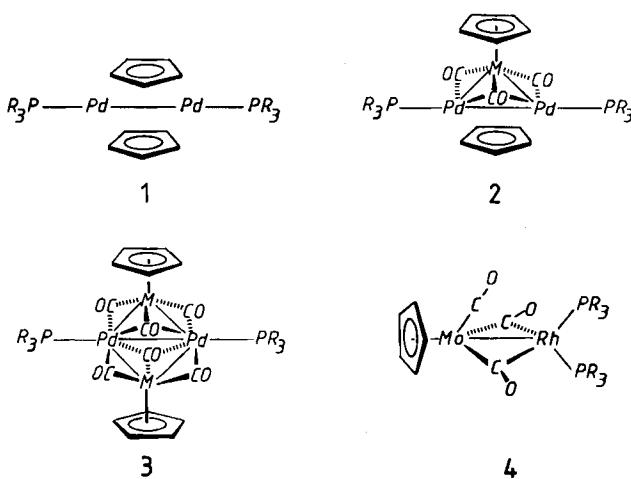


- [7] **Arbeitsvorschrift:** 2a-„Si“: Die Suspension von 2.50 g Diolphase (LiChrosorb® Diol 5  $\mu\text{m}$  (Merck, Darmstadt), C = 6.64%, H = 1.59%) in 20 mL wasserfreiem Dioxan wird im  $\text{N}_2$ -Strom mit der Lösung von 1.50 g Methacrylsäureanhydrid in 10 mL wasserfreiem Dioxan sowie mit 0.80 g Diisopropylethylamin in 30 mL wasserfreiem Dioxan versetzt, bei Raumtemperatur (RT) 30 min gerührt, nach 24 h bei RT über einen G4-Glasfilteriegel abgesaugt und mit 100 mL Dioxan gewaschen. Nach Trocknung im Hochvakuum bei RT erhält man ein schneeweißes Präparat (C = 8.27%, H = 1.76%). Die Suspension von 2.5 g dieses Silicagel gebundenen Methacrylsäureesters in 10 mL wasserfreiem Toluol wird unter  $\text{N}_2$  mit der Lösung von 7.5 g 1a in 20 mL Toluol sowie der Lösung von 22 mg Azobis(isobutyronitril) in 10 mL Toluol versetzt und unter Rühren 15 min bei 80 °C gehalten. Dann bricht man die Polymerisation durch Zugabe einer Lösung von 200 mg 4-*tert*-Butylbrenzcatechin in 10 mL Toluol ab, filtriert über eine G4-Glasfilternutsche und wäscht mit Toluol, Dioxan, *n*-Hexan sowie 2-Propanol. Nach Trocknen im Vakuum erhält man ca. 3.0 g 2a-„Si“ als weißes Präparat, C = 21.35%, H = 3.1%, N = 1.16%. Entsprechend werden 2b-„Si“ und 2c-„Si“ aus 1b bzw. 1c erhalten; jedoch dauert die Polymerisation 30 statt 15 min.
- [8] **Arbeitsvorschrift:** Die Adsorbentien 2-„Si“ werden als Suspension in 30 mL 2-Propanol bei 450–500 bar in Stahlsäulen (250  $\times$  4 mm) gefüllt. Chromatographiert werden jeweils Lösungen von 3–15  $\mu\text{g}$  des Racemats in Dioxan mit einer Fließgeschwindigkeit von 0.5–2.0 mL/min, wobei sich je nach Fließmittel und -geschwindigkeit ein Druck von 20–100 bar einstellt. Detektiert wird mit einer Durchflusszelle bei 254 nm.
- [9] **Arbeitsvorschrift:** Man erhitzt die Suspension von 2.5 g nicht weiter modifiziertem LiChrosorb® Diol 5  $\mu\text{m}$  unter Röhren in  $\text{N}_2$ -Atmosphäre in der Lösung von 7.5 g 1a und 22 mg Azobis(isobutyronitril) in 40 mL wasserfreiem Toluol [10] 15 min auf 80 °C, bricht dann die Reaktion durch Zugabe von 200 mg 4-*tert*-Butylbrenzcatechin in 10 mL Toluol ab, wäscht wie in [7] beschrieben und erhält ca. 2.8 g eines weißen Präparats, C = 12.48%, H = 2.06%, N = 0.65%. FT-IR:  $\tilde{\nu}$  = 1680 (Amid), 1732  $\text{cm}^{-1}$  (Ester). Die Beladung des Silicagels mit dem Polymerisat beträgt etwa 10 Gew.-%.
- [10] Mit dem weniger polaren Cyclohexan anstelle von Toluol als Lösungsmittel wird die gleiche Beladung mit Polymerisat bereits mit 0.75 g 1a erhalten.

