

研究简报

三邻氯苄基和三邻氟苄基锡吡咯烷氨荒酸酯的合成及晶体结构

尹汉东* 王传华 马春林

(聊城大学化学化工学院, 聊城 252059)

关键词: 三邻氯(氟)苄基锡 吡咯烷氨荒酸酯 合成 晶体结构
 分类号: O614.43*2 O613.4

自从 Brown^[1]发现三苯基锡乙酸酯具有抗癌活性以来,该领域的研究引起了人们的极大关注,迄今为止已相继报道了许多具有较强生物活性的烃基锡羧酸酯、磷酸酯、二硫代磷酸酯^[2-5]的合成和结构研究。近年来,我们合成了一系列具有较强的抗癌活性烃基锡的氨荒酸衍生物^[6-8],但卤代烃基锡氨荒酸衍生物的合成、结构和生物活性研究尚未见文献报道。Crowe 等^[9]认为,有机锡配合物的抗癌活性可能取决于在形成 Sn-DNA 之前配合物水解释放出 R_nSn^{2+} 的能力,而这种能力又与烃基的结构类型、烃基的空间和电子效应、配体和锡原子的成键方式以及键长有关。为进一步探讨含卤原子烃基锡氨荒酸衍生物的生物活性以及卤原子对成键方式和结构类型的影响,我们合成了新型的含卤原子有机锡配合物三邻氯苄基锡吡咯烷氨荒酸酯和三邻氟苄基锡吡咯烷氨荒酸酯。通过元素分析、红外光谱和核磁共振氢谱对其进行了表征。并利用 X-射线单晶衍射测定了它们的晶体结构。

1 实验部分

1.1 仪器和试剂

XT-4 型显微熔点仪(温度计未经校正), PE-2400 II 型元素分析仪(锡含量采用重量分析法测定), Nicolet-460 型红外光谱仪(KBr 压片), Mercury Plus-400 型核磁共振仪(TMS 为内标, $CDCl_3$ 为溶剂), Bruker Smart-1000 CCD X-射线衍射仪。

吡咯烷氨荒酸钠按文献^[10]合成。其他试剂均为

分析纯,溶剂 CH_2Cl_2 经干燥处理后使用。

1.2 配合物的合成

1.2.1 三邻氯苄基锡吡咯烷氨荒酸酯的合成

在 Schlenk 管中加入 1.2mmol 吡咯烷氨荒酸钠, 1.0mmol 三邻氯苄基氯化锡和 20mL CH_2Cl_2 , 30℃ 下搅拌 10h, 过滤, 滤液减压浓缩至 3~5mL, 加入适量乙醚或石油醚, 低温静置, 析出白色固体, 粗产品经二氯甲烷-乙醚重结晶得 0.56g 无色晶体, 产率 87%, m. p. 123~125℃。 1H NMR($CDCl_3$, 400MHz) δ : 6.69~7.28(12H, m, ArH), 3.66(4H, t, $J = 11.4$ Hz, NCH_2), 2.78(6H, t, $J_{Sn-H} = 68.6$ Hz, $ArCH_2Sn$), 1.56(4H, t, $J = 11.4$ Hz, CH_2CH_2); IR (KBr) ν : 3048(w, Ph-H), 2988, 2872(m, C-H), 1478(s, C-N), 1153, 1007(s, CS₂), 554(m, Sn-C), 448(s, Sn-S) cm^{-1} ; 元素分析: 按 $C_{26}H_{26}Cl_3NS_2Sn$ 的计算值(%): C 48.67, H 4.08, N 2.18, S 9.99, Sn 18.50; 实验值(%): C 48.91, H 4.15, N 2.16, S 9.79, Sn 18.74。

1.2.2 三邻氟苄基锡吡咯烷氨荒酸酯的合成

在 Schlenk 管中加入 1.2mmol 吡咯烷氨荒酸钠, 1.0mmol 三邻氟苄基氯化锡和 20mL CH_2Cl_2 , 30℃ 下搅拌 10h, 过滤, 滤液减压浓缩至 3~5mL, 加入适量石油醚, 低温静置, 析出白色固体, 粗产品经二氯甲烷-乙醚重结晶得 0.48g 无色晶体, 产率 81%, m. p. 136~137℃。 1H NMR($CDCl_3$, 400MHz) δ : 6.94~7.02(12H, m, ArH), 3.90(4H, t, $J = 11.3$ Hz, NCH_2), 2.59(6H, t, $J_{Sn-H} = 65.4$ Hz, $ArCH_2Sn$),

