



In der Seitenansicht ergibt sich daraus eine Art Sesselkonformation (Abb. 2). Im Einklang mit dem größeren Ionenradius des Samariums ist der durchschnittliche Sm–O-Abstand mit 234.4(4) pm größer als der Yb–O-Abstand in  $[\text{Cp}^*\text{Yb}(\mu\text{-OC})_2\text{Mn}(\text{CO})_3]_2$  [227.1(2) pm]. Entsprechend sind auch die O–Sm–O-Winkel [98.3(1)°] um ca. 13° größer als die O–Yb–O-Winkel im Yb–Mn-Komplex [85.6(2)°]. Der durchschnittliche Fe–C-Abstand in **3** beträgt 169.0(6) pm.

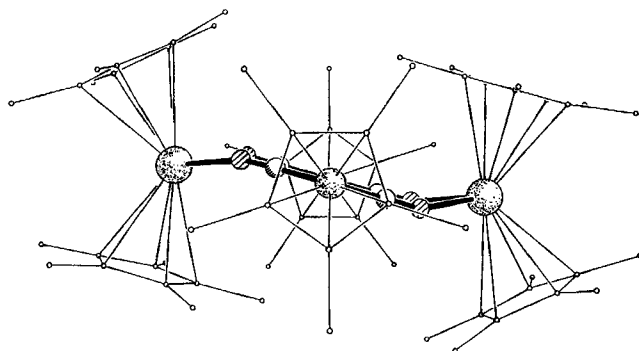


Abb. 2. Molekülstruktur von **3** (Seitenansicht)

Tab. 1. Atomkoordinaten ( $\times 10^4$ ) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ( $\text{pm}^2 \times 10^{-1}$ ) für **3**

	x	y	z	U(eq)*
Sm(1)	2517(1)	5057(1)	3530(1)	21(1)
Fe(1)	4969(1)	2387(1)	4939(1)	25(1)
O(1)	3840(5)	3844(3)	4056(2)	41(2)
C(1)	4293(7)	3219(4)	4409(3)	31(2)
O(2)	3831(5)	6208(3)	4143(2)	42(2)
C(2)	4326(7)	6808(4)	4507(3)	30(2)
C(10)	2623(8)	4457(4)	2343(3)	38(3)
C(11)	1966(6)	5301(4)	2214(3)	35(2)
C(12)	2939(8)	5948(4)	2492(3)	35(2)
C(13)	4189(7)	5524(5)	2796(3)	37(2)
C(14)	4001(9)	4613(5)	2690(3)	44(3)
C(15)	2022(11)	3561(5)	2109(4)	78(4)
C(16)	571(8)	5475(7)	1752(3)	68(3)
C(17)	2673(11)	6949(5)	2466(4)	70(4)
C(18)	5504(9)	6006(8)	3110(4)	81(4)
C(19)	5110(11)	3911(7)	2910(4)	90(5)
C(20)	-4(7)	5579(4)	3570(4)	39(2)
C(21)	-141(7)	4668(4)	3397(3)	36(2)
C(22)	628(7)	4174(4)	3947(3)	31(2)
C(23)	1233(7)	4773(4)	4460(3)	33(2)
C(24)	828(7)	5652(4)	4225(3)	36(2)
C(25)	-739(8)	6359(5)	3164(4)	60(3)
C(26)	-1096(8)	4269(6)	2778(3)	56(3)
C(27)	689(8)	3169(4)	3966(3)	45(3)
C(28)	2119(8)	4550(5)	5145(3)	51(3)
C(29)	1123(9)	6496(5)	4626(4)	61(3)
C(30)	6149(7)	1234(3)	5280(3)	38(2)
C(31)	5753(8)	1256(4)	4577(3)	41(3)
C(32)	4322(9)	1256(4)	4372(3)	41(3)
C(33)	3813(8)	1216(4)	4923(3)	40(3)
C(34)	4919(8)	1214(4)	5483(3)	37(3)
C(35)	7582(9)	1189(5)	5726(4)	74(4)
C(36)	6696(11)	1251(5)	4141(5)	77(4)
C(37)	3452(11)	1256(5)	3655(3)	84(4)
C(38)	2349(9)	1132(5)	4933(5)	81(4)
C(39)	4894(11)	1156(5)	6188(3)	71(4)

\* Äquivalente isotrope U berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen  $U_{ii}$ -Tensors.

Tab. 2. Ausgewählte Bindungslängen [pm] und -winkel [°] für **3**

Sm(1)-O(1)	234.8 (4)	Sm(1)-C(Cp*)	269.4(9)
Sm(1)-O(2)	233.9 (4)		(Mittelwert)
Fe(1)-C(1)	168.8 (6)	Fe(1)-C(Cp*)	210.1(7)
Fe(1)-C(2A)	169.2 (6)		(Mittelwert)
O(1)-C(1)	120.5 (7)		
O(2)-C(2)	119.9 (7)		

Winkel im Ring:

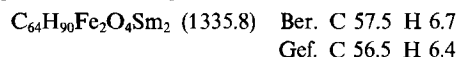
O(1)-Sm(1)-O(2)	98.3(1)	C(1)-Fe(1)-C(2A)	87.0(3)
Sm(1)-O(1)-C(1)	164.5(5)	Fe(1)-C(1)-O(1)	176.6(5)
Sm(1)-O(2)-C(2)	168.8(5)	O(2)-C(2)-Fe(1A)	176.5(5)

Wir danken Herrn Prof. Dr. H. W. Roesky und Herrn Prof. G. M. Sheldrick für die großzügige Unterstützung dieser Arbeit sowie Herrn Prof. Dr. J. W. Gilje (University of Hawaii) für hilfreiche Diskussionen. Der Deutschen Forschungsgemeinschaft sind wir für finanzielle Hilfe zu Dank verpflichtet.

