>			
Cu(1)–Br(1)	2,4681(14)	O(1)Cu(1)O(3)	165,68(11)
Cu(1)–Br(2)	2,5922(14)	O(2)Cu(1)Br(1)	143,37(10)
Cu(1)–O(1)	1,948(3)	Br(1)Cu(1)Br(2)	109,81(5)
Cu(1)–O(2)	2,054(3)	O(2)Cu(1)Br(2)	106,81(11)
Cu(1)–O(3)	1,944(3)	O(1)Cu(1)O(2)	84,70(11)
S(1)–O(1)	1,531(3)	O(1)Cu(1)Br(1)	92,35(10)
S(2)–O(2)	1,516(3)	O(1)Cu(1)Br(2)	93,61(9)
S(3)–O(3)	1,527(3)	O(2)Cu(1)O(3)	82,81(10)
		O(3)Cu(1)Br(1)	93,48(9)
		O(3)Cu(1)Br(2)	96,69(9)
<b>2</b>			
Cu(1)–O(1)	1,942(5)	O(1)Cu(1)O(3)	169,0(2)
Cu(1)–O(2)	1,940(6)	O(2)Cu(1)O(4)	163,8(2)
Cu(1)–O(3)	1,956(5)	O(1)Cu(1)O(2)	87,8(2)
Cu(1)–O(4)	1,945(6)	O(2)Cu(1)O(3)	88,0(2)
Cu(1)–F(1)	2,208(6)	O(3)Cu(1)O(4)	92,1(2)
S(1)–O(1)	1,544(6)	O(1)Cu(1)O(4)	89,1(2)
S(2)–O(2)	1,531(6)	F(1)Cu(1)O(1)	98,2(2)
S(3)–O(3)	1,541(6)	F(1)Cu(1)O(2)	103,8(2)
S(4)–O(4)	1,531(5)	F(1)Cu(1)O(3)	92,7(2)
S(5)–F(1)	1,719(6)	F(1)Cu(1)O(4)	92,4(3)
S(5)–F(2)	1,678(6)	F(1)S(5)F(2)	178,8(2)
S(5)–F(3)	1,674(5)	F(3)S(5)F(5)	179,7(3)
S(5)–F(4)	1,681(6)	F(4)S(5)F(6)	179,0(3)
S(5)–F(5)	1,685(5)	F(1)S(5)F(5)	88,7(2)
S(5)–F(6)	1,677(6)	F(1)S(5)F(3)	91,0(3)

Полные таблицы координат атомов, длин связей и валентных углов депонированы в Кембриджском банке структурных данных (№ 1883471 (1), 1898916 (2); deposit@ccdc.cam.ac.uk; <http://www.ccdc.cam.ac.uk>).

### Обсуждение результатов

В продолжение исследования синтеза сульфоксидных комплексов меди получено два неизвестных ранее молекулярных комплекса с *O*-координированными молекулами диметилсульфоксида: дибромом-*трис*(диметилсульфоксид)медь (1) и гексафторосульфо-*тетра*кис(диметилсульфоксид)медь (2). Комплексы 1 и 2 синтезировали из дибромиды меди или дифторида меди с добавлением плавиковой кислоты в диметилсульфоксиде с последующим медленным испарением раствора:



По данным PCA, атомы меди в соединениях 1 и 2 имеют сильно искаженную квадратно-пирамидальную координацию (рис. 1 и 2).