收稿日期: 2003-05-16。收修改稿日期: 2003-07-15。

国家自然科学基金资助项目(No. 20271025), 教育部骨干教师基金和山东省自然科学基金资助课题(No. Z2001B02)。

* 通讯联系人。E-mail: handongyin@sohu.com

第一作者: 尹汉东, 男, 46 岁, 教授; 研究方向: 金属有机化学。

1. 57(4H, t, $J = 11.1$ Hz, CH_2CH_2); IR(KBr) ν : 3061(w, Ph-H), 2987, 2866(m, C-H), 1492(s, C-N), 1148, 1014(s, CS_2), 548(m, Sn-C), 451(s, Sn-S) cm^{-1} ; 元素分析: 按 $\text{C}_{26}\text{H}_{26}\text{F}_3\text{NS}_2\text{Sn}$ 的计算值(%): C 52.72, H 4.42, N 2.36, S 10.83, Sn 20.04; 实验值(%): C 52.99, H 4.50, N 2.38, S 10.95, Sn 20.06。

1.3 配合物 1 和 2 的晶体测定

取配合物 1 的 $0.40\text{mm} \times 0.35\text{mm} \times 0.30\text{mm}$ 无色晶体置于 Bruker Smart 1000 CCD 型 X-射线单晶衍射仪上, 用石墨单色化的 $\text{MoK}\alpha$ 辐射($\lambda = 0.071073\text{nm}$), 在室温($298 \pm 2\text{K}$)下, 以 $\omega/2\theta$ 扫描方式, 在 $2.07^\circ \leq \theta \leq 26.37^\circ$ 范围内收集 7938 强反射数据。其中独立衍射点 5416 个($R_{\text{int}} = 0.0170$), 可观察衍射点 4472 个($I > 2\sigma(I)$)。晶体结构由直接法解出, 非氢原子的坐标是在以后的数轮差值 Fourier 合成中陆续确定的, 对全部非氢原子的坐标及各向异性温度因子用 SHELX-97 程序以最小二乘法对结构进行精修。最终一致性因子为 $R_1 = 0.0282$, $wR_2 = 0.0617$ 。CCDC: 213679。

取配合物 2 的 $0.30\text{mm} \times 0.19\text{mm} \times 0.11\text{mm}$ 无色晶体, 放置在 Bruker Smart 1000 CCD 型 X-射线单晶衍射仪上, 用石墨单色化的 $\text{MoK}\alpha$ 辐射($\lambda = 0.071073\text{nm}$), 在 $2.22^\circ \leq \theta \leq 25.04^\circ$ 范围内, 以 $\omega/2\theta$ 扫描方式, 在室温($298 \pm 2\text{K}$)下共收集 5936 强反射数据。其中独立衍射点 4168 个($R_{\text{int}} = 0.0828$), 可观察衍射点 1583 个($I > 2\sigma(I)$)。晶体结构由直接法解出, 非氢原子的坐标是在以后的数轮差值 Fourier 合成中陆续确定的, 对全部非氢原子的坐标及各向异性参数用 SHELX-97 程序以最小二乘法对 F^2 进行精修。最终一致性因子为 $R_1 = 0.0467$, $wR_2 = 0.0788$ 。CCDC: 213680。

2 结果与讨论

2.1 配合物 1 和 2 的红外光谱

配合物 1 和 2 的碳硫键的不对称伸缩振动($\nu_{\text{as}}^{\text{CS}}$)和对称伸缩振动($\nu_{\text{s}}^{\text{CS}}$)吸收分别出现在 1153cm^{-1} , 1148cm^{-1} 和 1007cm^{-1} , 1014cm^{-1} , 其 $\Delta\nu(\nu_{\text{as}}^{\text{CS}} - \nu_{\text{s}}^{\text{CS}})$ 值分别为 146cm^{-1} 和 134cm^{-1} , 与配合物 $\text{R}_2\text{NCS}_2\text{R}^{[11]}$ 相比, 其 $\Delta\nu$ 明显减小, 说明配合物中碳硫双键和碳硫单键发生了一定程度的平均化, 即碳硫双键的硫原子也与锡原子发生了配位作用, 由此可以推断, 配合物中吡咯烷氨荒酸基应是以双齿形

