

Remarkable paramagnetically shifted ^1H and ^2H NMR spectra of iron(II) complexes of 2-aza-21carbaporphyrin: an evidence for agostic interaction.

Autorzy

Krystyna Rachlewicz
S.-L. Wang
C.-H. Peng
Chen-Hsiung Hung
Lechosław Latos-Grażyński

Rok wydania

2003

Czasopismo

Inorganic Chemistry

Numer woluminu

42

Strony

7348-7350

DOI

10.1021/ic034886u

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

Iron(II) 2-aza-21-carbaporphyrins have been characterized by paramagnetically shifted ^1H and ^2H NMR spectra. The high-spin iron(II) complex (*HCTPPH*) $\text{Fe}^{\text{II}}\text{Br}$ displays the β -H resonances which reflect the combination σ and π routes of spin density delocalization. The uniquely large isotropic shift of the inner H(21) hydrogen (812 ppm, 298 K) indicates an $\text{Fe}^{\text{II}}\text{--}\{\text{C}(21)\text{--H}\}$ agostic interaction.

Słowa kluczowe

Hydrogen, Iron, Nuclear magnetic resonance spectroscopy, Pyrroles, Resonance structures

Adres publiczny

<https://doi.org/10.1021/ic034886u>

Strona internetowa wydawcy

<https://www.acs.org/content/acs/en.html>