

Стекинг метилованих циклопентадиенилних лиганата у кристалним структурама комплекса прелазних метала

Душан П. Маленов¹, Јелена П. Благојевић Филиповић², Снежана Д. Зарић¹

¹ *Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Студентски трг 12-16, Београд, Србија*

² *Иновациони центар Хемијског факултета, Студентски трг 12-16, Београд, Србија*

Кристалне структуре метилованих (Me) циклопентадиенилних (Cp) комплекса су систематски анализирани претрагом Кембричке базе структурних података (CSD) и описани су преовлађујући положаји метилованих Cp лиганата у стекинг оријентацији. Стекинг контакти Me₅Cp комплекса су далеко најчесталији (3632 контакта), а затим следе MeCp (446) и Me₄Cp (151). Контакти у највећој мери садрже симултане паралелно-померене стекинг интеракције и CH/π интеракције, али се јављају и саме паралелно-померене стекинг интеракције и стекинг интеракције са великим хоризонталним померањима. Са повећањем броја метил-супституената опада заступљеност стекинга на великим померањима (48,4% за MeCp, 28,5% за Me₄Cp, 3,8% за Me₅Cp), пошто CH/π интеракције стабилизују геометрије на мањим померањима. Различити типови интеракција се могу објаснити на основу мапа електростатичких потенцијала испитиваних комплекса.

Stacking of the methylated cyclopentadienyl ligands in crystal structures of transition metal complexes

Dušan P. Malenov¹, Jelena P. Blagojević Filipović², Snežana D. Zarić¹

¹ *University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia*

² *Innovative Centre of the Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia*

Crystal structures of the methylated cyclopentadienyl (Cp) complexes are systematically analysed by searching the Cambridge Structural Database (CSD) and the preferred positions of the stacked methylated Cp ligands are described. The stacking contacts of the Me₅Cp complexes are by far the most frequently found in the CSD (3632 contacts), followed by MeCp (446) and Me₄Cp (151). These contacts mostly correspond to simultaneous parallel-displaced stacking and CH/π interactions, as well as parallel-displaced stacking and stacking interactions at large horizontal displacements. With increasing the number of methyl substituents the occurrence of stacking with large displacements decreases (48.4% for MeCp, 28.5% for Me₄Cp, 3.8% for Me₅Cp), because CH/π interactions stabilize geometries with smaller displacements. Different interaction types can be explained by the electrostatic potential maps of the studied complexes.