

μ -氧-双{三[邻氯(氟)苄基]锡}的合成、结构和量子化学研究

张复兴 邱代治* 冯泳兰 王剑秋 许志锋

(衡阳师范学院化学系, 衡阳 421008)

关键词: μ -氧-双[三(邻氯苄基)锡] μ -氧-双[三(邻氟苄基)锡] 晶体结构
分类号: O614.43+2

苄基锡化合物具有丰富的反应性和结构特征, 引起人们的兴趣^[1,2], 前文^[3,4], 我们分别用苄基氯和对氯苄基氯合成了 μ -O-双(三苄基锡)和二(对-氯苄基)二氯化锡, 最近, 我们在水和正丁醇中, 用对氯苄基氯与锡粉直接反应, 获得高收率的四(对氯苄基)锡^[5], 并报道了它们的晶体结构, 发现苄基锡化合物的一些结构特征, 在研究苄基氯与锡的反应时, 我们发现苯环上卤原子对反应性有明显的影响, 为了较系统地阐明苄基氯与锡的反应以及卤素对苄基的活化作用, 本文报道 μ -氧-双[三(邻氯苄基)锡](1)和 μ -氧-双[三(邻氟苄基)锡](2)的合成及其晶体结构。

1 实验部分

1.1 试剂和仪器

三(邻氯苄基)氯锡和三(邻氟苄基)氯锡按文献^[3]自制, IR(KBr)用日本岛津 FTIR-8700 红外光谱仪(4000~400 cm^{-1})测定, 晶体结构用 Bruker X 射线四圆衍射仪测定, 熔点用北京产 XT4 双目体视显微熔点测定仪测定, 温度计未经校正。

1.2 化合物的合成^[3]

在三角瓶中加入 10.6g(0.02mol)三(邻氯苄基)氯化锡或 9.62g(0.02mol)三(邻氟苄基)氯化锡、40mL 苯、2g 氢氧化钠和 8mL 水。搅拌回流 4h。分出苯层, 水层用苯萃取, 合并苯层, 旋转蒸发出大部分溶剂。冷却得无色结晶产物。化合物(1), μ -氧-双[三(邻氯苄基)锡]8.24g, 收率 82.4%, m. p. 为

138~139 $^{\circ}\text{C}$ 。红外光谱主要吸收峰: 3055.0(m), 1587.3(s), 1564.2(m), 1471.6(vs), 1436.9(vs), 1404.1(m), 1278.7(s), 1211.2(vs), 1159.1(m), 1137.9(m), 1091.6(vs), 1072.3(vs), 1047.3(vs), 1024.1(vs), 935.4(m), 839.0(vs), 815.8(vs), 750.3(vs), 734.8(vs), 717.5(vs), 677.0(s), 582.5(w), 567.0(w), 480.2(w), 435.9(s) cm^{-1} 。化合物(2), μ -氧-双[三(邻氟苄基)锡]7.16g, 收率 79%, m. p. 为 117~118 $^{\circ}\text{C}$ 。红外光谱主要吸收峰: 3060.8(w), 1610.5(w), 1577.7(m), 1490.9(vs), 1456.2(s), 1404.1(m), 1282.6(w), 1228.6(vs), 1188.1(s), 1153.4(m), 1126.4(m), 1103.2(s), 1062.7(m), 1028.0(m), 931.6(w), 839.0(vs), 754.1(vs), 729.0(s), 715.5(s), 580.5(w), 526.5(w), 509.2(w), 449.4(m), 420.5(m) cm^{-1} 。

1.3 晶体结构分析

从苯溶液中缓慢结晶获得无色透明的晶体, 在四圆衍射仪上, 采用石墨单色器 $\text{MoK}\alpha$ 射线($\lambda = 0.071073\text{nm}$), 在 20 $^{\circ}\text{C}$, 以 ω -2 θ 方式扫描方式收集数据, 可观察衍射点 [$I > 2\sigma(I)$] 用于结构分析和结构修正, 全部数据经 Lp 因子和经验吸收校正。晶体结构由直接法解出确定非氢原子和理论加氢法确定氢原子在晶胞中的位置坐标, 并对氢原子和非氢原子分别采用各向同性和各向异性全矩阵最小二乘法修正。全部结构分析计算工作采用 SHELXL-97 程序系统完成。