式与锡原子配位。但与相应原料吡咯烷氨荒酸盐相比^[12], 其 $\Delta\nu$ 值明显增大, 这说明配合物中吡咯烷氨荒酸基是以非均性的双齿形式与锡原子配位^[13], 生成了五配位的有机锡配合物, 该结果与 X-射线单晶衍射测试结果是一致的。

2.2 核磁共振氢谱

^1H NMR 的化学位移表明, 配合物 1 和 2 芳环上的质子在 6.69~7.28 间呈现多重峰; 吡咯烷氨荒酸基中与氮原子相连的亚甲基上的质子分别在 3.66 和 3.90 处有吸收; 与锡原子相连的邻氯和邻氟苄基的亚甲基氢 δH 分别为 2.78 和 2.59, 均由一个正常的单峰和一对小卫星峰组成, 这是由于 ^{119}Sn -H 偶合的结果, 其偶合常数分别为 68.6 Hz 和 65.4 Hz。

2.3 配合物的晶体结构

晶体结构分析表明, 配合物 1 为三斜晶系, 空间群 $P\bar{1}$, $a = 0.9076(4)\text{nm}$, $b = 1.0663(5)\text{nm}$, $c = 1.5193(7)\text{nm}$, $\alpha = 75.811(6)^\circ$, $\beta = 89.344(6)^\circ$, $\gamma = 72.665(6)^\circ$, $Z = 2$, $V = 1.3577(11)\text{nm}^3$, $D_c = 1.569\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$, $\mu = 1.406\text{mm}^{-1}$, $F(000) = 644$ 。配合物 2 为单斜晶系, 空间群 $P2_1/c$, $a = 1.355(2)\text{nm}$, $b = 1.0143(16)\text{nm}$, $c = 1.986(3)\text{nm}$, $\beta = 109.94(2)^\circ$, $Z = 4$, $V = 2.565(7)\text{nm}^3$, $D_c = 1.539\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$, $\mu = 1.195\text{mm}^{-1}$, $F(000) = 1200$ 。配合物 1 的晶体结构见图 1, 分子在晶胞中的排列见图 2; 配合物 2 的晶体结构见图 3, 分子在晶胞中的排列见图 4。配合物 1 和 2 的部分键长和键角分别列于表 1 和表 2。

