

含烯烃配体的过渡金属卡宾配合物的研究 II. 异戊二烯二羰基[乙氧基(苯基)卡宾]铁配合物的异构化产物的合成, 波谱和结构研究及四羰基[乙氧基(五氯苯基)卡宾]铁的晶体结构

王天兰, 陈家碧, 徐维铎, 章士伟, 潘佐华, 唐有祺

中国科学院上海有机化学研究所; 北京大学物理化学研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 异戊二烯三羰基铁(I)与芳基锂ArLi(Ar=C₆H₅, p-CH₃C₆H₄, p-CH₃OC₆H₄, p-CF₃C₆H₄)在低温下反应, 再用Et₃OBF₄烷基化, 可获得组成为C₅H₈(CO)₂FeC(OC₂H₅)Ar的标题化合物的异构化产物(2—5)。当用LiC₆Cl₅作亲核试剂, 在相同条件下与1反应时, 只生成已知的配合物(CO)₄FeC(OC₂H₅)C₆Cl₅(6)。由单晶X射线衍射数据推断出, 2和6的分子结构都属于单斜晶系, Z=4。2的空间群为C₂h[5]-P2₁/n, a=8.544(2), b=14.494(5), c=12.309(4) Å, β=96.16(2)°; 6的空间群为C₂h[5]-P2₁/c, a=14.126(3), b=6.805(1), c=19.182(5) Å, β=103.58(2)°。2和6的结构用SHELXTL直接法程序解出并经块矩阵最小二乘法修正, R分别为0.066和0.043。

关键词 [晶体结构测定](#) [红外分光光度法](#) [X射线衍射分析](#) [铁络合物](#) [羰基络合物](#) [碳烯](#) [质子磁共振谱法](#) [锂化合物](#) [单晶](#) [过渡金属络合物](#) [异构化反应](#) [氯苯](#) [P](#) [异戊二烯](#)

分类号 [0627](#)

Studies on olefin-coordinating transition metal carbene complexes II. Synthesis, spectral and structural studies of isomerized products of isoprene (dicarbonyl) (ethoxyarylcarbene)iron complexes and crystal structure of tetracarbonyl [ethoxy(pentachloroph

WANG TIANLAN, CHEN JIABI, XU WEIHUA, ZHANG SHIWEI, PAN ZUOHUA, TANG YOUQI

Abstract Isoprenetricarbonyliron reacts with aryllithium, RLi (R = C₆H₅, p-CH₃C₆H₄, p-CH₃OC₆H₄, p-CF₃C₆H₄), in ether at low temperature to yield acylmetallate complexes, from which, by subsequent alkylation with Et₃OBF₄ in aqueous solution at 0° the orange-red crystalline complexes with the composition C₅H₈(CO)₂FeC(OC₂H₅)R (I) formulated as isomerized products of isoprene(dicarbonyl)(ethoxyarylcarbene)iron complexes were obtained. When LiC₆Cl₅ was used as a nucleophile, the alkylation of acylmetallate intermediate formed under the same conditions gave known complex (CO)₄FeC(OC₂H₅)C₆Cl₅ (II). The mol. structures of I (R = Ph) and II have been deduced from their single crystal x-ray diffraction data.

Key words [CRYSTAL STRUCTURE DETERMINATION](#) [INFRARED SPECTROPHOTOMETRY](#) [X-RAY DIFFRACTION ANALYSIS](#) [IRON COMPLEX](#) [CARBONYL COMPLEX](#) [CARBENE](#) [PROTON MAGNETIC RESONANCE SPECTROMETRY](#) [LITHIUM COMPOUNDS](#) [SINGLE CRYSTALS](#) [TRANSITION METAL COMPLEX](#) [ISOMERIZATION REACTION](#) [CHLOROBENZENE](#) [P](#) [ISOPRENE](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(0KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [参考文献](#)

服务与反馈

- ▶ [把本文推荐给朋友](#)
- ▶ [加入我的书架](#)
- ▶ [加入引用管理器](#)
- ▶ [复制索引](#)
- ▶ [Email Alert](#)
- ▶ [文章反馈](#)
- ▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 包含“晶体结构测定” 的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)

- [王天兰](#)
- [陈家碧](#)
- [徐维铎](#)
- [章士伟](#)
- [潘佐华](#)
- [唐有祺](#)