Zeitschrift für Anorganische und
Allgemeine Chemie

**[BeCl₂(Ph₂PCH₂PPh₂)₂] - ein Donor-Akzeptorkomplex des
Berylliums mit dem Bis(diphenylphosphino)methan-
Liganden**

Journal:	<i>Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie</i>
Manuscript ID:	zaac.201000172.R1
Wiley - Manuscript type:	Article
Date Submitted by the Author:	30-Apr-2010
Complete List of Authors:	Dehnicke, Kurt; Universitaet Marburg, Chemistry Frenking, Gernot; Universitaet Marburg, Chemistry Holzmann, Nicole; Universitaet Marburg, Chemistry Neumüller, Bernhard; Universitaet Marburg, Chemistry
Keywords:	Beryllium, Bis(diphenylphosphino)methane, Donor-acceptor complex, X-ray diffraction, IR spectra, DFT calucations

(a)

(b)

**[BeCl₂(Ph₂PCH₂PPh₂)₂] – ein Donor-Akzeptorkomplex des Berylliums mit dem
Bis(diphenylphosphino)methan-Liganden**

**[BeCl₂(Ph₂PCH₂PPh₂)₂] – a Donor-Acceptor Complex of Beryllium with the Ligand
Bis(diphenylphosphino)methane**

Gernot Frenking^{*[a]}, Nicole Holzmann^[a], Bernhard Neumüller^[a] und Kurt Dehnicke^{*[a]}

Professor Bernd Harbrecht zum 60. Geburtstag gewidmet

Keywords: Beryllium; Bis(diphenylphosphino)methane; Donor-acceptor complex; X-ray diffraction; IR spectra; DFT calculations

Abstract. The donor-acceptor complex [BeCl₂(Ph₂PCH₂PPh₂)₂] (**1**·2CH₂Cl₂) was prepared from beryllium-dichloride and bis(diphenylphosphino)methane in dichloromethane suspension to give colourless single crystals, which were characterized by X-ray diffraction, IR spectra, and DFT calculations. Compound **1**·2CH₂Cl₂ crystallizes monoclinically in the space group *C2/c* with four formula units per unit cell. Lattice dimensions at 193(2) K: *a* = 2339.5(2), *b* = 916.7(1), *c* = 2415.4(2) pm, *β* = 97.15(1)°, *R*₁ = 0.0386. The structure of **1** consists of distorted tetrahedral molecules with site symmetry *C*₂ and bond lengths Be–Cl of

* Prof. Dr. G. Frenking

Fax: +49-6421-2825566

E-Mail: frenking@chemie.uni-marburg.de

* Prof. Dr. K. Dehnicke

Fax: +49-6421-2825653

E-Mail: dehnicke@chemie.uni-marburg.de

^[a] Fachbereich Chemie der Philipps-Universität Marburg

Hans-Meerwein-Straße

35032 Marburg, Germany

196.8(2) pm and Be–P of 220.6(3) pm. Quantum chemical calculations at the RI-BP86/SV(P) level give a structure of **1** which is in very good agreement with the experimental one. The calculations predict that the bond dissociation energies of the first and second Ph₂PCH₂PPh₂ ligand from **1** are D_e = 16.8 kcal/mol and 24.3 kcal/mol, respectively.

1 Einleitung

Eine Bilanz der Kenntnis von Donor-Akzeptorkomplexen der Berylliumhalogenide vom Typ [BeX₂(L)₂] mit L = monofunktionellen Donormolekülen mit Stickstoff- oder Sauerstoffatomen als Donoratomen weist eine ansehnliche Anzahl auch kristallographisch gut belegter Beispiele auf [1, 2]. Dagegen sind mit den Ligandmolekülen L und dem Donoratom Schwefel bisher nur der Molekülkomplex [BeBr₂(SMe₂)₂] [3] beschrieben, während Komplexe mit dem Donoratom Phosphor (Phosphanliganden) unseres Wissens unbekannt sind. Wir beschreiben hier ein erstes Beispiel anhand des Komplexes [BeCl₂(Ph₂PCH₂PPh₂)₂].