选取一颗 0.35 × 0.25 × 0.20mm 的晶体(1), 在

收稿日期: 2002-04-28。收修改稿日期: 2002-07-23。

湖南省自然科学基金资助项目(No. 00JJY2010)和湖南省教育厅重点资助项目(No. 00A004)。

* 通讯联系人。E-mail: hnkdz@yahoo.com.cn

第一作者: 张复兴, 男, 37 岁, 副教授; 研究方向: 有机合成。

2. $17^\circ \leq \theta \leq 25.02^\circ$ 范围内共收集 3603 个衍射点, 其中可观察衍射点 3101 个, 最终收敛偏差因子 $R_1 = 0.0680$, $wR_2 = 0.1304$, $\Delta\rho_{\max} = 2.227 \times 10^3 \text{ e} \cdot \text{nm}^{-3}$, $\Delta\rho_{\min} = -0.863 \times 10^3 \text{ e} \cdot \text{nm}^{-3}$ 。

选取一颗 $0.35 \times 0.30 \times 0.25 \text{ mm}$ 的晶体 (2), 在 $1.97^\circ \leq \theta \leq 25.02^\circ$ 范围内共收集 3974 个衍射点, 其中可观察衍射点 [$I > 2\sigma(I)$] 3372 个, 最终收敛偏差因子 $R_1 = 0.0268$, $wR_2 = 0.0674$, $\Delta\rho_{\max} = 0.436 \times 10^3 \text{ e} \cdot \text{nm}^{-3}$, $\Delta\rho_{\min} = -0.886 \times 10^3 \text{ e} \cdot \text{nm}^{-3}$ 。

2 结果与讨论

2.1 晶体结构描述

化合物的非氢原子坐标和等效温度因子列于表 1, 主要键长和键角分别列于表 2、3, 化合物的分子结构见图 1。

晶体结构 (1), μ -氧-双[三(邻氯苄基)锡],

$\text{C}_{42}\text{H}_{36}\text{Cl}_6\text{Sn}_2\text{O}$, $M_w = 1006.79$, 属三斜晶系, 空间群为 $P\bar{1}$, 晶体学参数: $a = 1.0195(5)$, $b = 1.0951(6)$, $c = 1.0986(6) \text{ nm}$, $\alpha = 118.250(7)^\circ$, $\beta = 104.923(7)^\circ$, $\gamma = 99.534(8)^\circ$, $V = 0.9827(9) \text{ nm}^3$, $Z = 1$, $D_x = 1.701 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$, $\mu(\text{Mo K}\alpha) = 17.12 \text{ cm}^{-1}$, $F(000) = 498$ 。

晶体结构 (2), μ -氧-双[三(邻氟苄基)锡], $\text{C}_{42}\text{H}_{36}\text{F}_6\text{Sn}_2\text{O}$, $M_w = 908.11$, 属三斜晶系, 空间群为 $P\bar{1}$, 晶体学参数: $a = 0.9635(3)$, $b = 1.0797(4)$, $c = 1.0852(3) \text{ nm}$, $\alpha = 105.807(5)^\circ$, $\beta = 90.551(6)^\circ$, $\gamma = 116.382(5)^\circ$, $V = 0.9619(6) \text{ nm}^3$, $Z = 2$, $D_x = 1.595 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$, $\mu(\text{Mo K}\alpha) = 13.62 \text{ cm}^{-1}$, $F(000) = 458$ 。

由图 1 和结构参数可知, 在化合物中, 通过氧原子桥联两个三(邻氯苄基)锡或三(邻氟苄基)锡, 可能由于锡联六个大位阻苄基空间位阻的原因, $\text{Sn}(1)\text{-O-Sn}(2)$ 键呈良好线性^[3], 关于氧原子对称,

表 1 原子坐标和热参数

Table 1 Atomic Coordinates ($\times 10^4$) and their Thermal Parameters ($\text{nm}^2 \times 10^5$)

