

Journal of Organometallic Chemistry, 121 (1976) 189–198
 © Elsevier Sequoia S.A., Lausanne — Printed in The Netherlands

KRISTALL- UND MOLEKÜLSTRUKTUR VON η -ALLYL-TETRACARBONYL-TRIPHENYLPHOSPHIN-VANADIUM

M. SCHNEIDER und E. WEISS *

*Institut für Anorganische und Angewandte Chemie der Universität Hamburg, D 2 Hamburg
 13, Martin-Luther-King-Platz 6 (B.R.D.)*

(Eingegangen den 10. Mai 1976)

Summary

A single-crystal X-ray diffraction study of η -allyltetracarbonyltriphenylphosphinevanadium has been carried out. Considering the allyl group as a monodentate ligand, the vanadium atom is coordinated octahedrally. Triphenylphosphine occupies the position *trans* to the allyl group. The arrangement of the allyl group with respect to the metal atom is asymmetric as observed in other η -allyl complexes. The mean distances V—C(terminal) and V—C(central) are 2.349 and 2.234 Å.

Crystal data: space group $P2_1/c$; $a = 8.627(1)$, $b = 16.294(3)$, $c = 32.451(31)$ Å; $\beta = 90.09(2)^\circ$; $Z = 8$. Using 3700 significant reflections, the structure has been refined anisotropically to $R = 0.062$.

Zusammenfassung

Es wurde eine Einkristall-Röntgenstrukturuntersuchung von η -Allyl-tetracarbonyl-triphenylphosphin-vanadium durchgeführt. Betrachtet man die η -Allylgruppe als einzähnigen Liganden, so ist das Vanadiumatom oktaedrisch koordiniert. Triphenylphosphin besetzt die zur Allylgruppe *trans*-ständige Position. Die Anordnung der Allylgruppe in Bezug auf das Metallatom ist asymmetrisch, wie dies auch in anderen η -Allylkomplexen festgestellt wurde. Die mittleren Abstände V—C(terminal) sowie V—C(zentral) betragen 2.349 und 2.234 Å.

Kristalldaten: Raumgruppe $P2_1/c$; $a = 8.627(1)$, $b = 16.294(3)$, $c = 32.451(31)$ Å; $\beta = 90.09(2)^\circ$; $Z = 8$. Die Struktur wurde mit 3700 signifikanten Reflexen anisotrop bis zu einem R -Wert von 0.062 verfeinert.

Einleitung

Vor kurzem beschrieben wir die Darstellung von η -Allylpentacarbonylvanadium aus Natriumhexacarbonylvanadat(–I) und Allylchlorid unter UV-

Bestrahlung [1]. Zur röntgenographischen Überprüfung der Struktur dieser ersten η -Allyl-carbonyl-vanadiumverbindung erwies sich der genannte Komplex als thermisch zu labil. Die Untersuchungen wurden daher am stabileren Triphenylphosphinsubstitutionsprodukt des η -C₃H₅V(CO)₅ durchgeführt, dessen Darstellung an anderer Stelle [2] beschrieben wird.

Experimentelles

η -Allyl-tetracarbonyl-triphenylphosphin-vanadium kristallisiert aus einer kalt gesättigten Benzol/Hexan-Lösung in quaderförmigen, rotbraunen Kristallen. Drehkristall-, Weissenberg- und Präzessionsaufnahmen zeigten die Laue-Symmetrie $2/m$. Zusammen mit den systematischen Auslöschungen $h0l$ abwesend bei $l = 2n + 1$ und $0k0$ abwesend bei $k = 2n + 1$ ergab sich die monokline Raumgruppe $P2_1/c$. Gitterkonstanten und andere kristallographische Daten sind in Tab. 1 aufgeführt.

Zur Sammlung der integrierten Intensitäten wurde ein Kristall der Grösse $0.2 \times 0.3 \times 0.5$ mm in eine Kapillare eingeschmolzen und auf einem automatischen Einkristall-Diffraktometer bis zu einem Beugungswinkel von $\theta = 20^\circ$ vermessen. Eine Zersetzung des Kristalls im Röntgenstrahl wurde nicht registriert. Die Umwandlung der integrierten Intensitäten in Strukturfaktoren und deren Sortierung erfolgte mit dem Programm ALDASO [3]. Es wurden die üblichen Lorentz- und Polarisationskorrekturen unter Berücksichtigung eines idealen Graphitmonochromators durchgeführt. Insgesamt konnten 4273 symmetrieunabhängige Reflexe, von denen 573 nicht signifikant waren, vermessen werden.