Andererseits sind Berylliumverbindungen mit phosphidischen Komponenten wie Be₃P₂ [4] mit Be–P-Abständen von 211 pm, (η⁵-Pentamethyl-cyclopentadienyl)-di-*t*-butylphosphido-Beryllium, [(*t*-Bu)₂P–Be–Cp*] [5] mit nahezu gestreckter Achse P–Be–Cp* (centroid) und einem Be–P-Abstand von 208.3(6) pm sowie der Chelatkomplex Bis(bis(Dimethylphosphanyl)(trimethylsilyl)methanid)-Beryllium, [Be{Me₃SiC(PMe₂)₂}₂] [6], mit Be–P-Abständen von im Mittel 213.6 pm zum Teil bereits seit längerer Zeit wohlbekannt.

2 Ergebnisse

Eine Suspension von Berylliumchlorid in Dichlormethan reagiert mit Diphenylphosphinomethan unabhängig von dem angewandten stöchiometrischen Verhältnis der Reaktanden gemäß Gleichung (1) unter Bildung des Donor-Akzeptorkomplexes Bis(diphenylphosphino)methan-Berylliumdichlorid (**1**·2CH₂Cl₂).

1

Bei Anwendung des Eduktverhältnisses von Gleichung (1) entsteht bereits nach kurzer Zeit ohne erkennbare Wärmeentwicklung eine klare Lösung, aus der nach Einengen, Übersichten mit *n*-Pentan und Schockgefrieren mittels flüssigem Stickstoffs beim Auftauen farblose Einkristalle von **1**·2CH₂Cl₂ als große Prismen kristallisieren. Im Vakuum wird das eingelagerte Dichlormethan im Einklang mit den nur sehr schwachen intermolekularen C–Cl···H-Wasserstoffbrückenkontakten (siehe unten) rasch und vollständig abgegeben.

Das IR-Spektrum der Verbindung **1** wird im wesentlichen von den Banden des nichtkoordinierten Ligandenmoleküls dominiert, die zugleich im Spektrum von **1** nur wenig Änderungen erfahren. Eine Ausnahme beobachten wir bei den beiden P–CH₂–P-Valenzschwingungen, die durch die Koordination im Spektrum von **1** deutlich kurzweilig von 511 und 501 cm⁻¹ nach 642 und 582 cm⁻¹ verschoben werden und in ihren Frequenzlagen kräftig auseinander rücken. Die Ursache hierfür ist die Aufweitung des P–C–P-Bindungswinkels von 106.2(3)° im Ph₂PCH₂PPh₂-Molekül [7] nach 115.6(1)° in Verbindung **1**, die mit einer Zunahme der Schwingungskopplung verbunden ist [8]. Während die Be–P-Valenzschwingungen aufgrund der langen Be–P-Abstände unterhalb von 400 cm⁻¹ des von uns registrierten Frequenzbereichs zu erwarten sind, lassen sich die BeCl₂-Valenzschwingungen mit antisymmetrischem und symmetrischem Charakter bei 734 und 707 cm⁻¹ identifizieren. Dies passt gut zu den vergleichsweise [1, 2] kurzen Be–Cl-Abständen von 196.8(2) pm, wie sie beispielsweise in den Komplexen [BeCl₂(15-Krone-5)] [9] und [BeCl(12-Krone-4)]⁺[SbCl₄]⁻ [10] angetroffen werden, die zu Verbindung **1** ähnlichen Be–Cl-Valenzschwingungen führen. Zum vollständigen IR-Spektrum von **1** siehe experimentellen Teil.