## Die Isolobal-Analogie „ $\text{d}^6\text{-CpM(CO)}_3^\ominus \longleftrightarrow \text{Cp}^\ominus$ “ \*\*

Von Peter Hofmann\* und Helmut R. Schmidt

Das Isolobal-Konzept<sup>[1]</sup> hat sich vor allem in der Organometall-Chemie als tragfähiges Prinzip bei der Beschreibung komplizierter Strukturen und Bindungsverhältnisse sowie bei der Syntheseplanung<sup>[2]</sup> erwiesen. Wir zeigen hier eine interessante isolobale Analogie zwischen dem ubiquitären Liganden  $\text{C}_5\text{H}_5$  ( $\text{Cp}^\ominus$ ) und Tricarbonyl( $\eta^5$ -cyclopentadienyl)metallat-Ionen [ $(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)\text{M}(\text{CO})_3^\ominus$  ( $\text{M} = \text{Cr, Mo, W}$ ) mit  $\text{d}^6$ -Elektronenkonfiguration des Metalls auf.



[\*] Prof. Dr. P. Hofmann, Dipl.-Chem. H. R. Schmidt  
Anorganisch-chemisches Institut der Technischen Universität München  
Lichtenbergstraße 4, D-8046 Garching

[\*\*] Diese Arbeit wurde von der Deutschen Forschungsgemeinschaft und dem Fonds der Chemischen Industrie gefördert.

In neuerer Zeit sind bimetallische Sandwichverbindungen und Cluster bekannt und strukturell charakterisiert worden, in denen  $\text{Cp}^\ominus$ -Liganden und  $\text{CpM(CO)}_3^\ominus$ -Einheiten einander offenbar ersetzen können. Beispiele sind 1<sup>[3]</sup>, 2<sup>[4]</sup> und 3<sup>[5]</sup>. Untersuchungen der Elektronenstruktur von 1 und seiner Analoga zeigen<sup>[6]</sup>, daß  $\text{Cp}^\ominus$  hier nur als Vier-elektronendonator fungiert, was bei Clustern wie 2 und 3 anscheinend den M-Pd-Metall-Metall-Wechselwirkungen und  $\mu_2$ - sowie  $\mu_3$ -CO-Brücken zwischen den Metallen entspricht. Auch die einkernigen Gruppen  $\text{CpNi}(\text{CO})^\ominus$ ,  $\text{Ni}(\text{PR}_3)_2^\ominus$ ,  $\text{Rh}(\text{PR}_3)_2^\ominus$  oder  $\text{Cu}(\text{PR}_3)_2^\ominus$  sind als Bindungspartner von  $\text{CpM(CO)}_3^\ominus$ -Einheiten bekannt<sup>[7]</sup>, wobei jeweils Wechselwirkungen sowohl zwischen M und dem zweiten Metall als auch zwischen diesem und zwei Carbonyl-C-Atomen des  $\text{CpM(CO)}_3^\ominus$ -Fragments auftreten, wie etwa in 4<sup>[7c]</sup>. Seit kurzem kennt man zudem einen  $\text{Pd}_3\text{Mo}$ -Cluster<sup>[8]</sup>, in welchem  $\text{CpMo}(\text{CO})_3^\ominus$  als Sechselektronenligand vorliegt. Die in Kenntnis dieser Strukturen zu vermutende<sup>[5b]</sup> isolobale Beziehung zwischen  $\text{Cp}^\ominus$  und  $\text{d}^6\text{-CpM(CO)}_3^\ominus$  in Systemen wie 2, 3 oder 4 und die generelle Fähigkeit solcher  $\text{d}^6$ -Bausteine,  $\text{Cp}^\ominus$  in variablen Bindungssituationen zu vertreten, ist Gegenstand dieses Beitrags.