Lösung und Verfeinerung der Struktur

Zur Ermittlung der Koordinaten der acht Schweratome (zwei pro asymmetrische Einheit) wurde eine dreidimensionale Patterson-Synthese (Programm FOUR [4]) gerechnet. Mit folgenden Schweratomkoordinaten konnten die höchsten Maxima der Patterson-Synthese gedeutet werden:

$$\begin{array}{lll} x_1 = 0.15 & y_1 = 0.19 & z_1 = 0.11 \\ x_2 = 0.29 & y_2 = 0.08 & z_2 = 0.42 \end{array}$$

TABELLE 1
KRISTALLDATEN

Summenformel	C ₂₅ H ₂₀ O ₄ PV
Molmasse	466.4
Raumgruppe	$P2_1/c$
Moleküle/Zelle	8
Berechnete Dichte	1.36 g cm ⁻³
Zellkonstanten ^a	
a	8.627(1) Å
b	16.294(3) Å
c	32.451(31) Å
β	90.09(2) ^o
Zellvolumen	4561.57 Å

^a Messtemperatur 18°C, Mo-K α , $\lambda = 0.70926$ Å (Graphit-Monochromator).

Zur Bestimmung der Koordinaten der leichten Atome (mit Ausnahme von Wasserstoff) wurde eine dreidimensionale Fourier-Synthese (Programm Four [4]) mit den Schweratomkoordinaten gerechnet. Nach Einführung von individuellen anisotropen Temperaturfaktoren konnte ein abschliessender R -Wert von 0.062 für die 3700 signifikanten Reflexe erreicht werden.

Beschreibung der Molekülstruktur

Die Koordinaten der Atome, Temperaturfaktoren, interatomare Abstände, Bindungswinkel und LSQ-Ebenen sind in den Tabellen 2–6 aufgeführt. Figur 1

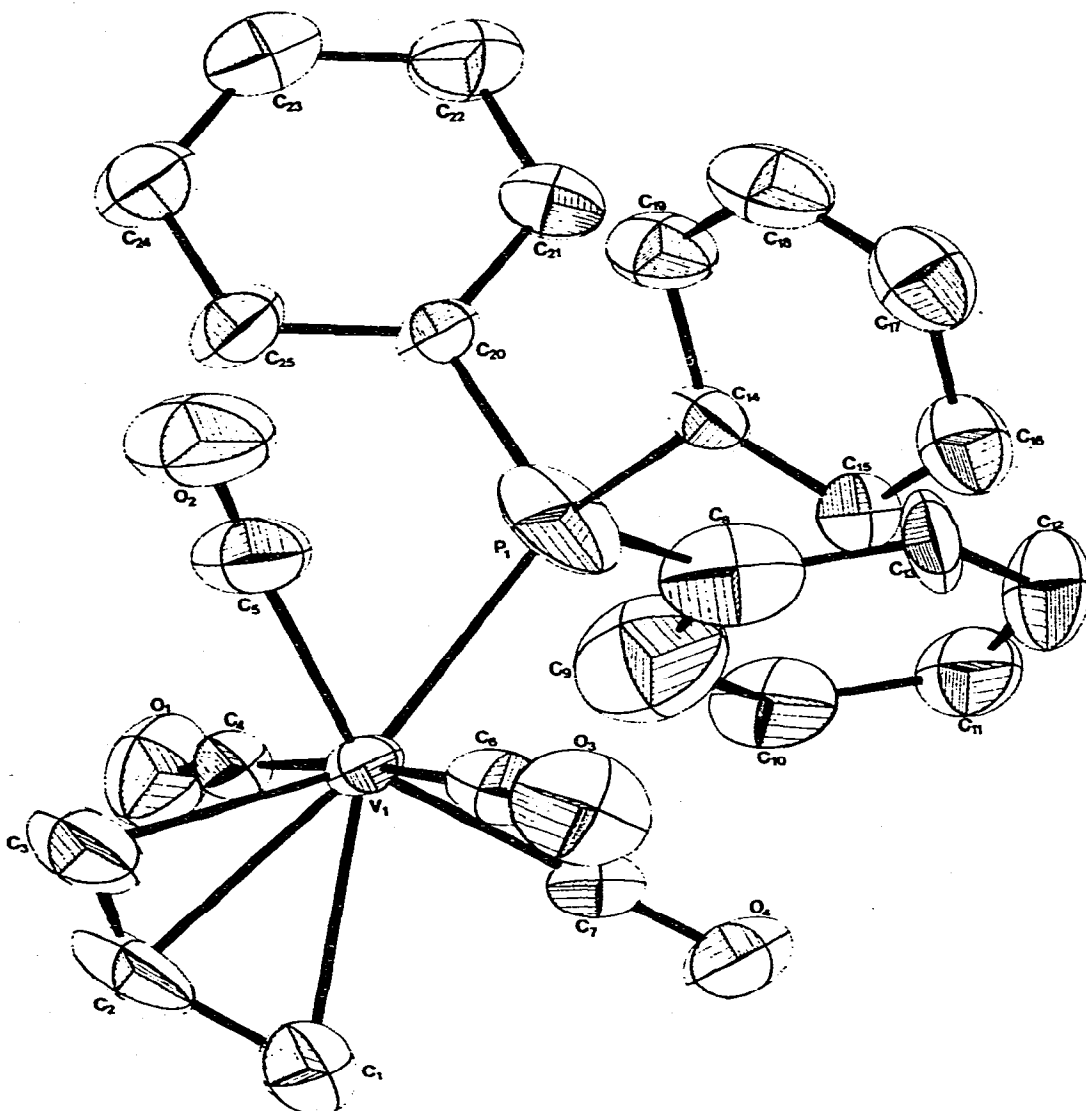


Fig. 1. Molekülstruktur von $\eta\text{-C}_3\text{H}_5\text{V}(\text{CO})_4\text{P}(\text{C}_6\text{H}_5)_3$.