3 Kristallstrukturanalyse von [BeCl₂(Ph₂PCH₂PPh₂)₂]·2CH₂Cl₂ (1·2CH₂Cl₂)

Tabelle 1 enthält die kristallographischen Daten und Angaben zu den Strukturlösungen. In Tabelle 2 sind die Bindungsparameter zusammengestellt und zum

Vergleich den bei 233 K erhaltenen Daten des Bis(diphenylphosphino)methans [7] gegenübergestellt. Die Kristallstruktur des Ligandmoleküls $\text{Ph}_2\text{PCH}_2\text{PPh}_2$ wurde später noch bei 153 K [11] und bei 293 K [12] ermittelt. Die kristallographischen Daten (ohne Strukturaktoren) von Verbindung **1** wurden als „supplementary publication no. CCDC-77249“ beim Cambridge Crystallographic Data Centre hinterlegt. Kopien der Daten können kostenlos bei CCDC, 12 Union Road, Cambridge CB2 1EZ (Fax: (+44)1223-336-033; E-mail: deposit@ccdc.cam.ac.uk), Großbritannien, angefordert werden.

Verbindung **1**·2CH₂Cl₂ kristallisiert monoklin in der Raumgruppe *C2/c* mit vier Formeleinheiten pro Elementarzelle. In Abbildung 1a ist die Molekülstruktur von **1** wiedergegeben. Das Berylliumatom besetzt die zweizählige Symmetrieachse, so daß nur je ein Be–Cl- und Be–P-Abstand resultiert. Die Be–P-Donor-Akzeptorbindungen sind mit Abständen von 220.6(3) pm naturgemäß deutlich länger als die vom Phosphido(1–)-Typ [(*t*-Bu)₂P–Be–Cp*] [5] mit 208.3(6) pm und [Be{Me₃SiC(PMe₂)₂}₂] [6] mit im Mittel 213.6 pm. Den langen Be–P-Bindungen in **1** stehen kurze Be–Cl-Bindungen von 196.8(2) pm Länge gegenüber, die deutlich kürzer sind als in Komplexen [BeCl₂(L)₂] mit *N*-Donoratomen der Liganden L [1, 2], jedoch entsprechen sie etwa den Be–Cl-Abständen in [BeCl₂(15-Krone-5)] (197.8(2), 195.8(2) pm [9]) oder in [BeCl(12-Krone-4)]⁺[SbCl₄][–] (198.5(7) und 197.4(9) pm [10]). Die relativ schwachen Be–P-Bindungen in **1** spiegeln sich in den nur marginal veränderten P–C-Bindungslängen des Phosphinoliganden gegenüber den entsprechenden P–C-Abständen im freien Liganden $\text{Ph}_2\text{PCH}_2\text{PPh}_2$ wider (siehe Tabelle 2). Etwas größer sind die Veränderungen der C–P(1)–C-Bindungswinkel durch die Koordination am Berylliumatom um +4.8°, während die C–P(2)–C-Bindungswinkel mit einer Zunahme von nur +0.8° praktisch unverändert bleiben (jeweils Mittelwerte). Eine Ausnahme macht die kräftige Aufweitung des P(1)–C(1)–P(2)-Bindungswinkels von 106.2(3)° im freien Liganden nach 115.6(1)° in Verbindung **1**, die im wesentlichen durch die sterischen Verhältnisse bedingt sein dürfte.

In Abbildung 2 sind die Packungsverhältnisse von Verbindung **1**·2CH₂Cl₂ wiedergegeben. Die [BeCl₂(Ph₂PCH₂PPh₂)₂]-Moleküle sind entlang [010] angeordnet, wobei Kanäle entstehen, die von den Dichlormethanmolekülen fehlordnungsfrei besetzt werden. Sie

sind dort durch nur sehr schwache C–Cl⋯H-Wasserstoffbrückenbindungen mit den Phenyl-CH-Atomen fixiert. Ähnlich schwache Kontakte C–H⋯Cl bestehen auch mit den am Berylliumatom gebundenen Chloridoliganden.