Entscheidend für die elektronische Verwandtschaft zu  $\text{Cp}^\ominus$  sind die höchsten besetzten Valenz-MOs von  $\text{CpM(CO)}_3^\ominus$ , 1a<sub>1</sub> und 1e<sup>[9]</sup>, die  $z^2$ -,  $x^2\text{-}y^2$ - und xy-Charakter am Metallzentrum aufweisen („pseudo-t<sub>2g</sub>-Satz“)<sup>[1b]</sup> und  $\pi^*$ -Anteile der drei CO-Liganden bindend eingemischt haben.

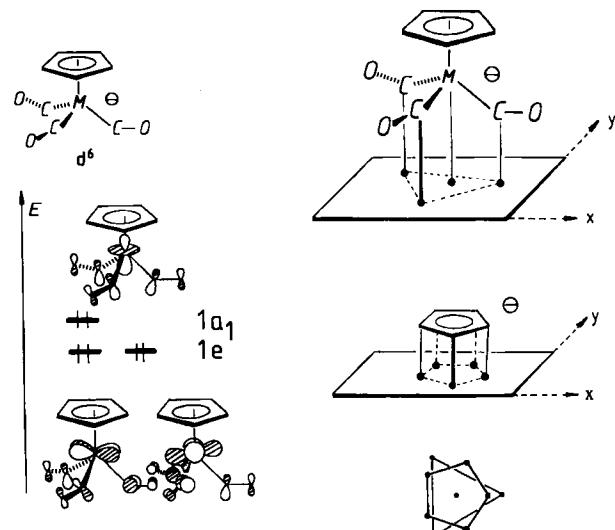


Abb. 1. Links: Qualitative Darstellung der drei höchsten besetzten Valenz-MOs von  $\text{CpMo}(\text{CO})_3^\ominus$  [10]; rechts (von oben nach unten): Ebenen für die Konturdarstellung der MOs (siehe Abb. 2) von  $\text{CpMo}(\text{CO})_3^\ominus$  und von  $\text{Cp}^\ominus$ ; Größenvergleich von  $\text{Cp}$ -Fünfring und  $\text{C}_3$ -Dreieck der Carbonyl-C-Atome von  $\text{CpMo}(\text{CO})_3^\ominus$ .

Abbildung 1 zeigt links diese drei MOs in qualitativer Darstellung (für abgewinkelte M-C-O-Einheiten wie in 2 oder 3), Abbildung 2 gibt links ihre Konturdarstellung<sup>[10]</sup> in einer Ebene unterhalb der drei Carbonyl-C-Atome wieder, vergleichbar mit der entsprechenden Darstellung der drei besetzten  $\pi$ -MOs von  $\text{Cp}^\ominus$  in Abbildung 2 rechts. Aussehen und nodale Eigenschaften der jeweils drei MOs sind für beide Systeme in der gezeigten Ebene, d. h. gegenüber einem potentiellen Bindungspartner an dieser Stelle, sehr ähnlich;  $\text{Cp}$ -Fünfring und  $\text{C}_3$ -Dreieck der Carbonyl-C-Atome haben zudem vergleichbare Dimensionen (siehe Abb. 1, rechts).