Experimenteller Teil

Alle Arbeiten wurden in ausgeheizten Schlenk-Apparaturen unter nachgereinigtem, trockenem Stickstoff durchgeführt. Das verwendete Toluol wurde sorgfältig getrocknet und vor Gebrauch über Natrium/Benzophenon frisch destilliert. **1**<sup>6)</sup> und **2**<sup>7)</sup> wurden nach Literaturvorschriften synthetisiert. – IR: Perkin Elmer 180. – <sup>1</sup>H-NMR: Bruker WP 80 SY, 80 MHz, C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>. – MS: Varian MAT CH 5. – Elementaranalyse: Analytisches Laboratorium des Instituts für Anorganische Chemie der Universität Göttingen.

[Cp\*<sub>2</sub>Sm(μ-OC)<sub>2</sub>FeCp\*]<sub>2</sub> (**3**): Zur Lösung von 0.85 g (1.8 mmol) [Cp\*Fe(CO)<sub>2</sub>]<sub>2</sub> (**2**) in 60 ml Toluol werden langsam 2.00 g (3.5 mmol) Cp\*<sub>2</sub>Sm(THF)<sub>2</sub> (**1**) in 40 ml Toluol getropft. Nach 12stdg. Rühren bei Raumtemp. ist ein roter, kristalliner Niederschlag ausgefallen. Die Suspension wird erwärmt, bis sich die Substanz wieder vollständig gelöst hat; wenn nötig, wird filtriert. Durch langsames Abkühlen der klaren Lösung auf Raumtemp. erhält man 1.50 g (64%) dunkelrote Kristalle, die sich ab 235°C zersetzen. – IR (Nujol):  $\tilde{\nu}$  = 1760 cm<sup>-1</sup> vs (CO), 1691 m (CO), 1262 m, 1023 m, 801 m, 723 m, 686 s, 515 s. – <sup>1</sup>H-NMR:  $\delta$  = 1.64 (s, 30H, FeCp\*), 1.55 (s, 60H, SmCp\*). – EI-MS: m/z (%) = 669 (6) [Cp\*<sub>2</sub>Sm(μ-OC)<sub>2</sub>FeCp\*], 422 (100) [Cp\*<sub>2</sub>Sm].



Röntgenstrukturanalyse von **3**<sup>8)</sup>: Siemens-Stoe-Vierkreisdiffraktometer, Mo-K<sub>α</sub>-Strahlung ( $\lambda$  = 71.073 nm), Graphitmonochromator, Meßtemperatur –120°C. Strukturlösung (Patterson) und Verfeinerung mit SHELXS-86 und modifiziertes SHELX-76<sup>9)</sup>. Alle Nichtwasserstoffatome wurden anisotrop verfeinert. Es wurde eine semiempirische Absorptionskorrektur durchgeführt. Kristallgröße 0.5 × 0.5 × 0.3 mm, C<sub>64</sub>H<sub>90</sub>Fe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>Sm<sub>2</sub> (1335.8), monoklin, Raumgruppe P2<sub>1</sub>/c, Gitterkonstanten a = 10.178(1), b = 14.982(2), c = 21.064(3) Å,  $\beta$  = 106.10(1)°, V = 3086.0(7) Å<sup>3</sup>, D<sub>ber.</sub> = 1.437 g/cm<sup>3</sup>, Z = 2,  $\mu$ (Mo-K<sub>α</sub>) = 2.39 mm<sup>-1</sup>, 5760 gemessene Reflexe, davon 5399 symmetrieunabhängig und 4019 beobachtet mit F ≥ 3σ(F), 2θ<sub>max</sub> = 50°, 325 verfeinerte Parameter, R = 0.042, R<sub>w</sub> = 0.040, w<sup>-1</sup> = σ<sup>2</sup>(F) + 0.0001 F<sup>2</sup>.

CAS-Registry-Nummern

1: 79372-14-8 / 2: 35344-11-7 / 3: 133474-10-9

<sup>1)</sup> W. J. Evans, *Polyhedron* **6** (1981) 803.

<sup>2)</sup> A. Recknagel, M. Noltemeyer, D. Stalke, U. Pieper, H.-G. Schmidt, F. T. Edelmann, *J. Organomet. Chem.*, im Druck.

- <sup>3)</sup> A. Stasunik, D. R. Wilson, W. Malisch, *J. Organomet. Chem.* **270** (1984) C18.
- <sup>4)</sup> J. M. Boncella, R. A. Andersen, *Inorg. Chem.* **23** (1984) 432.
- <sup>5)</sup> P. N. Hazin, J. C. Huffman, J. W. Bruno, *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* **1988**, 1473.
- <sup>6)</sup> R. B. King, W. M. Douglas, A. Efraty, *J. Organomet. Chem.* **69** (1974) 131.
- <sup>7)</sup> W. J. Evans, J. W. Grate, I. Bloom, W. E. Hunter, J. L. Atwood, *J. Am. Chem. Soc.* **107** (1985) 941.
- <sup>8)</sup> Weitere Einzelheiten zur Kristallstrukturanalyse können beim Fachinformationszentrum Karlsruhe, Gesellschaft für wissenschaftlich-technische Information mbH, D-7514 Eggenstein-Leopoldshafen 2, unter Angabe der Hinterlegungsnummer CSD-55138, der Autoren und des Zeitschriftenzitats angefordert werden.
- <sup>9)</sup> W. Robinson, G. M. Sheldrick in *Crystallographic Computing 4* (N. W. Isaacs, M. R. Taylor, Hrsg.), S. 366, University Press, Oxford 1988.

[49/91]