配合物 1 和 2 均为单体结构, 中心锡原子为畸变的三角双锥构型。在配合物 1 锡原子的配位圈内, 锡原子与 3 个邻氯苄基的亚甲基碳原子间

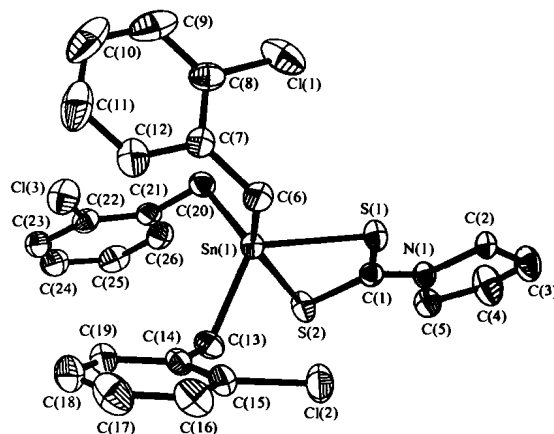


图 1 配合物 1 的分子结构图

Fig. 1 Molecular structure of compound 1

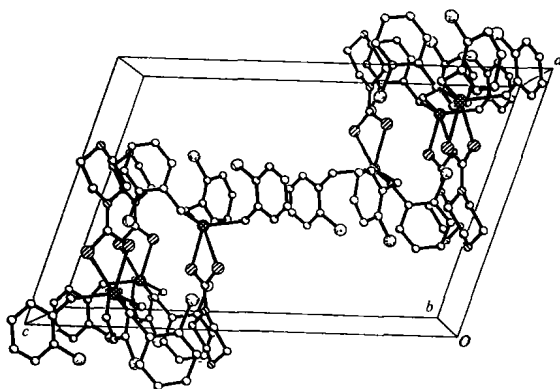


图 2 配合物 1 的晶胞图

Fig. 2 Projection of the unit cell of compound 1

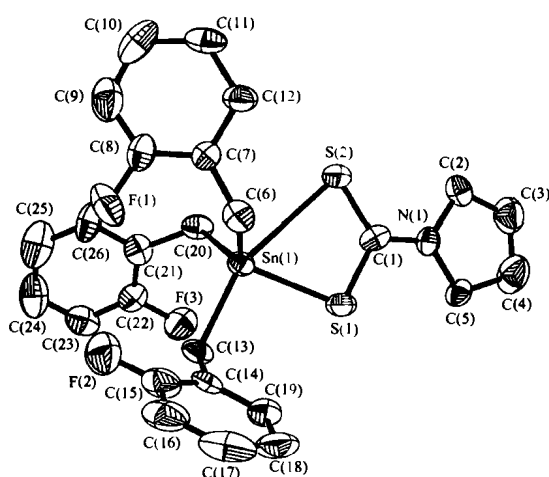


图 3 配合物 2 的分子结构图

Fig. 3 Molecular structure of compound 2

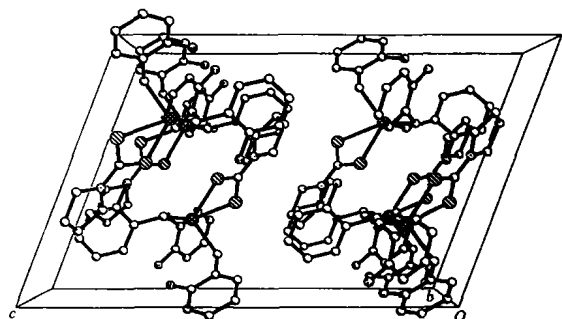


图 4 配合物 2 的晶胞图

Fig. 4 Projection of the unit cell of compound 2

比配合物 2 的 Sn-C 键 [Sn(1)-C(6) 0.2161(8) nm, Sn(1)-C(13) 0.2182(8) nm, Sn(1)-C(20) 0.2153(9) nm] 略长, 这可能与吡咯烷氨基酸配体和锡原子配位后, 配合物 1 苄基上的邻位氯原子比配合物 2 的氟原子具有更大的空间排斥作用有关。配合物 1 和 2 中 Sn(1) 与 S(1) 之间的距离分别为 0.2466(4) nm 和 0.2460(4) nm, 比配合物三苄基锡吗啉氨基酸酯^[14]和三苄基锡哌啶氨基酸酯^[15]的 Sn(1)-S(1) 键 [0.2487(2) nm 和 0.2481(6) nm] 略短, 这可能主要是苄基上的氯(氟)原子的具有较强的吸电效应的缘故。配合物 1 和 2 的 Sn(1)-S(2) 分别为 0.3079(8) nm 和 0.3035(4) nm, 配合物 1 的 Sn(1)-S(2) 键稍长, 与配合物三苄基锡吗啉氨基酸酯^[14]和三苄基锡哌啶氨基酸酯^[15]的 Sn(1)-S(2) 键的键长 [0.3053(1) nm 和 0.3027(6) nm] 接近, 明显短于配合物 Me₃SnS₂CNMe₂^[16]的 Sn(1)-S(2) (0.316 nm), 但其值远小于这两种原子的范德华半径之和 (0.4 nm), 说明在配合物 1 和 2 中, 吡咯烷氨基酸基是以非均性

的距离分别为: Sn(1)-C(6) 0.2191(3) nm, Sn(1)-C(13) 0.2166(3) nm 和 Sn(1)-C(20) 0.2164(3) nm,

