



ELECTRONIC STRUCTURE OF TRIMETHYLENE BRIDGED FERROCENE DERIVATIVES

G. Nagy, I. Dézsi, M. Hillman

► To cite this version:

G. Nagy, I. Dézsi, M. Hillman. ELECTRONIC STRUCTURE OF TRIMETHYLENE BRIDGED FERROCENE DERIVATIVES. Journal de Physique Colloques, 1976, 37 (C6), pp.C6-471-C6-471. 10.1051/jphyscol:1976692 . jpa-00216803

HAL Id: jpa-00216803

<https://hal.science/jpa-00216803>

Submitted on 4 Feb 2008

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

ELECTRONIC STRUCTURE OF TRIMETHYLENE BRIDGED FERROCENE DERIVATIVES (*)

G. NAGY, I. DÉZSI

Central Research Institute for Physics, Budapest, Hungary

M. HILLMAN

Brookhaven National Laboratory, Upton, New York, U. S. A. 11973

Résumé. — Dans les composés étudiés ici, les cycles pentadiéniques du ferrocène sont reliés par un ou plusieurs ponts de 3 radicaux méthyliques. Une variation systématique des paramètres Mössbauer est observée en fonction du nombre et de la position des ponts. On suggère que la décroissance de l'effet quadrupolaire et du déplacement isomérique, c'est-à-dire l'augmentation de la délocalisation des électrons du fer, est reliée au changement de planéité dans les cycles pentadiéniques. Lorsque les dérivés du ferrocène ont deux (ou plus) ponts, non seulement la coplanarité des cycles est modifiée, mais également la planéité de chaque cycle pentadiénique.

Abstract. — In the derivatives under investigation the cyclopentadienyl rings of the ferrocene are linked by one or more bridges of three methylene groups.

A systematic change of the Mössbauer parameters was found as a function of the number and the position of the bridges (table I).

TABLE I

Compound (composés)	Quadrupole splitting (effet quadrupolaire) mm/s \pm 0.01	Isomer shift (déplacement isomérique) mm/s \pm 0.01
Ferrocene	2.38	0.44
1, 1'-trimethylene-ferrocene	2.26	0.42
1, 1', 3, 3'-bistrimethylene-ferrocene	2.02	0.33
1, 1', 2, 2'-bistrimethylene-ferrocene	2.17	0.38
1, 1', 2, 2', 4, 4'-tristrimethyleneferrocene	1.82	0.26
1, 1', 2, 2', 3, 3'-tristrimethyleneferrocene	1.96	0.32
1, 1', 2, 2', 3, 3', 4, 4'-tetrakistrimethyleneferrocene	2.14	0.35

It is suggested that the decrease of QS and IS values, i. e. the increase of the electron delocalization from the iron, is connected with the change of the co-planarity and the planarity of the cyclopentadienyl rings. The preferred interring separation of cc 3.3 Å in ferrocene cannot be spanned by a trimethylene chain unless the rings become mutually inclined, i. e. the co-planarity of the rings is changed. In cases where the ferrocene derivatives have two or more bridges not only the co-planarity of the rings is changed, but also the planarity of each cyclopentadienyl ring.

(*) Journal of organometallic chemistry.