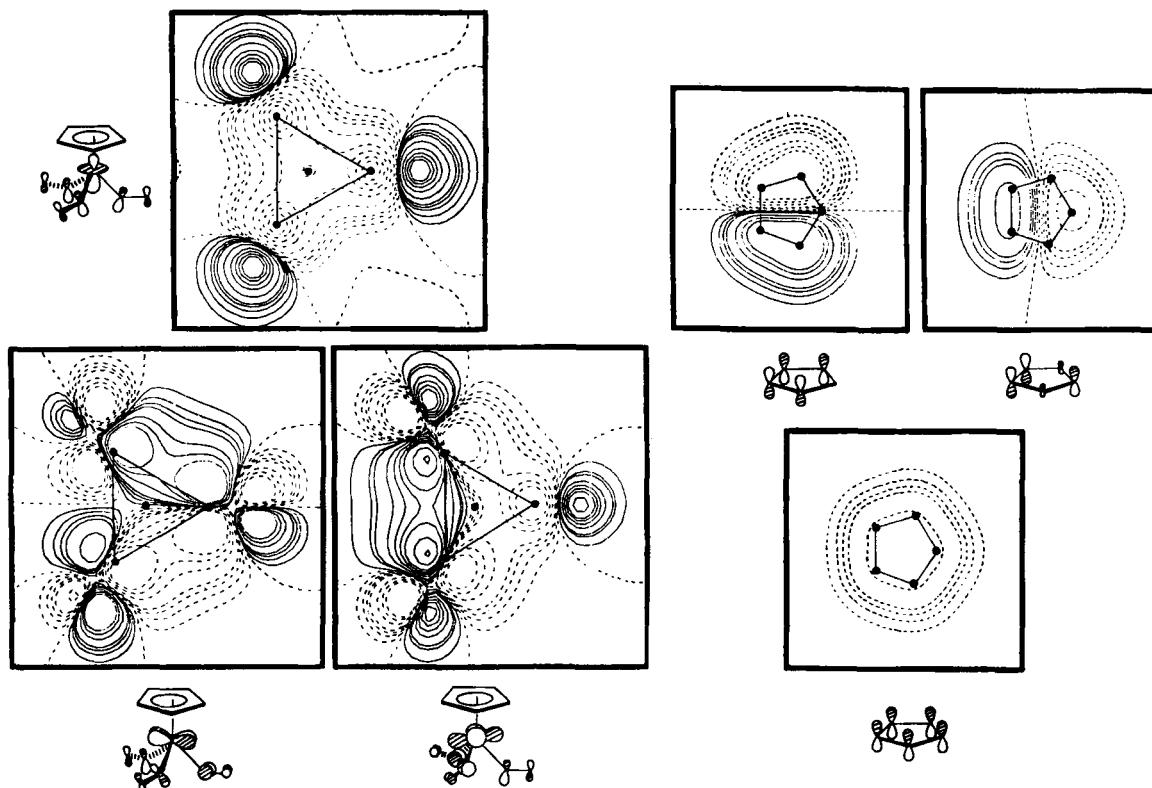


Abb. 2. Links: Konturdarstellung der drei höchsten besetzten Valenz-MOs von  $\text{CpMo}(\text{CO})_3$  [10] in einer Ebene unterhalb der drei Carbonyl-C-Atome; rechts: entsprechende Darstellung für  $\text{Cp}^\ominus$  (siehe Abb. 1).