表 1 配合物 1 的主要键长和键角

Table 1 Selected Bond Distances(nm) and Angles(°) of Complex 1

Sn(1)-C(20)	0.2164(3)	Cl(2)-C(15)	0.1744(3)	N(1)-C(5)	0.1475(4)
Sn(1)-C(13)	0.2166(3)	Cl(3)-C(22)	0.1748(3)	C(2)-C(3)	0.1510(4)
Sn(1)-C(6)	0.2191(3)	S(1)-C(1)	0.1752(3)	C(7)-C(8)	0.1379(4)
Sn(1)-S(1)	0.2466(4)	S(2)-C(1)	0.1683(3)	C(6)-C(7)	0.1485(4)
Sn(1)-S(2)	0.3079(8)	N(1)-C(1)	0.1327(3)		
Cl(1)-C(8)	0.1740(4)	N(1)-C(2)	0.1464(4)		
C(20)-Sn(1)-C(13)	116.8(1)	C(13)-Sn(1)-S(2)	80.3(3)	N(1)-C(1)-S(1)	116.0(2)
C(20)-Sn(1)-C(6)	109.9(8)	C(7)-C(6)-Sn(1)	115.1(8)	C(1)-S(1)-Sn(1)	96.6(9)
C(13)-Sn(1)-C(6)	107.7(5)	C(7)-C(8)-Cl(1)	119.5(3)	C(1)-S(2)-Sn(1)	77.9(9)
C(20)-Sn(1)-S(1)	108.0(1)	C(6)-Sn(1)-S(2)	156.8(9)	C(14)-C(13)-Sn(1)	112.4(2)
C(13)-Sn(1)-S(1)	118.1(8)	S(1)-Sn(1)-S(2)	64.1(3)	C(21)-C(20)-Sn(1)	115.1(3)
C(6)-Sn(1)-S(1)	93.4(6)	S(2)-C(1)-S(1)	121.0(1)	N(1)-C(2)-C(3)	103.5(3)
C(20)-Sn(1)-S(2)	83.8(5)	N(1)-C(1)-S(2)	123.0(2)		

表 2 配合物 2 的主要键长和键角

Table 2 Selected Bond Distances (nm) and Angles (°) of Complex 2

Sn(1)-C(6)	0. 2161(8)	F(2)-C(15)	0. 1332(13)	N(1)-C(2)	0. 1476(10)
Sn(1)-C(13)	0. 2182(8)	C(7)-C(8)	0. 1464(11)	N(1)-C(5)	0. 1424(10)
Sn(1)-C(20)	0. 2153(9)	F(3)-C(22)	0. 1363(11)	C(2)-C(3)	0. 1480(13)
Sn(1)-S(1)	0. 2460(4)	S(1)-C(1)	0. 1749(10)	C(7)-C(8)	0. 1356(12)
Sn(1)-S(2)	0. 3035(4)	S(2)-C(1)	0. 1683(9)		
F(1)-C(8)	0. 1331(12)	N(1)-C(1)	0. 1318(10)		
C(20)-Sn(1)-C(13)	105. 7(3)	C(13)-Sn(1)-S(2)	158. 3(3)	N(1)-C(1)-S(1)	116. 7(7)
C(20)-Sn(1)-C(6)	119. 7(4)	C(7)-C(6)-Sn(1)	114. 8(6)	C(1)-S(1)-Sn(1)	96. 8(3)
C(13)-Sn(1)-C(6)	106. 8(4)	C(9)-C(8)-F(1)	114. 8(12)	C(1)-S(2)-Sn(1)	79. 2(4)
C(20)-Sn(1)-S(1)	114. 2(3)	C(6)-Sn(1)-S(2)	85. 6(3)	C(14)-C(13)-Sn(1)	113. 5(5)
C(13)-Sn(1)-S(1)	94. 1(3)	S(1)-Sn(1)-S(2)	64. 3(7)	C(21)-C(20)-Sn(1)	114. 3(6)
C(6)-Sn(1)-S(1)	112. 4(3)	S(2)-C(1)-S(1)	119. 6(5)	N(1)-C(2)-C(3)	102. 4(9)
C(20)-Sn(1)-S(2)	82. 1(3)	N(1)-C(1)-S(2)	123. 7(8)		