<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U</i> _{eq}	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U</i> _{eq}
(1)							
Sn(1)	8324(1)	5552(1)	4771(1)	40(1)	C(9)	5833(9)	3101(11)
Cl(1)	9052(4)	4576(3)	1225(3)	66(1)	C(10)	5977(13)	1937(13)
Cl(2)	4849(4)	5320(4)	2925(5)	96(1)	C(11)	5310(18)	1650(17)
Cl(3)	6649(3)	8743(4)	6522(4)	75(1)	C(12)	4550(20)	2460(20)
O(1)	10000(0)	5000(0)	5000(0)	66(3)	C(13)	4402(17)	3534(19)
C(1)	8561(11)	6846(11)	3827(11)	40(2)	C(14)	5049(11)	3815(12)
C(2)	10000(10)	7171(10)	3792(10)	33(2)	C(15)	8375(13)	6866(11)
C(3)	11109(13)	8446(12)	4909(11)	53(3)	C(16)	9170(11)	8453(10)
C(4)	12505(14)	8757(15)	4967(14)	67(4)	C(17)	10620(11)	9074(13)
C(5)	12810(13)	7748(15)	3851(15)	62(3)	C(18)	11372(15)	10475(15)
C(6)	11686(12)	6459(13)	2691(13)	52(3)	C(19)	10658(14)	11374(14)
C(7)	10370(10)	6206(10)	2668(10)	35(2)	C(20)	9222(14)	10838(12)
C(8)	6528(14)	3505(15)	3426(14)	78(4)	C(21)	8490(11)	9396(11)
(2)							
Sn(1)	6789(1)	9875(1)	9345(1)	38(1)	C(9)	4745(5)	7565(4)
F(1)	9075(4)	12326(4)	7519(3)	120(1)	C(10)	3228(6)	7387(6)
F(2)	6391(5)	6533(4)	6904(4)	127(1)	C(11)	1947(8)	6028(9)
F(3)	10061(3)	10474(3)	11584(3)	76(1)	C(12)	2176(12)	4830(8)
O(1)	5000(0)	10000(0)	10000(0)	82(1)	C(13)	3658(13)	4951(8)
C(1)	8660(5)	12075(4)	9987(4)	60(1)	C(14)	4900(8)	6346(6)
C(2)	8279(4)	13056(4)	9479(4)	54(1)	C(15)	7095(4)	8403(4)
C(3)	7684(5)	13926(4)	10227(5)	70(1)	C(16)	7424(4)	8971(4)
C(4)	7338(7)	14840(5)	9795(8)	99(2)	C(17)	6259(5)	8521(5)
C(5)	7535(8)	14907(6)	8605(9)	106(2)	C(18)	6590(6)	9068(6)
C(6)	8099(7)	14082(7)	7776(6)	109(2)	C(19)	8083(7)	10082(6)
C(7)	8481(5)	13156(5)	8273(5)	73(1)	C(20)	9262(6)	10564(5)
C(8)	6124(4)	9033(4)	7264(3)	54(1)	C(21)	8896(4)	10004(4)

表 2 化合物的部分键长
Table 2 Parts of Bond Lengths (nm $\times 10$)

(1)							
Sn(1)-C(1)	2.132(9)	C(1)-C(2)	1.466(13)	C(9)-C(14)	1.329(15)	C(16)-C(21)	1.378(13)
Sn(1)-C(8)	2.162(12)	C(2)-C(3)	1.369(14)	C(9)-C(10)	1.398(18)	C(17)-C(18)	1.331(16)
Sn(1)-C(15)	2.128(9)	C(2)-C(7)	1.386(12)	C(10)-C(11)	1.46(2)	C(18)-C(19)	1.369(17)
Sn(1)-O(1)	1.9010(11)	C(3)-C(4)	1.384(17)	C(11)-C(12)	1.32(2)	C(19)-C(20)	1.349(16)
Cl(1)-C(7)	1.713(10)	C(4)-C(5)	1.360(18)	C(12)-C(13)	1.30(2)	C(20)-C(21)	1.362(15)
Cl(2)-C(14)	1.744(13)	C(5)-C(6)	1.392(16)	C(13)-C(14)	1.363(18)	Cl(3)-C(21)	1.731(11)
C(6)-C(7)	1.316(14)	C(15)-C(16)	1.490(14)	O(1)-Sn(1A)	1.9010(11)	C(8)-C(9)	1.466(16)
C(16)-C(17)	1.364(14)						
(2)							
Sn(1)-O(1)	1.9166(6)	C(1)-C(2)	1.490(5)	C(5)-C(6)	1.379(10)	C(13)-C(14)	1.387(10)
Sn(1)-C(1)	2.155(4)	C(8)-C(9)	1.486(5)	C(6)-C(7)	1.429(8)	C(16)-C(21)	1.382(5)
Sn(1)-C(8)	2.162(3)	C(15)-C(16)	1.491(5)	C(9)-C(14)	1.355(6)	C(16)-C(17)	1.395(5)
Sn(1)-C(15)	2.162(3)	C(2)-C(7)	1.352(6)	C(9)-C(10)	1.398(6)	C(17)-C(18)	1.384(6)
F(1)-C(7)	1.366(6)	C(2)-C(3)	1.393(6)	C(10)-C(11)	1.378(8)	C(18)-C(19)	1.373(7)
F(2)-C(14)	1.369(7)	C(3)-C(4)	1.359(7)	C(11)-C(12)	1.377(12)	C(19)-C(20)	1.371(7)
F(3)-C(21)	1.360(5)	C(4)-C(5)	1.324(10)	C(12)-C(13)	1.388(13)	C(20)-C(21)	1.372(6)