Wichtig ist, daß die zur Bindung an andere Fragmente verfügbaren Bereiche der Wellenfunktionen von  $\text{CpM}(\text{CO})_3$  jeweils die Carbonyl-C-Atome *und* das Metallzentrum involvieren (im Unterschied etwa zu anderen „Tripod“-Liganden<sup>[11]</sup>), so daß Überlappung mit einem zweiten Metallfragment  $\text{M}'\text{L}_n$  notwendigerweise *auch*  $\text{M}\text{-M}'$ -Wechselwirkung bedingt. Je nach Anzahl und Symmetrie der Acceptor-MOs<sup>[11]</sup> eines Bindungspartners  $\text{M}'\text{L}_n$  kann  $\text{CpM}(\text{CO})_3$  formal zwei, vier oder sechs Elektronen liefern und, analog zu  $\eta^1$ -,  $\eta^2$ ... $\eta^5$ -gebundenen Cp-Ringen,  $\text{M}'\text{L}_n$ -Fragmente mehr oder weniger symmetrisch an Carbonyl-C-Atome *und* M binden. Wie für die  $\text{Cp}^\ominus$ -Ringe in 1 und 2 findet man praktisch ungehinderte Rotation auch der  $\text{CpM}(\text{CO})_3$ -Halbsandwichfragmente in 2 und 3. Da die MOs 1a<sub>1</sub> und 1e fast entartet sind, wird die Position von Acceptorgruppen mit Bedarf für weniger als sechs Elektronen (z. B.  $\text{Rh}(\text{PR}_3)_2$  oder  $\text{Cu}(\text{PR}_3)_2$ ) recht flexibel einstellbar sein. Für reine  $\sigma$ -Acceptoren ( $\text{CH}_3^\ominus$ ,  $\text{H}^\ominus$ ) ist eine direkte  $\sigma$ -Bindung an das Metall („Pianostool“-Struktur) natürlich günstiger. Interessanterweise werden bei  $\text{Cu}(\text{PR}_3)_2$  ( $\text{d}^{10}\text{-ML}_2$ ) beide Strukturalternativen gefunden<sup>[7c]</sup>.  $\text{M}'\text{L}_n$ -Fragmente mit drei Acceptor-MOs wie  $\text{Mn}(\text{CO})_3$ ,  $\text{CpFe}^\ominus$  oder  $(\eta^6\text{-C}_6\text{H}_6)\text{Mn}^\ominus$  sollten  $\text{CpM}(\text{CO})_3$  symmetrisch und sandwichartig binden; über das Beispiel des Komplexes aus  $(\eta^4\text{-C}_4\text{H}_4)\text{Co}^\ominus$  und  $\text{CpW}(\text{CO})_3$  berichten Härter et al.<sup>[12]</sup>.

Es bleibt experimentell auszuloten, inwieweit die aufgezeigte isolobale Analogie  $\text{d}^6\text{-CpM}(\text{CO})_3 \longleftrightarrow \text{Cp}^\ominus$  auf analoge Bausteine übertragbar ist, etwa auf Neutralspezies<sup>[13]</sup> wie  $(\eta^6\text{-C}_6\text{H}_6)\text{Cr}(\text{CO})_3$  oder auf  $\text{CpMn}(\text{CO})_3$  als Bindungspartner elektronisch passender, ebenfalls neutrale Fragmente. Dabei wird sicherlich auch die Redox-Kompatibilität entscheidend sein. Die für  $\text{Ni}(\text{PR}_3)_2$  (ein ungepaartes Elektron) und  $\text{CpRh}(\text{CO})$  als Bindungspart-

ner der  $\text{d}^6$ -Fragmente  $\text{CpW}(\text{CO})_3^\ominus$  und  $(\text{C}_6\text{H}_6)\text{Cr}(\text{CO})_3$  speziell beschriebenen Elektronenstrukturen<sup>[7b, 14]</sup> ergeben sich ebenfalls aus der Analogie  $\text{d}^6\text{-CpM}(\text{CO})_3 \longleftrightarrow \text{Cp}^\ominus$ , deren Wert – mit den bekannten Einschränkungen<sup>[1, 2]</sup> des Isolobal-Prinzips und in Ergänzung alternativer Konzepte – in der einfachen Beschreibungsweise der elektronischen und strukturellen Verwandtschaft komplizierter Moleküle und in der Möglichkeit zur Syntheseplanung liegen sollte.

Eingegangen am 28. April 1986 [Z 1751]

CAS-Registry-Nummern:

$\text{Cp}^\ominus$ : 12127-83-2 /  $[\text{CpCr}(\text{CO})_3]^\ominus$ : 48121-47-7 /  $[\text{CpMo}(\text{CO})_3]^\ominus$ : 12126-18-0 /  $[\text{CpW}(\text{CO})_3]^\ominus$ : 12126-17-9.