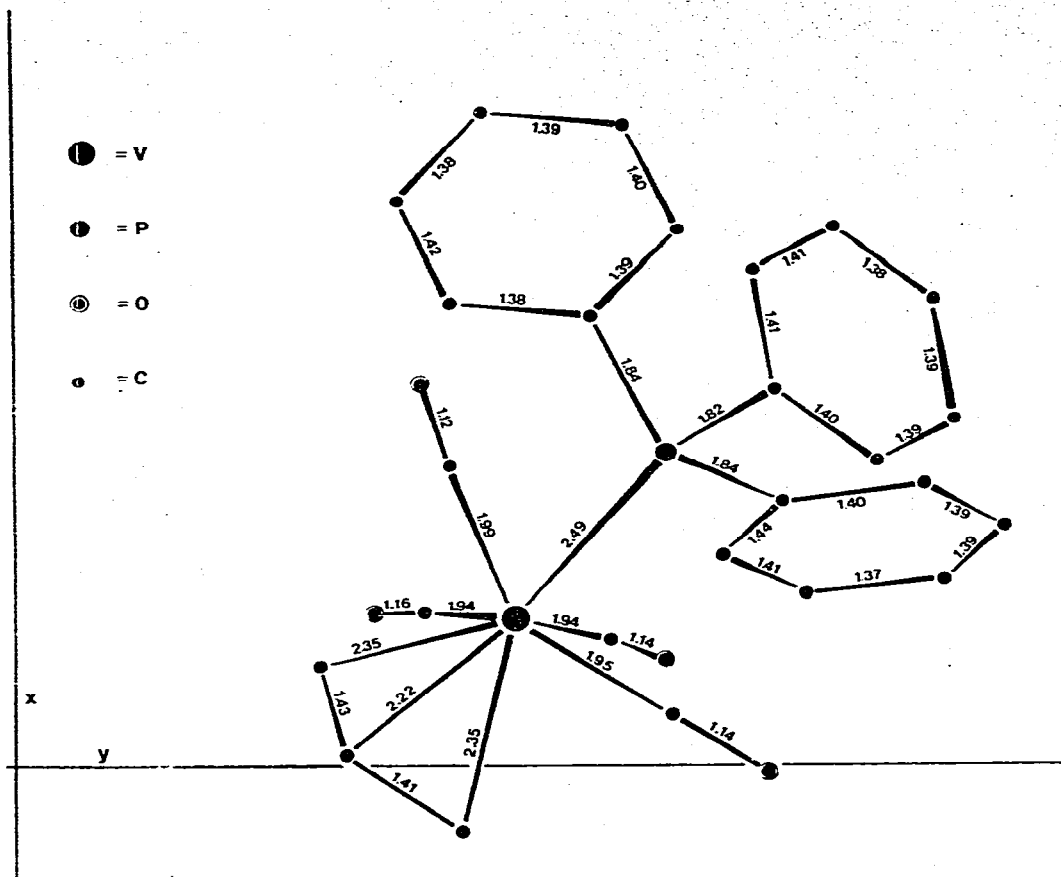


Fig. 2. Bindungsabstände (Å) von $\eta\text{-C}_3\text{H}_5\text{V}(\text{CO})_4\text{P}(\text{C}_6\text{H}_5)_3$.

zeigt die Molekülstruktur, Fig. 2 die interatomaren Abstände und Fig. 3 eine Projektion des Zellinhalts auf die yz -Ebene.

Im folgenden soll die aus zwei Formeleinheiten bestehende asymmetrische Einheit der Elementarzelle beschrieben werden.

Betrachtet man die Allylgruppe als einzähnigen Liganden, so ist das Vanadium oktaedrisch koordiniert. In *trans*-Stellung zur Allylgruppe befindet sich der Phosphinligand. Der Vanadium-Phosphor-Abstand beträgt 2.486(1) bzw. 2.485(1) Å. Entsprechend der sp^3 -Hybridisierung der Phosphoratome liegen die Bindungswinkel am Phosphor zwischen 100° und 120° . Die Abweichung vom idealen Tetraederwinkel ist durch sterische, eventuell auch Packungseffekte zu erklären. Die Bindungslängen Phosphor-Kohlenstoff im Triphenylphosphin sind alle vergleichbar (im Mittel 1.830 Å). Der mittlere C-C-Abstand der Phenylgruppen beträgt 1.401 Å.