表 3 化合物的部分键角
Table 3 Parts of Bond Angles($^{\circ}$)

(1)					
Sn(1)-O(1)-Sn(1A)	180.0(0)	C(7)-C(6)-C(5)	121.8(11)	C(13)-C(14)-Cl(2)	114.8(12)
O(1)-Sn(1)-C(1)	105.8(3)	C(6)-C(7)-C(2)	123.2(10)	C(16)-C(15)-Sn(1)	111.4(6)
O(1)-Sn(1)-C(8)	105.3(4)	C(6)-C(7)-Cl(1)	119.1(8)	C(17)-C(16)-C(21)	115.5(9)
O(1)-Sn(1)-C(15)	106.1(3)	C(2)-C(7)-Cl(1)	117.7(7)	C(17)-C(16)-C(15)	122.2(10)
C(1)-Sn(1)-C(8)	116.7(4)	C(9)-C(8)-Sn(1)	112.6(8)	C(21)-C(16)-C(15)	122.3(10)
C(1)-Sn(1)-C(15)	110.3(4)	C(14)-C(9)-C(10)	114.6(13)	C(18)-C(17)-C(16)	123.8(11)
C(15)-Sn(1)-C(8)	111.8(5)	C(14)-C(9)-C(8)	123.5(12)	C(17)-C(18)-C(19)	118.9(12)
C(2)-C(1)-Sn(1)	111.3(6)	C(10)-C(9)-C(8)	121.9(13)	C(20)-C(19)-C(18)	120.4(12)
C(3)-C(2)-C(7)	114.4(9)	C(9)-C(10)-C(11)	118.6(14)	C(19)-C(20)-C(21)	119.0(11)
C(3)-C(2)-C(1)	122.2(9)	C(12)-C(11)-C(10)	119.3(14)	C(20)-C(21)-C(16)	122.3(10)
C(7)-C(2)-C(1)	123.4(9)	C(13)-C(12)-C(11)	122.5(19)	C(20)-C(21)-Cl(3)	117.8(9)
C(2)-C(3)-C(4)	124.1(11)	C(12)-C(13)-C(14)	117.9(16)	C(16)-C(21)-Cl(3)	119.8(8)
C(5)-C(4)-C(3)	118.8(12)	C(9)-C(14)-C(13)	127.1(14)	C(4)-C(5)-C(6)	117.8(12)
C(9)-C(14)-Cl(2)	118.1(10)				
(2)					
Sn(1)-O(1)-Sn(2)	180.0(0)	C(9)-C(8)-Sn(1)	112.4(2)	C(7)-C(2)-C(3)	115.9(4)
O(1)-Sn(1)-C(1)	104.96(12)	C(16)-C(15)-Sn(1)	112.3(2)	C(7)-C(2)-C(1)	122.5(4)
O(1)-Sn(1)-C(8)	104.75(11)	C(2)-C(7)-F(1)	117.3(4)	C(3)-C(2)-C(1)	121.6(4)
O(1)-Sn(1)-C(15)	104.17(10)	F(1)-C(7)-C(6)	120.0(5)	C(4)-C(3)-C(2)	123.0(5)
C(1)-Sn(1)-C(8)	112.82(16)	C(9)-C(14)-F(2)	116.7(5)	C(5)-C(4)-C(3)	119.8(6)
C(1)-Sn(1)-C(15)	114.78(14)	F(2)-C(14)-C(13)	118.9(6)	C(4)-C(5)-C(6)	122.1(6)
C(8)-Sn(1)-C(15)	113.96(14)	F(3)-C(21)-C(20)	118.2(4)	C(5)-C(6)-C(7)	116.5(5)
C(2)-C(1)-Sn(1)	111.5(2)	F(3)-C(21)-C(16)	117.3(3)	C(2)-C(7)-C(6)	122.7(5)

