

Preliminary communication

KRISTALL- UND MOLEKÜLSTRUKTUR DES BIS(6,6-DIMETHYLPENTAFULVEN)PENTACARBONYL-DIEISENS UND DES 6,6-DIPHENYLPENTAFULVEN-PENTACARBONYL-DIEISENS

U. BEHRENS und E. WEISS*

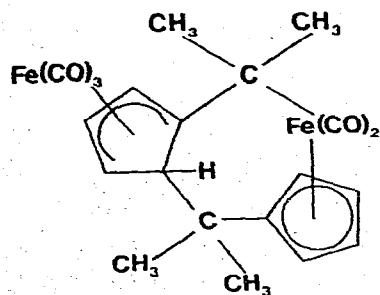
Institut für Anorganische und Angewandte Chemie der Universität Hamburg, 2 Hamburg 13, Papendamm 6 (BRD)

(Eingegangen den 6. Mai 1974)

Summary

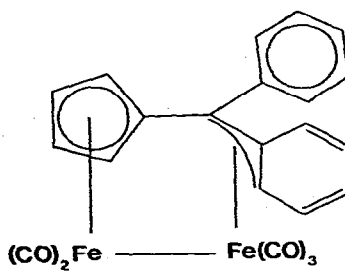
X-Ray diffraction analysis of bis(6,6-dimethylpentafulvene)pentacarbonyliron and 6,6-diphenylpentafulvenepentacarbonyliron has provided the first detailed information about the bonding in 6,6-disubstituted pentafulvenecarbonyliron complexes.

Enneacarbonyl-dieisen reagiert mit 6,6-disubstituierten Pentafulvenen zu einer Vielzahl von Reaktionsprodukten [1], deren Strukturen grösstenteils unbekannt bzw. unsicher sind. Für das Bis (6,6-dimethylpentafulven)-pentacarbonyl-dieisen (Substanz I) wurde die Struktur I [2] vorgeschlagen. Dieser Vorschlag konnte bestätigt werden. Für das 6,6-Diphenylpentafulven-pentacarbonyl-dieisen (Substanz II) wurde die Struktur II gefunden.



(I)

Bis(6,6-dimethylpentafulven)-pentacarbonyl-dieisen.



(II)

6,6-Diphenylpentafulven-pentacarbonyl-dieisen.

* Adresse für Korrespondenz.

Kristalldaten. I: Monoklin, a 16.038(3), b 7.935(3), c 16.057(6) Å, β 109.82(2)°; Raumgruppe $P2_1/c$, $Z = 4$. II: Monoklin, a 7.473(2), b 15.156(7), c 17.710(13) Å, β 94.30(7)°; Raumgruppe $P2_1/c$, $Z = 4$.

Dreidimensionale Intensitätsdaten wurden auf einem automatischen Vierkreis-Einkristalldiffraktometer mit Mo- K_α -Strahlung (Graphit-Monochromator) erhalten. Es wurden keine Absorptionskorrekturen vorgenommen. Beide Strukturen wurden mit Hilfe der Patterson- und Fourier-Technik gelöst und bis zu R -Werten von 2.7 bzw. 4.0% verfeinert (1773 bzw. 2040 unabhängige Daten). Die thermischen Parameter der Eisen-, Sauerstoff- und Kohlenstoff-atome wurden anisotrop, die der Wasserstoffatome isotrop verfeinert. Die Strukturen der beiden Komplexe zeigen Figur 1 und 2.

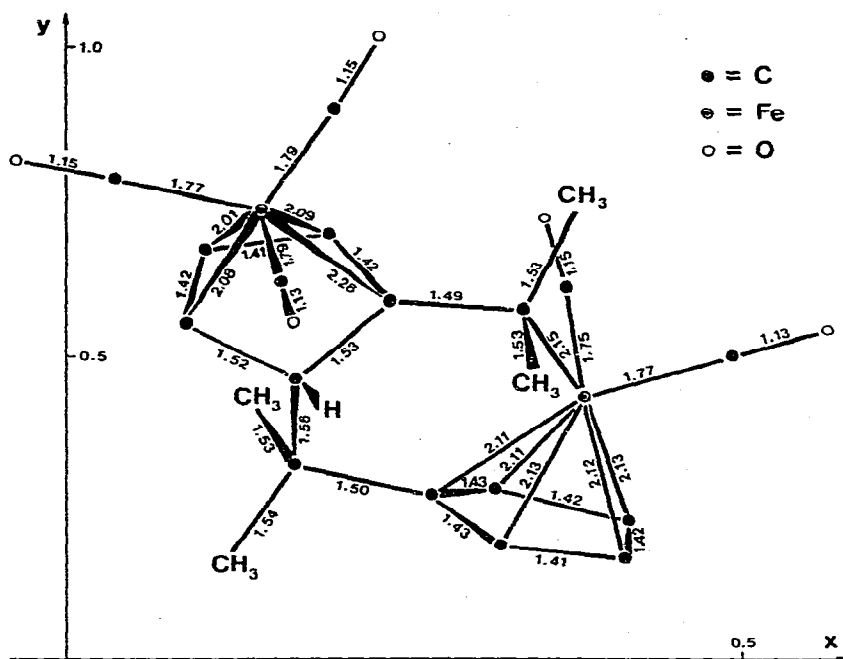


Fig. 1. Projektion von I auf die x-y-Ebene.

Bindungslängen sind aus den Fig. 1 und 2 zu entnehmen. Die Wasserstoffatome sind wegen der Übersichtlichkeit nicht eingezeichnet worden. Der mittlere röntgenographische C-H-Abstand beträgt 1.00 für (I) bzw. 0.99 Å für (II). Die Standardabweichungen betragen im Mittel: I: Fe-C 0.005, C-O 0.006, C-C 0.007 und C-H 0.05 Å; II, Fe-Fe 0.002, Fe-C 0.007, C-O 0.009, C-C 0.009 und C-H 0.06 Å.

Beide Strukturen zeigen, dass bei der Reaktion von $\text{Fe}_2(\text{CO})_9$ mit Pentafulvenen die Bildung eines η -Cyclopentadienylsystems die treibende Kraft ist, wie bereits von Kerber und Ehntholt [2] vermutet wurde. Bei der Struktur von Verbindung II ist weiterhin interessant, dass eine Doppelbindung des einen Phenyrringes sich an einer η -Allylbindung zum Eisenatom hin be-