4 Quantenchemische Berechnungen

Wir haben die Strukturen des Komplexes $[\text{BeCl}_2(\text{Ph}_2\text{PCH}_2\text{PPh}_2)_2]$ (**1**) sowie des freien Liganden $\text{Ph}_2\text{PCH}_2\text{PPh}_2$ mit Dichtefunktionaltheorie (DFT) auf RI-BP86/SV(P)-Niveau berechnet [15]. Die optimierte Struktur von **1** in Abbildung 1b zeigt an, daß Rechnung und Experiment sehr ähnliche Geometrien für den Komplex ergeben. In der Tabelle 2 sind die theoretischen Werte für die Bindungslängen und Winkel aufgeführt. Der Vergleich mit den experimentellen Daten zeigt eine gute Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment. Die geringen Abweichungen können auf Festkörpereffekte wie auch auf Fehler des quantenchemischen Näherungsverfahrens zurückzuführen sein. In Übereinstimmung mit dem Experiment werden in den Rechnungen eine relativ lange Be–P-Bindung und nur geringfügig verkürzte C(1)–P-Bindungen im Komplex **1** bezogen auf den freien Liganden gefunden. Allerdings ist die Struktur des BeCl_2 in **1** gegenüber freiem Berylliumdichlorid auf Grund der zweifachen Komplexierung deutlich verändert. Nach den Rechnungen beträgt der Winkel Cl–Be–Cl im freien BeCl_2 180° und die Be–Cl Bindungslänge ist mit 181.7 pm wesentlich kürzer als im Komplex **1**.

Wir haben die Bindungsdissoziationsenergien (BDE) der Reaktionen (2) und (3) berechnet:

Die BDE des Komplexes **1** für die Reaktion (2) beträgt auf RI-BP86/SV(P)-Niveau $D_e = 16.8$ kcal/mol. Demnach ist der $\text{Ph}_2\text{PCH}_2\text{PPh}_2$ -Ligand etwa so stark gebunden wie Ammoniak und der Carbenligand CF_2 . Die berechnete BDE eines NH_3 -Liganden im Komplex $[\text{BeCl}_2(\text{NH}_3)_2]$ beträgt auf RI-BP86/TZ2P-Niveau $D_e = 18.4$ kcal/mol [16]. Für den Komplex $[\text{BeCl}_2(\text{CF}_2)_2]$

wurde auf MP2/6-31G(d)-Niveau eine BDE von $D_e = 18.6$ kcal/mol vorhergesagt [17]. Die zweite BDE von **1** (Reaktion 3) wird auf RI-BP86/SV(P)-Niveau mit $D_e = 24.3$ kcal/mol als stärker als die erste BDE berechnet. Sie ist aber etwas schwächer als die BDE des zweiten NH_3 -Liganden im $[\text{BeCl}_2(\text{NH}_3)_2]$, die auf RI-BP86/TZ2P-Niveau mit $D_e = 27.4$ kcal/mol berechnet wird [16]. Für den Komplex $[\text{BeCl}_2(\text{CF}_2)_2]$ wird die zweite BDE mit $D_e = 19.8$ kcal/mol ermittelt [17]. Die berechnete atomare Ladungsverteilung nach dem NBO-Verfahren [18] ergibt eine schwache Donierung der beiden $\text{Ph}_2\text{PCH}_2\text{PPh}_2$ -Liganden im Komplex **1** von insgesamt 0.06 e. Das Be-Atom hat im Komplex eine positive Partialladung von 1.36 e während die Chloratome eine negative Ladung von -0.71 e aufweisen.

Die schwache Donierung der Phosphoratome mit dem sehr geringen ionischen Bindungsanteil spiegelt sich auch in den langen Be–P-Abständen von 220.6(3) pm (berechnet 224.2 pm) wider, während die stark ionischen Be–Cl-Bindungen in Komplex **1** durch vergleichsweise [1, 2a, b] sehr kurze Abstände von 196.8(2) pm (berechnet 199.8 pm) auffallen. In diesen Zusammenhang passen auch die kurzen Be–P-Bindungen von 211 pm Länge des im Antifluorit-Typ kristallisierenden Be_3P_2 mit einem Viertel der Tetraederpositionen unbesetzten Atomlagen, dessen Bindungstyp als weitgehend ionisch beschrieben wird [4].