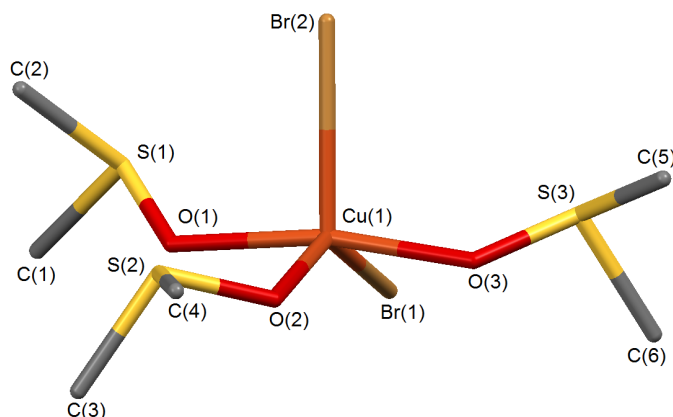


Рис. 1. Строение комплекса 1

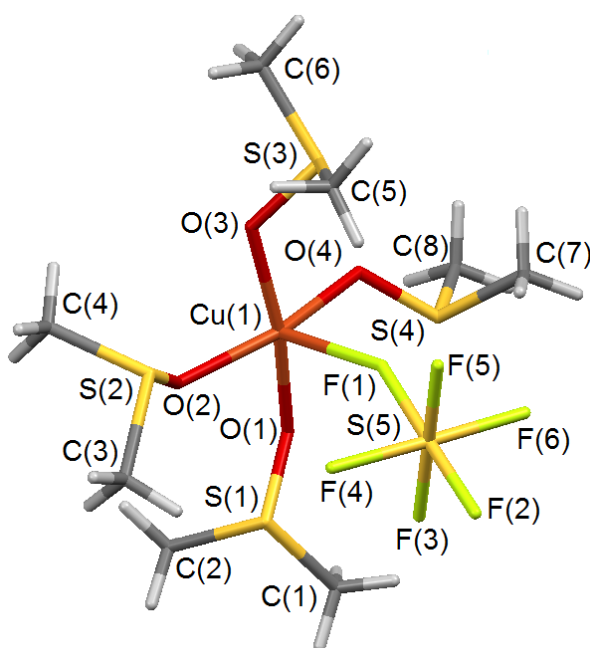


Рис. 2. Строение комплекса 2

*Транс*-углы  $O(1)CuO(3)$   $165,68(11)^\circ$ ,  $O(2)CuBr(1)$   $143,37(10)^\circ$  в (1) и  $O(1)CuO(3)$   $169,0(2)^\circ$ ,  $O(2)CuO(4)$   $163,8(2)^\circ$  в (2) существенно отличаются от теоретических значений. Для *цис*-углов также наблюдается значительное отклонение от теоретических значений:  $82,81(10)$ – $109,81(5)^\circ$  в (1) и  $87,8(2)$ – $103,8(2)^\circ$  в (2). Расстояния  $Cu-Br$  в (1) составляют  $2,4681(14)$  Å и  $2,5922(14)$  Å; длины связей  $Cu-O$  изменяются в интервале  $1,944(3)$ – $2,054(3)$  Å (1) и  $1,940(6)$ – $1,956(5)$  Å (2). Слабоискаженный октаэдрический фрагмент  $SF_6$  (*транс*-углы  $FSF$   $178,8(2)$ – $179,7(3)^\circ$ , *цис*-углы  $FSF$   $88,7(2)$ – $91,0(3)^\circ$ ) в 2 связан с центральным атомом меди посредством атома  $F(1)$ , длина связи  $Cu-F(1)$  ( $2,208(6)$  Å) больше суммы ковалентных радиусов атомов меди и фтора  $1,89$  Å [11], однако существенно меньше суммы их ван-дер-ваальсовых радиусов ( $3,3$  Å) [12]. Мостиковый характер атома  $F(1)$  приводит к удлинению связи  $S(5)-F(1)$  до  $1,719(6)$  Å по сравнению с остальными связями  $S(5)-F(2-6)$ , длины которых изменяются в интервале  $1,674(5)$ – $1,685(5)$  Å.

В кристалле соединения 1 присутствуют межмолекулярные контакты  $O_{(DMSO)} \cdots H-C_{(DMSO)}$  ( $2,57$  Å) и  $Cu-Br \cdots H-C_{(DMSO)}$  ( $2,89$ – $3,04$  Å), близкие к суммам ван-дер-ваальсовых радиусов атомов водорода и кислорода ( $2,62$  Å), а также водорода и брома ( $2,93$  Å) [13]. В кристалле 2 наблюдаются многочисленные контакты  $S-F \cdots H-C_{(DMSO)}$  ( $2,32$ – $2,60$  Å), меньше или практически совпадающие с суммой ван-дер-ваальсовых радиусов атомов водорода и фтора ( $2,57$  Å) [13].