Infolge der *trans*-Substitution liegen die vier CO-Gruppen annähernd in einer Ebene mit Abweichungen an V(1) von ± 0.25 Å und an V(2) von ± 0.27 Å (Ebenen-Gleichungen in Tab. 6). Die Bindungswinkel C-V-C der CO-Gruppen zueinander betragen an V(1) zwischen $80.5(2)^\circ$ und $102.6(2)^\circ$, an V(2) zwischen $78.2(3)^\circ$ und $103.6(3)^\circ$. Die Bindungslänge V-C(CO) liegt erwartungsgemäss

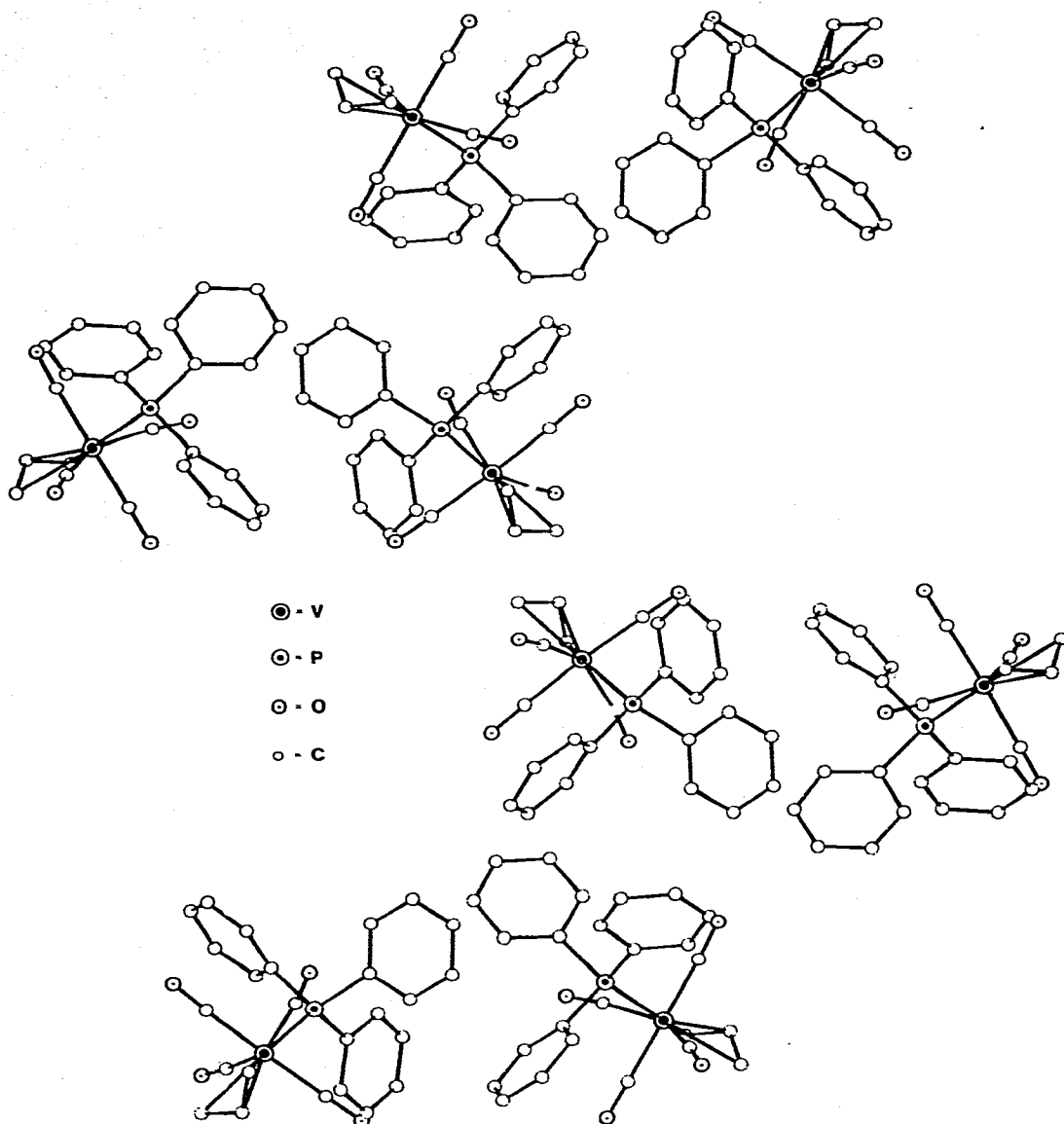


Fig. 3. Projektion des Zellinhalts auf die yz -Ebene.

im Mittel bei 1.956 Å, der C—O-Abstand im Mittel bei 1.136 Å. Die V—C—O-Gruppierungen sind fast linear (174.0–177.5°).