的双齿形式与锡原子键合, 生成五配位的有机锡配合物。此外, 在配合物 1 和 2 的 CS_2 基团中, 较短的 C-S 键 [S(2)-C(1) 均为 0. 1683 nm] 和较长的 Sn-S 键 [Sn(1)-S(2) 0. 3079(8) nm, 0. 3035(4) nm] 相对应, 这说明 S(2)-C(1) 是以双键形式存在。

在配合物 1 中, 锡原子周围的配位环境是: S(1), C(20), C(13) 处于赤道位置, 而 S(2) 和 C(6) 处于轴向位置, 形成了三角双锥结构, 由于吡咯烷氮羧酸配体是以双齿形式与锡原子配位, 使得分别处于三角双锥轴向位置和赤道位置的两个硫原子之间的夹角 [S(1)-Sn(1)-S(2)] 仅为 64. 1(3)°, 与 90° 有较大偏离, 从而导致硫原子不可能处于标准三角双锥的顶点位置, 而 C(6)-Sn(1)-S(2) 的键角也仅为 156. 8(9)° 而不是 180°。并且处于赤道位置上的苄基的两个亚甲基碳原子以及硫原子之间的三个夹角 [C(20)-Sn(1)-C(13) 116. 8(1)°, C(13)-Sn(1)-S(1) 118. 1(8)°, C(20)-Sn(1)-S(1) 108. 0(1)°] 之和为 342. 9°, 与预期的 360° 的偏离了 17. 1°, 说明 C(20), C(13), S(1) 和 Sn(1) 没有处于一个平面上。此外, 处于三角双锥轴向位置的 C(6) 原子与处于赤道位置的两个苄基的亚甲基碳原子以及硫原子之间的夹角分别为: C(20)-Sn(1)-C(6) 109. 9(8)°, C(13)-Sn(1)-C(6) 107. 7(5)°, C(6)-Sn(1)-S(1) 93. 4(6)°, 所有键角均大于 90°, 而处于三角双锥轴向位置的 S(2) 原子与处于赤道位置的两个苄基的亚甲基碳原子以及硫原子之间的夹角则均明显小于 90° [C(20)-Sn(1)-S(2) 83. 8(5)°, C(13)-Sn(1)-S(2) 80. 3(3)°, S(1)-Sn(1)-S(2) 64. 1(3)°], 由此可见, 该配合物中锡原子为严重畸变的三角双锥构型。配合物 2 锡原子的

配位几何构型与配合物 1 中锡原子的构型类似, 也是畸变的三角双锥构型, 但其畸变程度略小于配合物 1, 这可能与苄基上的邻位氟原子比氯原子具有较小的空间作用有关。

参 考 文 献

- [1] Brown N. M. *Tin-based Antitumour Drugs*, Springer-verlag: Berlin, 1990, p69.
- [2] Gielen M., Boualam M., Mahieu B., Tiekink E. B. *Appl. Organomet. Chem.*, 1994, 8, 19.
- [3] YIN Han-Dong (尹汉东), ZHANG Ru-Fen (张如芬), MA Cun-Lin (马春林) *Yingyong Huaxue (Chin. Appl. Chem.)*, 1998, 15(6), 53.
- [4] YIN Han-Dong (尹汉东), ZHANG Ru-Fen (张如芬), MA Cun-Lin (马春林) *Youji Huaxue (Chin. J. Org. Chem.)*, 2000, 20, 108.
- [5] XIE Qing-Lan (谢庆兰), ZHU Ying-Huai (朱应怀), YANG Zhi-Qiang (杨志强) *Hecheng Huaxue (Chin. J. Syn. Chem.)*, 1996, 4, 233.
- [6] YIN Han-Dong (尹汉东), ZHANG Ru-Fen (张如芬), MA Cun-Lin (马春林) *Youji Huaxue (Chin. J. Org. Chem.)*, 1999, 19, 413.
- [7] YIN Han-Dong (尹汉东), WANG Chuan-Hua (王传华), ZHANG Ru-Fen (张如芬), MA Cun-Lin (马春林) *Wuji Huaxue Xuebao (Chin. J. Inorg. Chem.)*, 2000, 16, 619.
- [8] YIN Han-Dong (尹汉东), MA Cun-Lin (马春林) *Yingyong Huaxue (Chin. Appl. Chem.)*, 2000, 17, 375.
- [9] Crowe A. J., Smith P. J., Atassi G. *Inorg. Chim. Acta*, 1984, 93, 179.
- [10] Nair G. G. R., Rao V. R. S., Murthy A. R. V. *Mikrochim.*