- [1] a) R. Hoffmann, *Angew. Chem.* 94 (1982) 725; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 21 (1982) 711; b) T. A. Albright, J. K. Burdett, M. H. Whangbo: *Orbital Interactions in Chemistry*, Wiley, New York 1985.
- [2] F. G. A. Stone, *Angew. Chem.* 96 (1984) 85; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 23 (1984) 85.
- [3] H. Werner, *Adv. Organomet. Chem.* 19 (1981) 155.
- [4] H. Werner, H.-J. Kraus, P. Thometzek, *Chem. Ber.* 115 (1982) 2914.
- [5] a) R. Bender, P. Braunstein, J.-M. Jud, Y. Dusausoy, *Inorg. Chem.* 22 (1983) 3394; b) analoge Cluster sind auch mit Pt statt Pd bekannt: *ibid.* 23 (1984) 4489.
- [6] Vorgetragen auf der Chemiedozententagung 1982, Kaiserslautern; P. Hoffmann, R. Hoffmann, P. Dobosh, unveröffentlichte Ergebnisse, auszugsweise wiedergegeben in [3].
- [7] a)  $\text{CpNi}(\text{CO})^\ominus$ : T. Madach, H. Vahrenkamp, *Chem. Ber.* 113 (1980) 2675; b)  $\text{Ni}(\text{PR}_3)_2^\ominus$ : L. Carlton, W. E. Lindsell, K. J. McCullough, P. N. Preston, *Organometallics* 4 (1985) 1138; c)  $\text{Rh}(\text{PR}_3)_2^\ominus$  und  $\text{Cu}(\text{PR}_3)_2^\ominus$ : L. Carlton, W. E. Lindsell, K. J. McCullough, P. N. Preston, *J. Chem. Soc. Dalton Trans.* 1984, 1693.
- [8] P. Braunstein, J. Fischer, D. Matt, M. Pfeffer, *J. Am. Chem. Soc.* 106 (1984) 410.
- [9]  $\text{Cp}^\ominus$  als rotationssymmetrisch betrachtet, pseudo- $\text{C}_3v$ -Symmetrie.
- [10] Gezeichnet sind 1a<sub>1</sub> und 1e für M = Mo aus EH-MO-Rechnungen.
- [11] W. Kläui, M. Scotti, M. Valderrama, S. Rojas, G. M. Sheldrick, P. G. Jones, T. Schroeder, *Angew. Chem.* 97 (1985) 697; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 24 (1985) 638.

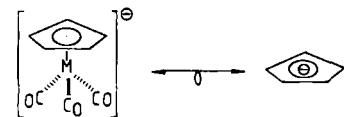
- [12] P. Härtter, H. Pfisterer, M. L. Ziegler, *Angew. Chem.* 98 (1986) 812; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 25 (1986) Nr. 9.
- [13] a) Das bekannte  $[(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2\text{Cr}_2(\mu_2\text{-CO})_3]$  kann als Analogon von  $[(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2\text{Cr}]$  angesehen werden: P. Klüfers, L. Knoll, C. Reiners, K. Reiß, *Chem. Ber.* 118 (1985) 1852; b)  $[(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)_2\text{Fe}_2(\mu_2\text{-CO})_3]$  entspricht dann dem Nickelocen und hat wie dieses zwei ungepaarte Elektronen: J. P. Blaha, B. E. Bursten, J. C. Dewan, R. B. Frankel, C. L. Randolph, B. A. Wilson, M. S. Wrighton, *J. Am. Chem. Soc.* 107 (1985) 4561; c) heterodinukleare Mn-Cr- und Mn-Fe-Systeme sind bereits bekannt (ohne Röntgen-Strukturanalysen): W. A. Herrmann, C. E. Barnes, R. Serrano, B. Kounbouris, *J. Organomet. Chem.* 256 (1983) C30.
- [14] R. D. Barr, T. B. Marder, A. G. Orpen, I. D. Williams, *J. Chem. Soc. Chem. Commun.* 1984, 112.