Auch bei dieser Verbindung zeigt sich die für alle η -Allyl-Komplexe charakteristische Unsymmetrie der Bindung des Allyl-Liganden an das Metall. So sind zwar die C—C-Abstände in etwa gleich (an V(1) 1.413(9) bzw. 1.416(9) Å; an V(2) 1.416(9) bzw. 1.423(10) Å) und der Bindungswinkel entspricht einer sp^2 -Hybridisierung (121.7(6)° und 120.7(6)°), doch unterscheiden sich die Abstände

(Fortsetzung s. S. 196)

TABELLE 2

ATOMPARAMETER MIT STANDARDABWEICHUNGEN

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
V(1)	0.1464(1)	0.3095(1)	0.1075(1)	C(20)	0.5042(6)	0.3543(3)	0.1699(2)
V(2)	0.7038(1)	0.9308(1)	0.0819(1)	C(21)	0.6074(6)	0.4065(4)	0.1899(2)
P(1)	0.3411(2)	0.3999(1)	0.1412(1)	C(22)	0.7298(7)	0.3742(4)	0.2129(2)
P(2)	0.5042(2)	0.8518(1)	0.1202(1)	C(23)	0.7454(7)	0.2893(4)	0.2161(2)
O(1)	0.1249(5)	0.2234(3)	0.1923(1)	C(24)	0.6426(7)	0.2370(4)	0.1971(2)
O(2)	0.4560(6)	0.2513(4)	0.0686(2)	C(25)	0.5199(6)	0.2703(4)	0.1732(2)
O(3)	0.1228(6)	0.3990(3)	0.0244(1)	C(26)	0.9658(7)	0.9550(4)	0.0659(2)
O(4)	0.9468(5)	0.4605(3)	0.1297(1)	C(27)	0.8678(8)	0.9662(4)	0.0313(2)
O(5)	0.9058(5)	0.8591(3)	0.1518(1)	C(28)	0.7549(9)	0.0299(5)	0.0309(2)
O(6)	0.7005(5)	0.7795(3)	0.0236(1)	C(29)	0.8321(6)	0.8811(4)	0.1253(2)
O(7)	0.4045(6)	0.0288(3)	0.0635(2)	C(30)	0.6988(6)	0.8354(4)	0.0444(2)
O(8)	0.7450(6)	0.0721(3)	0.1433(2)	C(31)	0.5110(7)	0.9903(4)	0.0687(2)
C(1)	0.8858(8)	0.2764(4)	0.0945(2)	C(32)	0.7263(7)	0.0205(4)	0.1202(2)
C(2)	0.9818(8)	0.2064(4)	0.0977(2)	C(33)	0.4074(5)	0.9188(3)	0.1563(2)
C(3)	0.1019(7)	0.1904(4)	0.0685(2)	C(34)	0.2516(6)	0.9429(4)	0.1495(2)
C(4)	0.1372(6)	0.2542(3)	0.1604(2)	C(35)	0.1860(7)	0.0063(4)	0.1742(2)
C(5)	0.3456(7)	0.2691(4)	0.0843(2)	C(36)	0.2731(7)	0.0432(4)	0.2062(2)
C(6)	0.1362(7)	0.3656(4)	0.0550(2)	C(37)	0.4294(7)	0.0167(4)	0.2133(2)
C(7)	0.0197(6)	0.4033(4)	0.1232(2)	C(38)	0.4961(6)	0.9566(3)	0.1881(2)
C(8)	0.2684(6)	0.4705(4)	0.1808(2)	C(39)	0.3415(6)	0.8012(3)	0.0936(2)
C(9)	0.1888(7)	0.4339(4)	0.2151(2)	C(40)	0.2365(6)	0.7527(4)	0.1157(2)
C(10)	0.1318(7)	0.4837(5)	0.2470(2)	C(41)	0.1147(7)	0.7153(4)	0.0952(2)
C(11)	0.1489(7)	0.5671(4)	0.2449(2)	C(42)	0.0961(7)	0.7251(4)	0.0528(3)
C(12)	0.2271(8)	0.6026(4)	0.2122(2)	C(43)	0.1984(8)	0.7716(4)	0.0301(2)
C(13)	0.2882(7)	0.5559(3)	0.1801(2)	C(44)	0.3240(7)	0.6878(4)	0.5500(2)
C(14)	0.4347(6)	0.4659(3)	0.1033(2)	C(45)	0.5782(5)	0.7651(3)	0.1505(2)
C(15)	0.3487(6)	0.5262(3)	0.0830(2)	C(46)	0.5772(7)	0.7624(4)	0.1935(2)
C(16)	0.4141(7)	0.5728(4)	0.0518(2)	C(47)	0.6487(8)	0.6973(4)	0.2140(2)
C(17)	0.5675(8)	0.5602(4)	0.0340(2)	C(48)	0.7222(7)	0.6352(4)	0.1919(2)
C(18)	0.6525(7)	0.4995(4)	0.0593(2)	C(49)	0.7219(6)	0.6376(4)	0.1486(2)
C(19)	0.5900(8)	0.4516(4)	0.0915(2)	C(50)	0.6502(6)	0.7027(3)	0.1281(2)

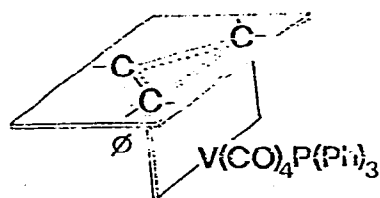
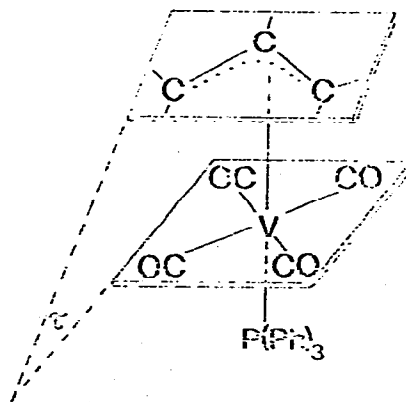
Fig. 4. ϕ -Winkel.Fig. 5. τ -Winkel.