Experimenteller Teil

Vorsicht! Beryllium und seine Verbindungen sind stark toxisch (MAK-Liste A2 krebserregender Arbeitsstoffe; siehe auch die Literatur in der Übersicht [1]). Es wirkt zudem auch mutagen [19]. Der Umgang mit Berylliumverbindungen erfordert daher die Anwendung besonderer Arbeitsbedingungen. Siehe hierzu die aktuelle Übersicht aus arbeitsmedizinischer Sicht [20].

Die Versuche erfordern Ausschluß von Feuchtigkeit. Alle Handlungen wurden unter trockenem Stickstoff ausgeführt. Dichlormethan und *n*-Pentan (Merck, p.A.) wurden über eine Säule mit Phosphorpentoxid getrocknet und mit einem Al_2O_3 -Filter nachgereinigt. Berylliumchlorid erhielten wir wie beschrieben [21] durch Direktsynthese aus den Elementen. Bis(diphenylphosphino)methan war ein handelsübliches Produkt (Aldrich, 97%ig), es wurde

ohne weitere Reinigung eingesetzt. Das IR-Spektrum wurde mittels des Bruker-Gerätes IFS-88 registriert, Silberchloridscheiben, Nujolverreibung.

[BeCl₂(Ph₂PCH₂PPh₂)₂] (1): Berylliumchlorid (270 mg, 0.34 mmol) wurde in 6.0 mL Dichlormethan suspendiert und unter Rühren mit Bis(diphenylphosphino)methan (2.60 g, 0.68 mmol) versetzt, wobei alsbald ohne erkennbare Wärmeentwicklung eine Lösung mit nur geringer Trübung entstand. Nach Filtration wurde die Lösung im Vakuum bis zur Gewichtskonstanz eingeengt und die Verbindung **1** als solvatfreies viskoses Öl mit praktisch vollständiger Ausbeute (2.80 g) erhalten. Einkristalle von **1**·2CH₂Cl₂ erhielten wir durch Lösen von **1** in Dichlormethan (3.0 mL), Zugabe von *n*-Pentan (0.5 mL), Schockgefrieren mittels flüssigen Stickstoffs und Ruhigstellen des Ansatzes bei 4 °C im Kühlschrank. Zur Aufnahme des IR-Spektrums wurden Einkristalle von **1**·2CH₂Cl₂ durch Evakuieren im dynamischen Vakuum solvatfrei erhalten.

IR-Spektrum von 1, ohne Banden des Einbettungsmittels Nujol: $\nu = 1437$ (m), 1264 (w), 1103 (vst), 1027 (m), 999 (m), 894 (m, br), 769 (w), 744 (vst), 734 (st), 707 (m), 693 (vst), 642 (m), 582 (m), 487 (m), 466 (m) cm⁻¹.

Literatur

- [1] Übersicht: K. Dehnicke, B. Neumüller, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2008**, 634, 2703-2728.
- [2] a) M. P. Dressel, S. Nogai, R. J. F. Berger, H. Schmidbaur, *Z. Naturforsch.* **2003**, 58b, 173; b) F. Kraus, M. F. Fichte, S. A. Baer, *Z. Naturforsch.* **2009**, 64b, 257; c) H. D. Lutz, *Struct. Bonding* (Berlin) **1988**, 69, 97.
- [3] D. Himmel, I. Krossing, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2006**, 632, 2021.
- [4] A. El. Maslout, J.-P. Motte, A. Courtois, J. Protas, C. Gleitzer, *J. Solid State Chem.* **1975**, 15, 223.
- [5] J. L. Atwood, S. G. Bott, R. A. Jones, S. U. Koschmieder, *Chem. Commun.* **1990**, 692.
- [6] H. H. Karsch, M. Reisky, *Eur. J. Inorg. Chem.* **1998**, 905.
- [7] H. Schmidbaur, G. Reber, A. Schier, F. E. Wagner, G. Müller, *Inorg. Chim. Acta* **1988**, 147, 143.
- [8] J. Weidlein, U. Müller, K. Dehnicke, *Schwingungsspektroskopie*, Georg-Thieme-Verlag, Stuttgart - New York, 2. Aufl., **1988**.
- [9] B. Neumüller, K. Dehnicke, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2008**, 634, 1473.
- [10] B. Neumüller, K. Dehnicke, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2006**, 632, 1681.
- [11] C. Di Nicola, Effendy, F. Fazaroh, C. Pettinari, B. W. Skelton, N. Somers, A. H. White, *Inorg. Chim. Acta* **2005**, 358, 720.
- [12] R. A. Burrow, F. C. Wouters, L. Borges de Castro, C. Peppe, *Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online* **2007**, 63, o2559.
- [13] A. Altomare, G. Cascarano, C. Giacovazzo, A. Guagliardi, *SIR-92*, A program for crystal structure solution, *J. Appl. Crystallogr.* **1993**, 26, 343.
- [14] G. M. Sheldrick, *SHELXL-97*, Programm zur Verfeinerung von Kristallstrukturen, Göttingen 1997.
- [15] (a) A. D. Becke, *Phys. Rev. A* **1988**, 38, 3098. (b) J. P. Perdew, *Phys. Rev. B* **1986**, 33, 8822. (c) A. Schäfer, H. Horn, R. Ahlrichs, *J. Chem. Phys.* **1992**, 97, 2571. (d) K. Eichkorn, O. Treutler, H. Öhm, M. Häser, R. Ahlrichs, *Chem. Phys. Letters* **1995**, 242, 652. Die Rechnungen erfolgten mit dem Programm TURBOMOLE: TURBOMOLE V6.1 2009, a development of University of Karlsruhe and