- Acta*, **1961**, 741.
- [11] Bonozi F. *J. Organomet. Chem.*, **1967**, **9**, 95.
- [12] YIN Han-Dong(尹汉东), ZHANG Ru-Fen(张如芬), MA Cun-Lin(马春林) *Liaocheng Shiyuan Xuebao(J. Liaocheng Teachers University, Natural Science)*, **1999**, **12**, 38.
- [13] YIN Han-Dong(尹汉东), WANG Yong(王 勇), ZHANG Ru-Fen(张如芬), MA Cun-Lin(马春林) *Gaodeng Xuexiao Huaxue Xuebao(Chem. J. Chin. Univ.)*, **2000**, **21**, 1231.
- [14] YIN Han-Dong(尹汉东), WANG Chuan-Hua(王传华), WANG Yong(王 勇), MA Cun-Lin(马春林), ZHANG Ru-Fen(张如芬) *Wuji Huaxue Xuebao(Chin. J. Inorg. Chem.)*, **2002**, **18**, 347.
- [15] YIN Han-Dong(尹汉东), WANG Chuan-Hua(王传华), WANG Yong(王 勇), MA Cun-Lin(马春林), ZHANG Ru-Fen(张如芬) *Yuji Huaxue(Chin. J. Org. Chem.)*, **2002**, **22**, 183.
- [16] Sheldrick G. M., Sheldrick W. S. *J. Chem. Soc. Sec., A*, **1970**, 490.

Synthesis and Crystal Structure of Tri(*o*-chlorobenzyl)tin Dithiotetrahydropyrrolocarbamate and Tri(*o*-fluorobenzyl)tin Dithiotetrahydropyrrolocarbamate

YIN Han-Don* WANG Chuan-Hua MA Chun-Lin
(Department of Chemistry, Liaocheng University, Liaocheng 252059)

Tri(*o*-chlorobenzyl)tin dithiotetrahydropyrrolocarbamate **1** and tri(*o*-fluorobenzyl)tin dithiotetrahydropyrrolocarbamate **2** were synthesized. Their structures were characterized by elementary analysis, IR and ¹H NMR and the crystal structures were determined by X-ray single crystal diffraction. The crystal **1** belongs to triclinic with space group $P\bar{1}$, $a = 0.9076(4)$ nm, $b = 1.0663(5)$ nm, $c = 1.5193(7)$ nm, $\alpha = 75.811(6)^\circ$, $\beta = 89.344(6)^\circ$, $\gamma = 72.665(6)^\circ$, $Z = 2$, $V = 1.3577(11)$ nm³, $D_c = 1.569$ g · cm⁻³, $\mu = 1.406$ mm⁻¹, $F(000) = 644$, $R = 0.0282$, $wR = 0.0617$. The crystal **2** belongs to monoclinic with space group $P2_1/c$, $a = 1.355(2)$ nm, $b = 1.0143(16)$ nm, $c = 1.986(3)$ nm, $\beta = 109.94(2)^\circ$, $Z = 4$, $V = 2.565(7)$ nm³, $D_c = 1.539$ g · cm⁻³, $\mu = 1.195$ mm⁻¹, $F(000) = 1200$, $R = 0.0467$, $wR = 0.0788$. In the crystals of **1** and **2**, the structures consist of discrete molecules containing five-coordinate tin atom in a distorted trigonal bipyramidal configuration. CCDC: **1**, 213679; **2**, 213680.

Keywords: tri(*o*-chlorobenzyl)tin tri(*o*-fluorobenzyl)tin dithiotetrahydropyrrolocarbamate
synthesis crystal structure