也由于苄基的空间效应和氯或氟原子位置不对称,使得苯环 C-C 键分别为 0.130~0.146nm 和 0.132~0.143nm 之间形成不对称六元环;三个

Sn-C 键长分别为 0.2132(9)、0.2128(9) 和 0.2162(12) nm 及 0.2155(4) 和 0.2162(3) nm, Sn-O 键只有 0.19010(11) nm 和 0.19166(6) nm, 比无取

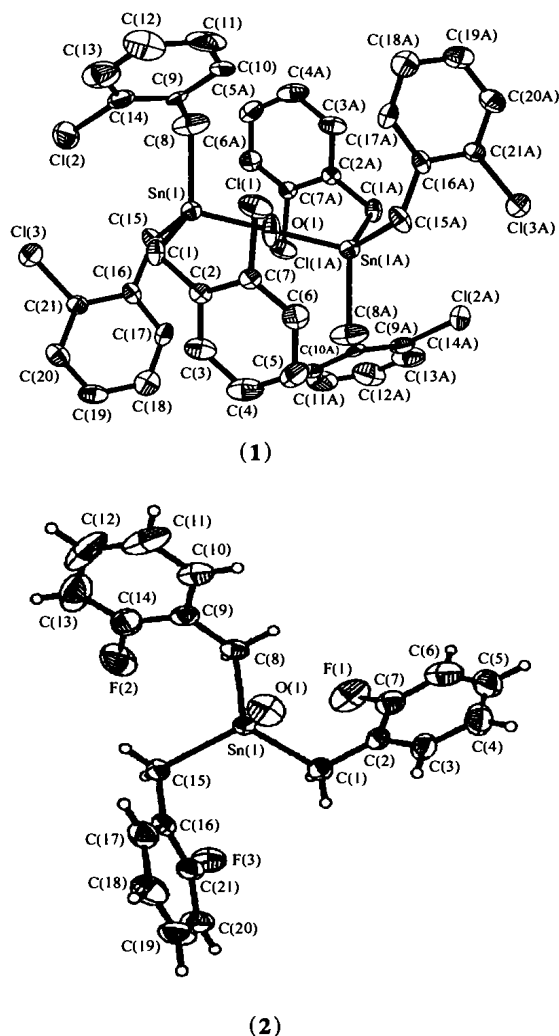


图 1 化合物的分子结构

Fig. 1 Structures of μ -oxygen-bis[tri(*o*-chlorobenzyl)tin] (1) and μ -oxygen-bis[tri(*o*-fluorobenzyl)tin] (2)

代苄基的键长 (0.192nm) 还短, 说明氯或氟在苯环的邻位对 Sn-O 键的拉电子作用使锡-氧键缩短^[3]。亚甲基碳与苯环的 Ph-C 键在 0.1466~0.1490nm 和 0.1486~0.1491nm 之间, 且与中心锡原子之间所构成的键角 $\angle$ C-Sn(1)-O(1) 分别为 $105.3^\circ \sim 106.1^\circ$ 和 $104.17(10)^\circ \sim 104.96(12)^\circ$, 偏小于正四面体键角 $3^\circ \sim 4^\circ$ 和 $4^\circ \sim 5^\circ$; 与中心锡原子之间所构成的其它键角 $\angle$ C-Sn-C 在晶体 (1) 中为 $116.7(4)^\circ$, $110.3(4)^\circ$ 和 $111.8(5)^\circ$, 比正四面体键角偏大 $1^\circ \sim 7^\circ$, 在晶体 (2) 中为 $112.82(16)^\circ$, $114.78(14)^\circ$ 和 $113.96(14)^\circ$, 比正四面体键角偏大 $3^\circ \sim 6^\circ$ 。这种空间排列导致亚甲基碳原子间的非键距离不相等, 在晶体 (1) 中, C(1)···C(8) 0.395, C(1)···C(15) 0.349,