### Выводы

Таким образом, растворение бромида меди(II) в диметилсульфоксиде сопровождается внедрением трех молекул растворителя в координационную сферу атома меди и образованием комплекса  $[\text{CuBr}_2(\text{DMSO}-\text{O})_3]$ . В аналогичной реакции фторида меди (II) с диметилсульфоксидом в присутствии плавиковой кислоты образуется комплекс  $[\text{Cu}(\text{DMSO}-\text{O})_4\text{SF}_6]$ , в котором в координационную сферу атома меди входят четыре молекулы растворителя, а фрагмент  $\text{SF}_6$  связан с центральным атомом посредством связи  $\text{Cu}-\text{F}$ .

### Литература

1. Willett, R.D. The Crystal Structure of Copper(II) Chloride *bis*(Dimethylsulphoxide) / R.D. Willett, Kun Chang // *Inorg. Chim. Acta.* – 1970. – V. 4. – P. 447–451. DOI: 10.1016/S0020-1693(00)93324-3.
2. Willett, R.D. The Crystal Structure of Copper(II) Bromide *bis*(Dimethylsulphoxide) / R.D. Willett, F.H. Jardine, S.A. Roberts // *Inorg. Chim. Acta.* – 1977. – V. 25. – P. 97–101. DOI: 10.1016/S0020-1693(00)95696-2.
3. Triphenylphosphine-Mediated Deoxygenative Reduction of  $\text{CF}_3\text{SO}_2\text{Na}$  and its Application for Trifluoromethylthiolation of Aryl Iodides / Yi Yang, Long Xu, Yu Siqi et al. // *Chem.-Eur. J.* – 2016. – V. 22, № 3. – P. 858–863. DOI: 10.1002/chem.201504790.
4. Crystal Structure of Dichlorobis(dimethylsulfoxide-O)-bis-(isonicotinic acid-N)copper(II)-dimethylsulfoxide (1:2),  $[\text{CuCl}_2(\text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_2)_2(\text{C}_2\text{H}_6\text{OS})_2]_2 \cdot 2\text{C}_2\text{H}_6\text{OS}$  / J. Kang, I. Park, Y. Kwak et al. // *Z. Kristallogr. – New Cryst. Struct.* – 2011. – V. 226, № 3. – P. 311–312. DOI: 10.1524/ncrs.2011.0138.
5. Exposed Equatorial Positions of Metal Centers via Sequential Ligand Elimination and Installation in MOFs / Sh. Yuan, P. Zhang, L. Zhang et al. // *J. Am. Chem. Soc.* – 2018. – V. 140, № 34. – P. 10814–10819. DOI: 10.1021/jacs.8b04886.
6. Vakulka, A. Unknown *cis*- $[(\text{DMSO})_2\text{ClCu}^{\text{II}}(\mu\text{-Cl})_2\text{Cu}^{\text{II}}\text{Cl}(\text{DMSO})_2]$  Isomer Obtained via New  $[\text{Cu}_4\text{Cl}_8(\text{DMSO})_8(\text{hmta})]$  Template Complex / A. Vakulka, E. Goreschnik // *J. Coord. Chem.* – 2017. – V. 70, № 3. – P. 556–563. DOI: 10.1080/00958972.2016.1261288.
7. Photo- and Vapor-Controlled Luminescence of Rhombic Dicopper(I) Complexes Containing Dimethyl Sulfoxide / A. Kobayashi, K. Komatsu, H. Ohara et al. // *Inorg. Chem.* – 2013. – V. 52, № 22. – P. 13188–13198. DOI: 10.1021/ic402104q.
8. Bruker. SMART and SAINT-Plus. Versions 5.0. Data Collection and Processing Software for the SMART System. Bruker AXS Inc., Madison, Wisconsin, USA, 1998.
9. Bruker. SHELXTL/PC. Versions 5.10. An Integrated System for Solving, Refining and Displaying Crystal Structures from Diffraction Data. Bruker AXS Inc., Madison, Wisconsin, USA, 1998.
10. OLEX2: Complete Structure Solution, Refinement and Analysis Program / O.V. Dolomanov, L.J. Bourhis, R.J. Gildea et al. // *J. Appl. Cryst.* – 2009. – V. 42. – P. 339–341. DOI: 10.1107/S0021889808042726.
11. Covalent radii revisited / B. Cordero, V. Gómez, A.E. Platero-Prats et al. // *Dalton Trans.* – 2008. – Iss. 21. – P. 2832–2838. DOI: 10.1039/B801115J.
12. Бацанов, С.С. Атомные радиусы элементов / С.С. Бацанов // *Журн. неорган. химии.* – 1991. – Т. 36, № 12. – С. 3015–3037.
13. Consistent Van der Waals Radii for the Whole Main Group / M. Mantina, A.C. Chamberlin, R. Valero et al. // *J. Phys. Chem. A.* – 2009. – V. 113, iss. 19. – P. 5806–5812. DOI: 10.1021/jp8111556.

