Uniwersytet Wrocławski

Repozytorium

Plik pochodzi z repozytorium Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego

A novel rhenium(III) complex with bis(pyrazol-1-yl)methane: X-ray structure and DFT calculations for [$ReCl_3$(bpzm)(PPh_3)].

Autorzy

Barbara Machura

R. Penczek

Rafał Kruszyński

Julia Kłak

Jerzy Mroziński

Joachim Kusz

Rok wydania

2007

Czasopismo

Polyhedron

Numer woluminu

26

Strony

4833-4840

DOI

10.1016/j.poly.2007.06.040

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

The [$ReCl_3$(MeCN)(PPh_3)$_2$] complex reacts with bis(pyrazol-1-yl)methane (bpzm) to give [$ReCl_3$(bpzm)(PPh_3)]. This compound has been studied by IR, UV–Vis spectroscopy, magnetic measurement and X-ray crystallography. The molecular orbital diagram of [$ReCl_3$(bpzm)(PPh_3)] has been calculated with the density functional theory (DFT) method. The spin-allowed triplet–triplet electronic transitions of [$ReCl_3$(bpzm)(PPh_3)] have been calculated with the time-dependent DFT method, and the UV–Vis spectrum of the title compound has been discussed on this basis. The magnetic behavior is characteristic of a mononuclear d^4 low-spin octahedral Re(III) complex ($^3T_{1g}$ ground state) and arises because of the large spin–orbit coupling (ζ = 2500 cm^{-1}), which gives a diamagnetic ground state.

Słowa kluczowe

Rhenium(III) complexes, Bis(pyrazol-1-yl)methane ligand, X-ray structure, DFT calculations, Magnetic measurement

Adres publiczny

https://doi.org/10.1016/j.poly.2007.06.040

Strona internetowa wydawcy

http://www.elsevier.com

Plik został wygenerowany dnia 2026-11-13 09:54:38

Adres w repozytorium https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/6uytRIg.