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, 1989-2007, TURBOMOLE GmbH, since 2007;
available from <http://www.turbomole.com>.

- [16] S. Metz, M.C. Holthausen, G. Frenking, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2006**, 632, 814.
- [17] N. Fröhlich, U. Pidun, M. Stahl, G. Frenking, *Organometallics* **1997**, 16, 442.
- [18] A.E. Reed, L.A. Curtiss, F. Weinhold, *Chem. Rev.* **1988**, 88, 899.
- [19] W. Kaim, B. Schwederski, *Bioanorganische Chemie*, 2. Aufl., B. G. Teubner-Verlag, Stuttgart, **1995**.
- [20] B. Schaller, K. H. Schaller, H. Drexler, in *Handbuch der Arbeitsmedizin* (Eds.: S. Letzel, D. Nowak), ecomed-Verlag, Landsberg - München - Zürich, 7. Ergänzungslieferung 5/**2008**, Beryllium.
- [21] B. Neumüller, F. Weller, K. Dehnicke, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2003**, 629, 2195.

Tabelle 1. Kristallographische Daten und Angaben zur Strukturbestimmung von
 $[\text{BeCl}_2(\text{Ph}_2\text{PCH}_2\text{PPh}_2)_2] \cdot 2\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ($1 \cdot 2\text{CH}_2\text{Cl}_2$)

Instrument	IPDS I (Stoe)
Strahlung	Mo-K $_{\alpha}$
Summenformel	C ₅₂ H ₄₈ BeCl ₆ P ₄
Formelgewicht/g·mol ⁻¹	1018.49
Kristallabmessungen/mm	0.4 × 0.36 × 0.2
a/pm	2339.5(2)
b/pm	916.7(1)
c/pm	2415.4(2)
β/°	97.15(1)
Zellvolumen/pm ³	5139.8(8)·10 ⁶
Z	4
d _{röntg} ·cm ⁻³	1.316
Kristallsystem	monoklin
Raumgruppe	C2/c
Absorptionskorrektur	numerisch
μ/cm ⁻¹	4.93
Meßtemperatur/K	193(2)
2θ _{max} /°	51.96
hkl-Werte	-28 ≤ h ≤ 28, -11 ≤ k ≤ 11, -29 ≤ l ≤ 29
gemessene Reflexe	24584
unabhängige Reflexe	5002
R _{int}	0.0464
Reflexe mit F _o >4σ(F _o)	3329
Parameter	286
Strukturlösung ^{a)}	direkte Methoden (SIR-92 [13])
Verfeinerung gegen F ²	SHELXL-97 [14]