**Сенчурин Владислав Станиславович** – доктор химических наук, профессор, кафедра теоретической и прикладной химии, Южно-Уральский государственный университет. 454080, г. Челябинск, проспект Ленина, 76. E-mail: senchurinvs@susu.ru.

**Шевченко Дмитрий Павлович** – студент, Южно-Уральский государственный университет. 454080, г. Челябинск, проспект Ленина, 76. E-mail: shepher56@gmail.com.

**Шарутин Владимир Викторович** – доктор химических наук, профессор, главный научный сотрудник Управления научной и инновационной деятельности, Южно-Уральский государственный университет. 454080, г. Челябинск, проспект Ленина, 76. E-mail: sharutin50@mail.ru.

Поступила в редакцию 4 октября 2019 г.

## COPPER COMPLEXES [CuBr<sub>2</sub>(DMSO-O)<sub>3</sub>] AND [Cu(DMSO-O)<sub>4</sub>SF<sub>6</sub>]. SYNTHESIS AND STRUCTURE

V.S. Senchurin, senchurinvs@susu.ru

D.P. Shevchenko, shepher56@gmail.com

V.V. Sharutin, sharutin50@mail.ru

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

The dissolution of copper (II) bromide and copper (II) fluoride in the presence of hydrofluoric acid in dimethyl sulfoxide, followed by slow evaporation of the solvent, have synthesized copper complexes [CuBr<sub>2</sub>(DMSO-O)<sub>3</sub>] (**1**) and [Cu(DMSO-O)<sub>4</sub>SF<sub>6</sub>] (**2**). They have been structurally characterized. The X-ray diffraction pattern has been obtained at 293 K on an automatic diffractometer D8 Quest Bruker (MoK<sub>α</sub>-radiation, λ = 0.71073 Å, graphite monochromator) of crystals **1** [C<sub>6</sub>H<sub>18</sub>O<sub>3</sub>S<sub>3</sub>Br<sub>2</sub>Cu, M 457.74, the monoclinic syngony, the symmetry group P2<sub>1</sub>/c; cell parameters: a 8.812(6), b 15.335(11), c 12.272(8) Å, α = 90.00 degrees, β = 105.82(3) degrees, γ = 90.00 degrees; V = 1595.5(19) Å<sup>3</sup>; the crystal size is 0.59 × 0.32 × 0.24 mm; intervals of reflection indexes are -13 ≤ h ≤ 11, -23 ≤ k ≤ 23, -18 ≤ l ≤ 18; total reflections 45529; independent reflections 5832; R<sub>int</sub> 0.0971; GOOF 1.001; R<sub>1</sub> = 0.0497, wR<sub>2</sub> = 0.1073; residual electron density 0.77/-1.36 e/Å<sup>3</sup>] and **2** [C<sub>8</sub>H<sub>24</sub>O<sub>4</sub>F<sub>6</sub>S<sub>5</sub>Cu, M 522.11, the triclinic syngony, the symmetry group P-1; cell parameters: a 10.325(18), b 10.428(18), c 10.60(2) Å, α = 77.93(11) degrees, β = 89.49(9) degrees, γ = 68.12(6) degrees; V = 1033(3) Å<sup>3</sup>; the crystal size is 0.47 × 0.16 × 0.13 mm; intervals of reflection indexes are -11 ≤ h ≤ 11, -12 ≤ k ≤ 12, -12 ≤ l ≤ 12; total reflections 9324; independent reflections 3307; R<sub>int</sub> 0.0709; GOOF 1.029; R<sub>1</sub> = 0.0555, wR<sub>2</sub> = 0.1309; residual electron