C(8)···C(15) 0.382nm, O···C(1) 或 C(8) 或 C(15) 的距离分别为 0.308, 0.345 和 0.306nm; 锡原子与亚甲基相连的苯环碳 C(2)、C(9) 和 C(16) 的非键距离分别为 0.314、0.335 和 0.314nm, C(2)、C(9) 和 C(16) 间的相互距离更大, C(2)···C(9) 为 0.529、C(2)···C(16) 为 0.412 和 C(9)···C(16) 为 0.624 nm。在晶体 (2) 中, C(1)···C(8) 0.3639, C(1)···C(15) 0.3660, C(8)···C(15) 0.3620nm, O···C(1) 或 C(8) 或 C(15) 的距离分别为 0.3270, 0.3220 和 0.3190nm。锡原子与亚甲基相连的苯环碳 C(2)、C(9) 和 C(16) 的非键距离分别为 0.306、0.308 和 0.304nm, C(2)、C(9) 和 C(16) 间的相互距离更大, C(2)···C(9) 为 0.530、C(2)···C(16) 为 0.528 和 C(9)···C(16) 为 0.529nm。因此, 这些键参数决定了中心锡与亚甲基碳原子构成畸型四面体, 并组成一个包裹了中心畸型四面体且与之交错的外畸型四面体。

(1) CCDC: 184751, (2) CCDC: 187572。



图 2 化合物 (1) 的前沿分子轨道示意图

Fig. 2 Frontier molecular orbitals of compound (1)

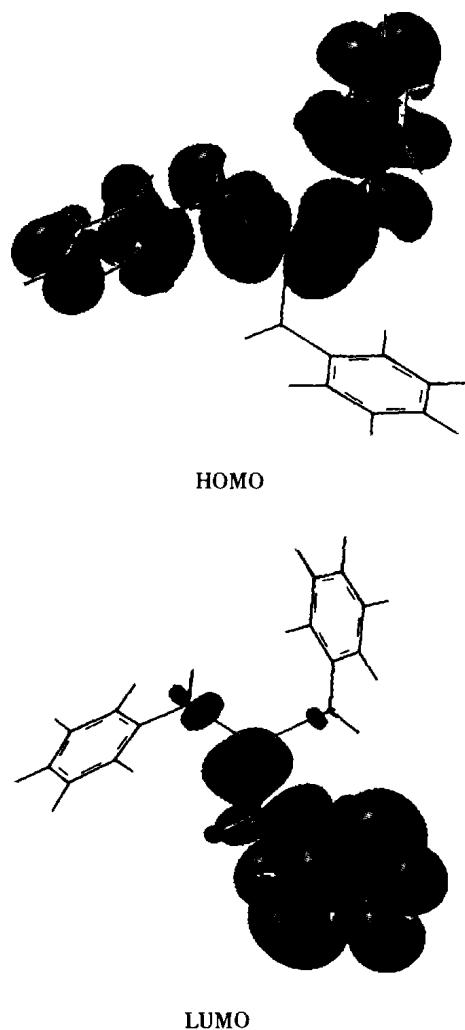


图 3 化合物(2)的前沿分子轨道示意图

Fig. 3 Frontier molecular orbitals of compound(2)

2.2 化合物的前沿分子轨道组成特征

为探索标题化合物的电子结构与成键特征, 将晶体结构位置坐标用于 Gaussian 98W^[6]程序, 在 HF/lanl2dz 基组水对化合物分子轨道进行分析, 结果如图 2、图 3 所示。显示出化合物的成键特征: (1) 前沿分子轨道中苯环均具有良好的共轭离域性, 对

整个轨道的贡献大于 20%; (2) 前沿占有分子轨道中锡原子 (~5%), 在较深的分子轨道中电子云有较大差异; (3) 锡链氧原子的贡献大于 29%; (4) 亚甲基碳原子对分子轨道的贡献均较大 (26%), 说明亚甲基碳与苯环之间有电子离域, 从键长缩短和图 2、图 3 也证实这一结论; 比较 HOMO 与 LUMO 的各类原子轨道成份, 可以看出, 当电子从 HOMO 激发到 LUMO 轨道时, 主要是氧原子、苯环和亚甲基碳的电子云向另一苯环转移, 且 (1) 还通过苯环与 Cl 的 p 轨道向氯原子转移。