## Die Komplex-Ionen $[\text{C}_5\text{H}_5\text{M}(\text{CO})_3]^\ominus$ ( $\text{M} = \text{Mo, W}$ ) als 6e-Liganden: Synthese und Molekülstruktur von $[(\eta^4\text{-C}_4\text{Me}_4)\text{Co}(\mu\text{-CO})_3\text{M}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)]$ ( $\text{M} = \text{Mo, W}^{**}$ )

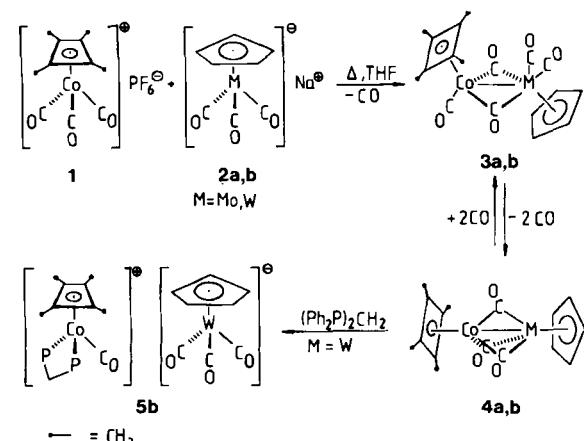
Von Peter Härtter\*, Heike Pfisterer und  
Manfred L. Ziegler

Die Carbonylmetallate  $[(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)\text{M}(\text{CO})_3]^\ominus$  der Chromreihe sind gegenüber Acceptor-molekülen zu großer Variation ihres Bindungsverhaltens befähigt<sup>[1,2]</sup>: Sie können ohne CO-Verbrückung direkt über das Metall koordiniert sein, aber auch als Zwei-, Vier- oder Sechselektronenliganden wirken<sup>[3-5]</sup>.

Anhand einer theoretischen Analyse dieses Koordinationsverhaltens zeigten Hofmann und Schmidt die isolobale Beziehung der Organometall-Fragmente  $[(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)\text{M}(\text{CO})_3]^\ominus$  mit dem Cyclopentadienid-Ion  $[\text{C}_5\text{H}_5]^\ominus$  in strukturverwandten Halbsandwich-Komplexen auf<sup>[6]</sup>.



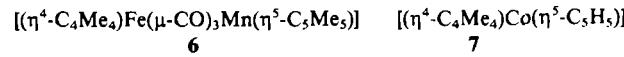
Wir fanden nun die ersten Beispiele einer symmetrischen Koordination von  $[(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)\text{M}(\text{CO})_3]^\ominus$  ( $\text{M} = \text{Mo, W}$ ) in zweikernigen, sandwichartigen Komplexen.



[\*] Dr. P. Härtter  
Anorganisch-chemisches Institut der Technischen Universität München  
Lichtenbergstraße 4, D-8046 Garching  
Dr. H. Pfisterer, Prof. Dr. M. L. Ziegler  
Anorganisch-chemisches Institut der Universität  
Im Neuenheimer Feld 270, D-6900 Heidelberg 1

[\*\*] Diese Arbeit wurde von der Deutschen Forschungsgemeinschaft, dem Fonds der Chemischen Industrie und dem Bundesministerium für Forschung und Technologie gefördert.

Der kationische Tetramethylcyclobutadien-Komplex  $1^{[7]}$  reagiert in Tetrahydrofuran (THF) mit den Carbonylmetallaten  $2\text{a,b}$  übersichtlich zu den neuen zweikernigen CoMo- und CoW-Komplexen  $3\text{a}$  bzw.  $3\text{b}$ , die bei schoener säulenchromatographischer Aufarbeitung in guten Ausbeuten erhältlich sind<sup>[8]</sup>, beim Erhitzen aber in die carbonylärmeren Derivate  $4\text{a}$  bzw.  $4\text{b}$  übergehen.



Die Primärkomplexe  $3\text{a}$  bzw.  $3\text{b}$  weisen herkömmliche Carbonyl-Brückenliganden auf ( $\nu_{\text{CO}} = 1843$  bzw.  $1856 \text{ cm}^{-1}$ ,  $n\text{-Hexan}$ ), während in den Derivaten  $4\text{a}$  bzw.  $4\text{b}$  aufgrund der CO-Bandenlage bei  $1803$  bzw.  $1805 \text{ cm}^{-1}$  Carbonyl-Brücken in ungewöhnlicher Koordination zu vermuten waren. Auffällig war auch die starke Hochfeldverschiebung der Methyl-Signale in den  $^1\text{H-NMR}$ -Spektren ( $\delta = 1.05$  bzw.  $0.92$ ,  $\text{C}_6\text{D}_6$ ) im Vergleich zu den Spektren ähnlicher oder gar isoelektronischer Komplexe wie z. B.  $6^{[9]}$ , in denen diese Signale üblicherweise im Bereich  $\delta = 1.5 \dots 2.1$  erscheinen<sup>[10]</sup>. Nur beim langbekannten, auf den ersten Blick aber sehr unähnlichen einkernigen Sandwich-Komplex  $7^{[11]}$  findet sich das Methyl-Signal des Vierringliganden bei  $\delta = 1.22$ .