density 0.64/-0.82 e/Å<sup>3</sup>], the copper atoms have a distorted square-pyramidal coordination (the trans-OCuO and trans-OCuBr angles are 165.68(11)° and 143.37(10)° (**1**); trans-OCuO are 163.8(2), 169.0(2)° (**2**); the Cu-Br and Cu-O bond lengths are 2.4681(14) Å and 2.5922(14) Å (**1**), 1.944(3)-2.054(3) Å (**1**) and 1.940(6)-1.956(5) Å (**2**) respectively). Fragment SF<sub>6</sub> in **2** (the FSF trans-angles 178.8(2)-179.7(3)°, cis-angles 88.7(2)-91.0(3)°) linked to the central copper atom (the Cu-F bond length 2.208(6) Å). The structural organization of crystals **1** and **2** is controlled by intermolecular bonds O<sub>(DMSO)</sub>⋯H-C<sub>(DMSO)</sub> (2.57 Å) and Cu-Br⋯H-C<sub>(DMSO)</sub> (2.89-3.04 Å) (**1**), S-F⋯H-C<sub>(DMSO)</sub> (2.32-2.60 Å) (**2**). Complete tables of coordinates of atoms, bond lengths and valence angles for structures **1** and **2** are deposited at the Cambridge Structural Data Bank (no. 1883471, 1898916; deposit@ccdc.cam.ac.uk; <https://www.ccdc.cam.ac.uk>).

*Keywords:* copper bromide, copper fluoride, dimethyl sulfoxide, synthesis, structure, X-ray analysis.

### References

1. Willett R.D., Chang Kun The Crystal Structure of Copper(II) Chloride bis(Dimethylsulphoxide). *Inorg. Chim. Acta*, 1970, vol. 4, pp. 447-451. DOI: 10.1016/S0020-1693(00)93324-3.
2. Willett R.D., Jardine F.H., Roberts S.A. The Crystal Structure of Copper(II) Bromide bis(Dimethylsulphoxide). *Inorg. Chim. Acta*, 1977, vol. 25, pp. 97-101. DOI: 10.1016/S0020-1693(00)95696-2.
3. Yang Yi, Xu Long, Siqi Yu, Liu Xiaoqiang, Zhang Yu, Vivic D.A. Triphenylphosphine-Mediated Deoxygenative Reduction of CF<sub>3</sub>SO<sub>2</sub>Na and its Application for Trifluoromethylthiolation of Aryl Iodides. *Chem.-Eur. J.*, 2016, vol. 22, no. 3, pp. 858-863. DOI: 10.1002/chem.201504790.
4. Kang J., Park I., Kwak Y., Jung Y., Kim S., Lee Y., Yun H., Do J. Crystal Structure of Dichlorobis(dimethylsulfoxide-O)-bis(isonicotinic acid-N)copper(II)-dimethylsulfoxide (1:2), [CuCl<sub>2</sub>(C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>NO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>OS)<sub>2</sub>]<sub>2</sub> · 2C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>OS. *Z. Kristallogr. New Cryst. Struct.*, 2011, vol. 226, no. 3, pp. 311-312. DOI: 10.1524/ncrs.2011.0138.
5. Yuan Sh., Zhang P., Zhang L., Garcia-Esparza A.T., Sokaras D., Qin J.-Sh., Feng L., Day G.S., Chen W., Drake H.F., Elumalai P., Madrahimov S.T., Sun D., Zhou H.-C. Exposed Equatorial Positions of Metal Centers via Sequential Ligand Elimination and Installation in MOFs. *J. Am. Chem. Soc.*, 2018, vol. 140, no. 34, pp. 10814-10819. DOI: 10.1021/jacs.8b04886.

