

Preliminary communication

RÖNTGEN-STRUKTUR VON 6,6-DIPHENYLPENTAFLUVEN-PENTACARBONYL-DIRUTHENIUM

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

6,6-Diphenylpentafulvenepentacarbonyldiruthenium has been synthesized and its crystal structure determined.

Die Reaktion von 6,6-Diphenylpentafulven mit Dodekacarbonyl-triruthenium ergibt 6,6-Diphenylpentafulven-pentacarbonyl-diruthenium. Es tritt in einer monoklinen und einer triklinen Modifikation auf.

Kristalldaten. Monokline Modifikation, a 12.55(1), b 8.96(1), c 18.32(9) Å, β 90.6(1)°, Raumgruppe $P2_1/c$, $Z = 4$. Triklone Modifikation, a 11.557(8), b 10.520(3), c 8.992(3) Å, α 99.26(2), β 102.26(21), γ 98.63(4)°, Raumgruppe $P\bar{1}$, $Z = 2$.

Von der triklinen Modifikation wurden mit einem automatischen Vierkreis-Einkristalldiffraktometer 3165 unabhängige Reflexe vermessen (monochromatisierte Mo- K_α -Strahlung). Es wurde keine Absorptionskorrektur vorgenommen. Die Struktur wurde mit Hilfe der Patterson- und Fourier-Technik gelöst und bis zu einem R -Wert von 2.8% verfeinert. Wasserstoff-

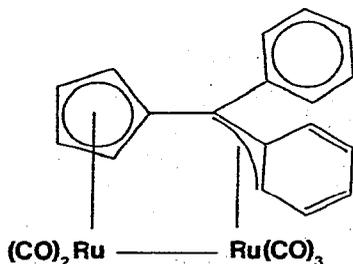


Fig.1. 6,6-Diphenylpentafulven-pentacarbonyl-diruthenium.

* Adresse für Korrespondenz.

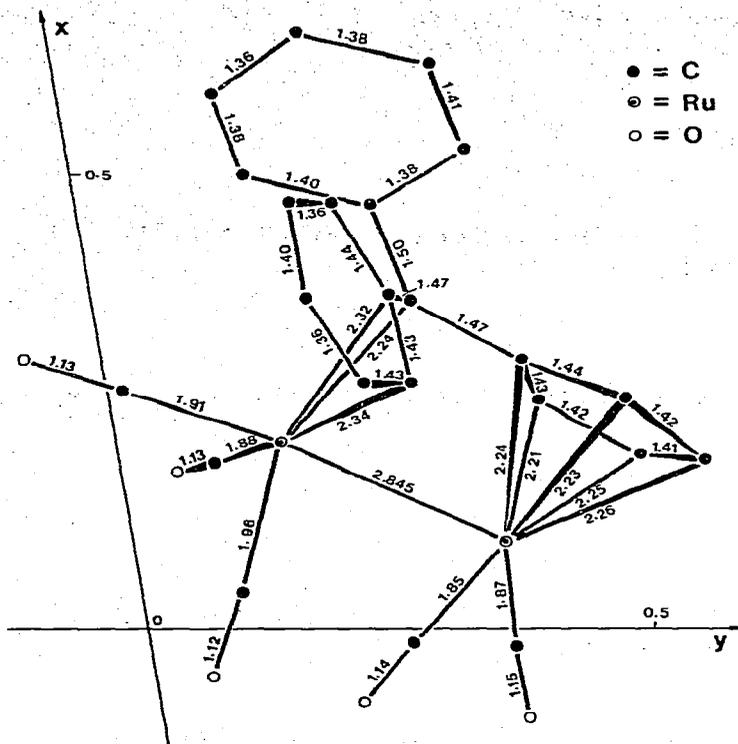


Fig.2. Projektion von I auf die x-y-Ebene.

lagen wurden ebenfalls ermittelt. Die Temperaturfaktoren der Wasserstoffatome wurden, im Gegensatz zu den Temperaturfaktoren der anderen Atome, isotrop verfeinert. Figur 1 zeigt die ermittelte Struktur I. Die Wasserstoffatome sind wegen der Übersichtlichkeit nicht eingezeichnet. Bindungslängen sind aus Figur 2 zu entnehmen. Der mittlere röntgenographische C-H-Abstand beträgt 0.88 Å. Die Standardabweichungen betragen im Mittel: Ru-Ru 0.001, Ru-C 0.005, C-O 0.007, C-C 0.007 und C-H 0.05 Å.

Das Diphenylpentafulven wird wie bei der entsprechenden Eisenverbindung [1] über eine η -Cyclopentadienyl- und eine η -Allylbindung an die $\text{Ru}_2(\text{CO})_5$ -Einheit gebunden. Bemerkenswert ist die Beteiligung einer Phenylring-Doppelbindung an der η -Allylgruppe.

Weitere präparative und spektroskopische Untersuchungen an neu synthetisierten 6,6-Dialkylpentafulven-Komplexen des Rutheniums zeigen, dass den Eisenkomplexen analoge Verbindungen [2] gebildet werden.

Die gefundenen Ergebnisse werden demnächst ausführlich veröffentlicht.

Literatur

- 1 U. Behrens und E. Weiss, J. Organometal. Chem., 74 (1974) C64.
- 2 E. Weiss und W. Hübel, Chem. Ber. 95 (1962) 1186.