Uniwersytet Wrocławski

Repozytorium

Plik pochodzi z repozytorium Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego

Synthesis, crystal, molecular and electronic structure of $[ReOCl_3(phen)]$ and $[ReCl_2(phen)(PPh_3)_2](ReO_4)$ complexes.

Autorzy

Barbara Machura

Rafał Kruszyński

Maria Jaworska

Julia Kłak

Jerzy Mroziński

Rok wydania

2006

Czasopismo

Polyhedron

Numer woluminu

25

Strony

2537-2549

DOI

10.1016/j.poly.2006.02.021

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

The reactions of $[ReOCl_3(OAsPh_3)(AsPh_3)]$ and $[ReOCl_3(PPh_3)_2]$ with 1,10-phenanthroline (phen) have been examined and the complexes $[ReOCl_3(phen)]$ (**1**) and $[ReCl_2(phen)(PPh_3)_2](ReO_4)$ (**2**) have been obtained. The crystal and molecular structures of **1** and have been determined. The geometric parameters of **1** and **2** have been examined with the density functional theory (DFT) method. The spin-allowed electronic transitions have been calculated with the time-dependent DFT method for $[ReOCl_3(phen)]$, $[ReCl_2(phen)(PPh_3)_2]^+$ cation and anion, and the UV–Vis spectra of the title compounds have been discussed on this basis.

Słowa kluczowe

Rhenium oxo complexes, Phenanthroline, X-ray structure, DFT calculations

Adres publiczny

https://doi.org/10.1016/j.poly.2006.02.021

Strona internetowa wydawcy

http://www.elsevier.com

Plik został wygenerowany dnia 2026-11-12 22:00:38

Adres w repozytorium https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/7Aor04l.