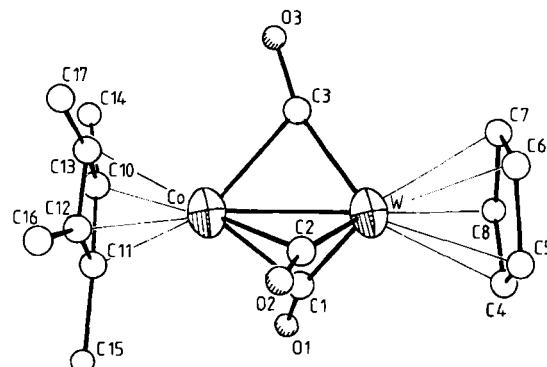


Abb. 1. Molekülstruktur des CoW-Komplexes  $4\text{b}$  im Kristall (ohne Wasserstoffatome), Monoklin (aus  $n\text{-Hexan}/\text{Toluol}$ , 98 + 2 Vol.-%), Raumgruppe  $C_{2h}^5 \cdot P2_1/n$ ;  $a = 728.6(2)$ ,  $b = 2361.6(4)$ ,  $c = 1010.7(2)$  pm,  $\beta = 110.74(2)^\circ$ ,  $Z = 4$ ;  $R_{\text{wiss}} = 0.071$ ,  $R_{\text{w}} = 0.053$ . Ausgewählte Abstände [pm] und Winkel [ $^\circ$ ]: W-Co 235.6(0), W-C1 196(3), W-C2 195(2), W-C3 188(3), Co-C1 219(3), Co-C2 215(4), Co-C3 204(2), C1-O1 115(3), C2-O2 121(3), C3-O3 121(4); W-C(1...3)-O(1...3) 162(2), Co-C(1...3)-O(1...3) 126(2), Co-W-C(1...3) 56.1-60.3, W-Co-C(1...3) 50.0-50.8, W-C1-CO 60(1), W-C2-Co 70(1), W-C3-Co 74(1).

Zur Klärung dieses Sachverhalts wurde die Kristallstruktur von  $4\text{b}$  röntgendiffraktometrisch bestimmt (Abb. 1)<sup>[12]</sup>. Die beiden Ringliganden sind zueinander parallel und bilden mit der CoW-Bindungssachse annähernd rechte Winkel. Das  $(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)\text{W}(\text{CO})_3$ -Fragment hat eine leicht verzerrte trigonal-pyramidalen Struktur und ist über seine Carbonyl-Gruppen (Interligandwinkel 94–97°) an die  $(\eta^4\text{-C}_4\text{Me}_4)\text{Co}$ -Einheit fixiert, deren Metallatom damit ebenfalls in das Zentrum einer Pyramidenstruktur gerät. Als Folge der Metallfixierung der  $(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)\text{W}(\text{CO})_3$ -Teilstruktur bilden die W-C-O-Gruppen einen Winkel von ca. 162°. Die M-CO-Abstände spiegeln ebenfalls die polare Struktur des Komplexes wider, wobei die Abstände vom Co-Atom, dem Zentrum des Acceptor-teils, zu C(1...3) erheblich größer sind als die W-C(1...3)-Abstände. Vergleichbare Unterschiede werden in anderen polarisierten Zweikern-Komplexen gefunden<sup>[13]</sup>. Zwar beträgt der Co-W-Abstand nur 235.6 pm, was mit einer formalen Dreifachbindung korreliert werden kann, doch ist es unter Berücksichtigung