TABELLE 3

TEMPERATURFAKTOREN MIT STANDARDABWEICHUNGEN

Die anisotropen Temperaturfaktoren haben die Form:

$$T = \exp[-(h^2\beta_{11} + k^2\beta_{22} + l^2\beta_{33} + 2hk\beta_{12} + 2hl\beta_{13} + 2kl\beta_{23})] (\times 10^{-4})$$

Atom	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}
V(1)	59(2)	24(1)	8(0)	6(1)	1(1)	2(0)
V(2)	84(2)	22(1)	6(0)	8(1)	2(1)	-1(0)
P(1)	60(3)	20(1)	7(0)	-2(1)	-1(1)	1(0)
P(2)	56(3)	20(1)	6(0)	0(1)	-2(1)	-1(0)
O(1)	211(13)	44(4)	13(1)	15(5)	4(3)	7(1)
O(2)	138(12)	85(5)	21(1)	8(7)	5(3)	-17(2)
O(3)	232(14)	74(5)	11(1)	-19(6)	-3(3)	7(2)
O(4)	106(11)	46(4)	21(1)	22(5)	-10(3)	-8(2)
O(5)	99(10)	67(4)	13(1)	-17(5)	-12(2)	7(2)
O(6)	225(14)	47(4)	12(1)	-11(6)	12(3)	-9(1)
O(7)	206(15)	54(4)	21(1)	34(6)	-13(3)	7(2)
O(8)	337(18)	46(4)	16(1)	-62(6)	28(3)	-14(2)
C(1)	147(18)	34(5)	17(2)	-9(8)	0(0)	-6(2)
C(2)	150(18)	52(6)	15(1)	-57(9)	-5(4)	-8(2)
C(3)	137(17)	47(5)	18(2)	-32(8)	8(4)	-13(2)
C(4)	81(13)	24(4)	14(1)	-2(6)	-1(4)	-4(2)
C(5)	91(15)	53(5)	12(1)	4(7)	-1(4)	-1(2)
C(6)	99(14)	45(2)	9(1)	-14(7)	3(3)	-2(2)
C(7)	71(13)	36(4)	10(1)	-1(6)	-1(3)	-1(2)
C(8)	172(13)	79(5)	16(1)	2(7)	-3(3)	1(2)
C(9)	254(17)	90(6)	19(1)	25(8)	9(4)	-6(2)
C(10)	123(16)	62(6)	8(1)	7(8)	13(3)	-13(2)
C(11)	128(16)	43(5)	12(1)	10(7)	-1(4)	-10(2)
C(12)	229(20)	29(4)	10(1)	14(8)	10(4)	-7(2)
C(13)	134(18)	13(4)	13(1)	-11(6)	-4(4)	-2(2)
C(14)	80(14)	24(4)	7(1)	-13(6)	13(3)	-3(2)
C(15)	107(14)	27(4)	10(1)	1(6)	-1(3)	-2(2)
C(16)	167(18)	32(4)	9(1)	-10(7)	6(4)	1(2)
C(17)	186(20)	42(5)	9(1)	-18(8)	4(4)	-3(2)
C(18)	119(16)	58(6)	11(1)	-23(8)	8(4)	-3(2)
C(19)	97(15)	46(5)	9(1)	-8(7)	8(3)	-4(2)
C(20)	66(12)	27(4)	9(1)	9(6)	1(3)	2(2)
C(21)	102(15)	41(5)	11(1)	-12(7)	-8(3)	-2(2)
C(22)	112(16)	51(6)	13(1)	4(8)	-11(4)	0(2)
C(23)	108(16)	53(6)	10(1)	17(8)	1(3)	2(2)
C(24)	117(15)	42(5)	12(1)	18(7)	-1(4)	2(2)
C(25)	102(14)	34(5)	11(1)	20(6)	3(3)	1(2)
C(26)	159(17)	54(5)	9(1)	-28(7)	9(4)	5(2)
C(27)	196(20)	52(6)	13(1)	-52(9)	28(4)	2(2)
C(28)	213(21)	60(6)	13(1)	-25(9)	10(4)	13(2)
C(29)	69(13)	39(5)	9(1)	-23(6)	7(3)	1(2)
C(30)	119(14)	37(5)	8(1)	-13(7)	6(3)	-2(2)
C(31)	141(18)	31(4)	13(1)	1(7)	-6(4)	4(2)
C(32)	154(17)	31(5)	11(1)	-19(7)	13(4)	0(2)
C(33)	181(13)	60(4)	17(1)	4(6)	-6(3)	2(2)
C(34)	171(14)	75(5)	21(1)	-24(7)	2(3)	3(2)
C(35)	275(18)	76(5)	21(1)	-24(8)	1(4)	10(2)
C(36)	274(18)	79(6)	21(1)	-5(8)	-8(4)	5(2)
C(37)	263(17)	70(5)	19(1)	-15(8)	0(4)	8(2)
C(38)	252(16)	64(4)	15(1)	15(7)	-1(3)	5(2)
C(39)	248(16)	58(4)	18(1)	-26(7)	-20(3)	4(2)
C(40)	72(13)	27(4)	16(1)	-29(6)	11(3)	1(2)
C(41)	96(15)	31(5)	22(2)	-12(7)	-3(4)	-5(2)
C(42)	118(17)	37(5)	22(2)	1(8)	-18(5)	-6(3)
C(43)	153(18)	45(5)	17(2)	2(8)	-41(5)	-9(2)
C(44)	283(18)	75(5)	20(1)	-38(8)	-23(4)	3(2)