参 考 文 献

- [1] Schürmann M., Schmiedgen R., Huber F., Silverstri A., Ruisi G., Paulsen A. B., Barbieri R. *J. Organomet. Chem.*, **1999**, **584**, 103.
- [2] XIE Qing-Lan(谢庆兰), XU Xiao-Hua(徐效华), ZHANG Dian-Kun(张殿坤) *Huaxue Xuebao(Acta Chimica Sinica)*, **1992**, **50**, 508.
- [3] FENG Yong-Lan(冯泳兰), KUANG Dai-Zhi(邝代治) *Wuji Huaxue Xuebao(Chinese J. Inorg. Chem.)*, **1998**, **14**(2), 143.
- [4] KUANG Dai-Zhi(邝代治), FENG Yong-Lan(冯泳兰) *Wuji Huaxue Xuebao(Chinese J. Inorg. Chem.)*, **2000**, **16**(4), 603.
- [5] ZHANG Fu-Xing(张复兴), KUANG Dai-Zhi(邝代治), FENG Yong-Lan(冯泳兰), WANG Jian-Qiu(王剑秋), XU Zhi-Feng(许志锋) *Wuji Huaxue Xuebao(Chinese J. Inorg. Chem.)*, **2002**, **18**(8), 854.
- [6] Lo Kong Mun, NIU Jing-Yang(牛景扬), WANG Jing-Ping(王敬平) *Wuji Huaxue Xuebao(Chinese J. Inorg. Chem.)*, **2000**, **16**(5), 763.
- [7] Aeleen F., Michael J. F. *Gaussian 98 User's Reference*, Gaussian, Inc., Carnegie Office Park, Bldg. 6 Pittsburgh, PA15106 USA.

Studies on Synthese, Crystal Structures and Quantum Chemistry of the μ -Oxygen-Bis[Tri(*o*-Chlorobenzyl)tin] and μ -Oxygen-Bis[Tri(*o*-Fluorobenzyl)tin]

ZHANG Fu-Xing KUANG Dai-Zhi* FENG Yong-Lan WANG Jian-Qiu XU Zhi-Feng

(Department of Chemistry, Hengyang Normal University, Hengyang 421008)

The tri(*o*-chlorobenzyl) tin chloride as well as the tri(*o*-fluorobenzyl) tin was treated with aqueous solution of NaOH to formed the μ -oxygen-bis[tri(*o*-chlorobenzyl)tin] and μ -oxygen-bis[tri(*o*-fluorobenzyl)tin], respectively. The crystal and molecular structures of compound were determined by X-ray diffraction. The crystal(1) belongs to triclinic space group $P\bar{1}$ with $a = 1.0195(5)$, $b = 1.0951(6)$, $c = 1.0986(6)$ nm, $\alpha = 118.250(7)$, $\beta = 104.923(7)$, $\gamma = 99.534(8)^\circ$, $V = 0.9827(9)$ nm³, $Z = 1$, $D_x = 1.701\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$, $\mu(\text{Mo } K\alpha) = 17.12\text{cm}^{-1}$, $F(000) = 498$, $R_1 = 0.0680$, $wR_2 = 0.13014$. The crystal(2) are triclinic, space group $P\bar{1}$ with $a = 0.9635(3)$, $b = 1.0797(4)$, $c = 1.0852(3)$ nm, $\alpha = 105.807(5)$, $\beta = 90.551(6)$, $\gamma = 116.382(5)^\circ$, $V = 0.9619(6)$ nm³, $Z = 2$, $D_x = 1.595\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$, $\mu(\text{Mo } K\alpha) = 13.62\text{cm}^{-1}$, $F(000) = 458$, $R_1 = 0.0268$, $wR_2 = 0.0674$. The bond lengths of Sn-C is $0.2128(9) \sim 0.2162(12)$ nm and $0.2155(4) \sim 0.2162(3)$ nm, and the Sn-O is 0.1901nm and $0.19166(6)$ nm, respectively. The bond angle Sn-O-Sn is $180.0(0)^\circ$. The tin atom has a distorted tetrahedral geometry. The composition characteristics of some frontier molecular orbitals have been investigated by means of G98W package and taking Lanl2dz basis set. (1) CCDC: 184751, (2) CCDC: 187572.

Keywords: μ -oxygen-bis[tri(*o*-chlorobenzyl)tin] μ -oxygen-bis[tri(*o*-fulorobenzyl)tin]
crystal structure