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23
24
25
26
27
28
29
30
31
32
33
34
35
36
37
38
39
40
41
42
43
44
45
46
47
48
49
50
51
52
53
54
55
56
57
58
59
60

H-Atome	berechnete Positionen mit gemeinsamem Auslenkungsparameter
R ₁	0.0386
wR ₂ (alle Daten)	0.0932
max. Restelektronendichte/ 10 ⁻⁶ e/pm ⁻³	0.429

^{a)} $w = 1/[\sigma^2(F_o^2)+(0.0559 \cdot P)^2]$; $P = [\max(F_o^2, 0)+2 \cdot F_c^2]/3$

Tabelle 2. Ausgewählte Bindungslängen/pm und -winkel/° in

[BeCl₂(Ph₂PCH₂PPh₂)₂]·2CH₂Cl₂ (**1**·2CH₂Cl₂) im Vergleich mit den Strukturparametern von Ph₂PCH₂PPh₂ nach [7]. Kursive Werte in Klammern berechnet mit RI-BP86/SV(P).

[BeCl ₂ (Ph ₂ PCH ₂ PPh ₂) ₂]·2CH ₂ Cl ₂ (1 ·2CH ₂ Cl ₂)		Ph ₂ PCH ₂ PPh ₂ [7]
Be(1)–P(1)	220.6(3) (224.2)	
Be(1)–Cl(1)	196.8(2) (199.8)	
P(1)–C(1)	183.1(2) (186.3)	184.8(5) (188.6)
P(2)–C(1)	186.2(2) (188.8)	186.8(5) (189.8)
P(1)–C(2)	181.7(2) (184.6)	182.8(5) (185.7)
P(1)–C(8)	182.2(2) (184.5)	184.2(5) (186.5)
P(2)–C(14)	184.2(2) (186.7)	183.9(6) (185.8)
P(2)–C(20)	183.1(3) (185.6)	184.2(5) (185.2)
P(1)–Be(1)–P(1A)	105.7(2) (103.9)	
P(1)–Be(1)–Cl(1)	107.93(3) (109.0)	
P(1)–Be(1)–Cl(1A)	107.08(3) (109.0)	
Cl(1)–Be(1)–Cl(1A)	120.2(2) (121.6)	
Be(1)–P(1)–C(1)	115.10(8) (116.7)	
Be(1)–P(1)–C(2)	111.24(9) (110.9)	
Be(1)–P(1)–C(8)	110.6(1) (110.9)	
C(1)–P(1)–C(2)	107.3(1) (107.2)	103.2(2) (103.0)
C(1)–P(1)–C(8)	106.1(1) (106.6)	101.3(2) (100.7)
C(2)–P(1)–C(8)	106.1(1) (103.9)	101.8(2) (102.7)
C(1)–P(2)–C(14)	100.3(1) (98.5)	102.9(2) (103.2)
C(1)–P(2)–C(20)	103.3(1) (103.3)	99.9(2) (99.3)
C(14)–P(2)–C(20)	102.5(1) (100.8)	100.9(2) (102.5)
P(1)–C(1)–P(2)	115.6(1) (118.0)	106.2(3) (120.1)

Legenden:

Abbildung 1. (a) Ansicht der Molekülstruktur von $[\text{BeCl}_2(\text{Ph}_2\text{PCH}_2\text{PPh}_2)_2]$ im Kristall von $1 \cdot 2\text{CH}_2\text{Cl}_2$. Ellipsoide der thermischen Schwingung mit 40% Aufenthaltswahrscheinlichkeit bei 193(2) K. (b) Optimierte Struktur von $[\text{BeCl}_2(\text{Ph}_2\text{PCH}_2\text{PPh}_2)_2]$ auf RI-BP86/SV(P)-Niveau.

Abbildung 2. Darstellung der Packungsverhältnisse in der Kristallstruktur von $1 \cdot 2\text{CH}_2\text{Cl}_2$ mit intermolekularen $\text{C}-\text{Cl} \cdots \text{H}$ - und $\text{C}-\text{H} \cdots \text{Cl}$ -Wasserstoffbrückenkontakten.