fortgesetzt

TABELLE 3 (Fortsetzung)

Atom	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}
C(45)	47(11)	20(4)	8(1)	-9(5)	-2(3)	3(2)
C(46)	141(16)	36(4)	9(1)	-5(7)	0(3)	4(2)
C(47)	223(20)	40(5)	10(1)	11(8)	-6(4)	8(2)
C(48)	164(18)	41(5)	11(1)	3(8)	-9(4)	3(2)
C(49)	98(14)	30(4)	14(1)	-4(6)	0(3)	2(2)
C(50)	94(13)	25(4)	9(1)	2(6)	-2(3)	1(2)

der drei Kohlenstoffatome der Allyl-Gruppen vom Vanadium deutlich. Die zentralen Kohlenstoffe sind signifikant kürzer ans Metall gebunden (2.223(7) Å zu V(1), 2.245(7) Å zu V(2)) als die terminalen (2.349(7) und 2.349(7) Å an V(1); 2.353(6) und 2.355(7) Å an V(2)).

Berechnet man den Winkel ϕ zwischen der Allyl-Ebene und der Ebene, aufgespannt durch die terminalen Allyl-C-Atome und Vanadium, so findet man Werte von 100.0° an V(1) und 100.1° an V(2). (In vergleichbaren η -Allylkomplexen liegen die Winkel zwischen 100 und 110° [5–8].) Auch der Winkel τ zwischen der Allyl-Ebene und der Vanadium–Carbonyl-Ebene liegt mit 13.6° (an V(1)) und 14.2° (an V(2)) im Rahmen der bei anderen η -Allylverbindungen gefundenen Werte [9,10].

TABELLE 4

BINDUNGSABSTÄNDE

Atome	Abstand (Å)	Atome	Abstand (Å)
<i>(a) Vanadium–Phosphor-Bindung</i>			
V(1)–P(1)	2.486(2)		
V(2)–P(2)	2.485(2)		
<i>(b) Phosphor–Kohlenstoff-Abstände</i>			
P(1)–C(8)	1.836(6)	P(2)–C(33)	1.806(5)
P(1)–C(14)	1.822(6)	P(2)–C(39)	1.842(5)
P(1)–C(20)	1.842(5)	P(2)–C(45)	1.833(5)
<i>(c) Vanadium–Allyl-Abstände</i>			
V(1)–C(1)	2.350(7)	V(2)–C(26)	2.353(6)
V(1)–C(2)	2.223(7)	V(2)–C(27)	2.245(7)
V(1)–C(3)	2.349(7)	V(2)–C(28)	2.356(6)
<i>Kohlenstoff–Kohlenstoff-Abstände im Liganden</i>			
C(1)–C(2)	1.413(9)	C(26)–C(27)	1.416(9)
C(2)–C(3)	1.429(9)	C(27)–C(28)	1.423(10)
<i>(e) Vanadium–Carbonyl-System</i>			
V(1)–C(4)	1.939(7)	V(2)–C(29)	1.963(6)
V(1)–C(5)	1.990(6)	V(2)–C(30)	1.975(6)
V(1)–C(6)	1.935(6)	V(2)–C(31)	1.972(6)
V(1)–C(7)	1.948(6)	V(2)–C(32)	1.928(7)
C(4)–O(1)	1.158(8)	C(29)–O(5)	1.129(7)
C(5)–O(2)	1.119(8)	C(30)–O(6)	1.134(8)
C(6)–O(3)	1.139(8)	C(31)–O(7)	1.125(8)
C(7)–O(4)	1.143(7)	C(32)–O(8)	1.138(8)

Der mittlere C–C-Bindungsabstand in den Phenylringen beträgt 1.401 Å.