6. Vakulka A., Goreshnik E. Unknown *cis*-[(DMSO)<sub>2</sub>ClCu<sup>II</sup>(μ-Cl)<sub>2</sub>Cu<sup>II</sup>Cl(DMSO)<sub>2</sub>] Isomer Obtained via New [Cu<sub>4</sub>Cl<sub>8</sub>(DMSO)<sub>8</sub>(hmta)] Template Complex. *J. Coord. Chem.*, 2017, vol. 70, no. 3, pp. 556–563. DOI: 10.1080/00958972.2016.1261288.
7. Kobayashi A., Komatsu K., Ohara H., Kamada W., Chishina Y., Tsuge K., Chang H.-Ch., Kato M. Photo- and Vapor-Controlled Luminescence of Rhombic Dicopper(I) Complexes Containing Dimethyl Sulfoxide. *Inorg. Chem.*, 2013, vol. 52, no. 22, pp. 13188–13198. DOI: 10.1021/ic402104q.
8. Bruker. SMART and SAINT-Plus. Versions 5.0. Data Collection and Processing Software for the SMART System. Bruker AXS Inc., Madison, Wisconsin, USA, 1998.
9. Bruker. SHELXTL/PC. Versions 5.10. An Integrated System for Solving, Refining and Displaying Crystal Structures From Diffraction Data. Bruker AXS Inc., Madison, Wisconsin, USA, 1998.
10. Dolomanov O.V., Bourhis L.J., Gildea R.J., Howard J.A.K., Puschmann H. OLEX2: Complete Structure Solution, Refinement and Analysis Program. *J. Appl. Cryst.*, 2009, vol. 42, pp. 339–341. DOI: 10.1107/S0021889808042726.
11. Cordero B., Gómez V., Platero-Prats A.E., Revés M., Echeverría J., Cremades E., Barragána F., Alvarez S. Covalent Radii Revisited. *Dalton Trans.* 2008, iss. 21, pp. 2832–2838. DOI: 10.1039/B801115J.
12. Batsanov S.S. [The Atomic Radii of the Elements]. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 1991, vol. 36, no. 12, pp. 3015–3037. (in Russ.)
13. Mantina M., Chamberlin A.C., Valero R., Cramer C.J., Truhlar D.G. Consistent Van der Waals Radii for the Whole Main Group *J. Phys. Chem. A.*, 2009, vol. 113, no. 19, pp. 5806–5812. DOI: 10.1021/jp8111556.

*Received 4 October 2019*

---

### ОБРАЗЕЦ ЦИТИРОВАНИЯ

Сенчурин, В.С. Комплексы меди [CuBr<sub>2</sub>(DMSO-O)<sub>3</sub>] и [Cu(DMSO-O)<sub>4</sub>SF<sub>6</sub>]. Синтез и строение / В.С. Сенчурин, Д.П. Шевченко, В.В. Шарутин // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». – 2019. – Т. 11, № 4. – С. 42–48. DOI: 10.14529/chem190405

### FOR CITATION

Senchurin V.S., Shevchenko D.P., Sharutin V.V. Copper complexes [CuBr<sub>2</sub>(DMSO-O)<sub>3</sub>] and [Cu(DMSO-O)<sub>4</sub>SF<sub>6</sub>]. Synthesis and Structure. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Chemistry*. 2019, vol. 11, no. 4, pp. 42–48. (in Russ.). DOI: 10.14529/chem190405

---