TABELLE 5
BINDUNGSWINKEL

Atome	Winkel in °	Atome	Winkel in °
<i>(a) η-Allyl-System</i>			
C(1)—C(2)—C(3)	121.7(6)		
C(26)—C(27)—C(28)	120.7(6)		
<i>(b) Vanadium—Carbonyl-System</i>			
C(4)—V(1)—C(5)	102.6(2)	C(29)—V(2)—C(30)	97.4(3)
C(5)—V(1)—C(6)	82.0(2)	C(30)—V(2)—C(31)	103.6(3)
C(6)—V(1)—C(7)	80.5(2)	C(31)—V(2)—C(32)	81.5(3)
C(7)—V(1)—C(4)	96.3(3)	C(32)—V(2)—C(29)	78.2(3)
V(1)—C(4)—O(1)	176.5(6)	V(2)—C(29)—O(5)	173.9(5)
V(1)—C(5)—O(2)	174.0(6)	V(2)—C(30)—O(6)	177.5(5)
V(1)—C(6)—O(3)	176.8(6)	V(2)—C(31)—O(7)	174.4(6)
V(1)—C(7)—O(4)	175.1(5)	V(2)—C(32)—O(8)	177.3(6)
<i>(c) Triphenylphosphin-System</i>			
V(1)—P(1)—C(8)	116.6(2)	V(2)—P(2)—C(33)	109.4(2)
V(1)—P(1)—C(14)	110.6(2)	V(2)—P(2)—C(39)	121.7(2)
V(1)—P(1)—C(20)	119.9(2)	V(2)—P(2)—C(45)	115.2(2)
C(8)—P(1)—C(14)	104.8(3)	C(33)—P(2)—C(39)	102.8(2)
C(14)—P(1)—C(20)	103.9(3)	C(39)—P(2)—C(45)	99.8(2)
C(8)—P(1)—C(20)	99.3(3)	C(33)—P(2)—C(45)	106.3(2)

Die C—C—C-Bindungswinkel der Phenylringe weichen nur unwesentlich von dem theoretischen Wert von 120° ab.

TABELLE 6

GLEICHUNGEN DER LSQ-EBENEN, ABWEICHUNGEN (Å) DER ATOME VON DEN EBENEN UND WINKEL ZWISCHEN DEN EBENEN

Ebene I:	V(1), C(1), C(2);
Ebene II:	C(1), C(2), C(3);
Ebene III:	C(4), C(5), C(6), C(7);
Ebene IV:	V(2), C(26), C(28);
Ebene V:	C(26), C(27), C(28);
Ebene VI:	C(29), C(30), C(31), C(32).
(I)	$0.0273 x + 0.5427 y - 0.8395 z - 0.0932 = 0$
(II)	$0.6441 x + 0.5178 y + 0.5631 z - 0.8026 = 0$
(III)	$-0.6636 x - 0.6507 y - 0.3690 z + 1.0188 = 0$
(IV)	$-0.0378 x - 0.7106 y - 0.7026 z + 0.7630 = 0$
(V)	$0.6704 x + 0.6233 y - 0.4025 z - 1.1744 = 0$
(VI)	$0.6721 x + 0.4547 y - 0.5844 z - 0.8365 = 0$

I	II	III	IV	V	VI
V(1) 0.0	C(1) 0.0	C(4) 0.206	V(2) 0.0	C(26) 0.0	C(29) -0.240
C(1) 0.0	C(2) 0.0	C(5) -0.236	C(26) 0.0	C(27) 0.0	C(30) 0.184
C(3) 0.0	C(3) 0.0	C(6) 0.289	C(28) 0.0	C(28) 0.0	C(31) -0.219
		C(7) -0.259			C(32) 0.275

Die Gleichungen beziehen sich auf ein orthogonales Koordinatensystem x, y, z , wobei x parallel zu a , y in der ab -Ebene und z parallel zu c^* liegt.

Winkel zwischen den Ebenennormalen in Grad:

I—II	100.0	IV—V	100.7
II—III	13.6	V—VI	14.2

Dank

Der Deutschen Forschungsgemeinschaft sei für die Bereitstellung eines rechnergesteuerten Einkristall-Diffraktometers und dem Fonds der Chemischen Industrie für Sachbeihilfen gedankt. Den Herren Dr. Kl. Hoffmann, Ka. Hoffmann und Dr. J. Kopf (Institut für Anorganische und Angewandte Chemie der Universität Hamburg) verdanken wir die genannten Rechenprogramme.

Literatur

- 1 M. Schneider und E. Weiss, *J. Organometal. Chem.*, 73 (1974) C7.
- 2 M. Schneider und E. Weiss, *J. Organometal. Chem.*, im Druck.
- 3 Ka. Hoffmann, unveröffentlichtes Programm, 1974.
- 4 Kl. Hoffmann und J. Kopf, unveröffentlichtes Programm, 1972.
- 5 W.E. Oberhansli und L.F. Dahl, *J. Organometal. Chem.*, 3 (1965) 43.
- 6 Kh. Minasyants und Yu.T. Struchkov, *J. Strukt. Chem. USSR*, 9 (1968) 406.
- 7 H.L. Clarke, *J. Organometal. Chem.*, 80 (1974) 369.
- 8 M. McPartlin und R. Mason, *Chem. Commun.*, (1967) 16.
- 9 R. Uttech und H. Dietrich, *Z. Krist.*, 122 (1965) 60.
- 10 R. Seip, *Acta Chem. Scand.*, 26 (1972) 1966.