

Autoren, die eine „Zuschrift“ veröffentlichen wollen, sollten vor der Abfassung ihres Manuskripts unbedingt die „Hinweise für Autoren“ lesen, die jeweils im Januarheft eines Jahrgangs nach dem Inhaltsverzeichnis gedruckt sind; auf Anforderung können sie auch von der Redaktion erhalten werden.

Reaktivität von Cobaltatomen gegenüber 1,2,3,4,5-Pentamethylcyclopentadien:

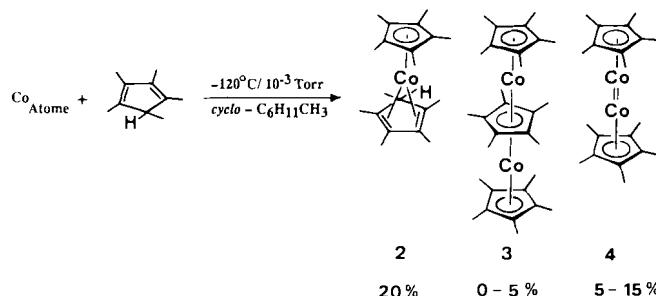
Synthese und Struktur von Bis(η^5 -pentamethylcyclopentadienyl)(μ_2 - η^5 : η^5 -pentamethylcyclopentadienyl)dicobalt und Bis(η^5 -pentamethylcyclopentadienyl)dicobalt **

Von Jörg J. Schneider *, Richard Goddard, Stefan Werner und Carl Krüger

Professor Kurt Schaffner gewidmet

Ein gezielter Clusteraufbau mit Hilfe von „nackten“ Metallatomen blieb bisher auf wenige Fälle beschränkt^[1], in der Regel entstehen definierte Cluster in Metallatomreaktionen nur als Nebenprodukte^[2]. Unterbleibt der Clusteraufbau ganz, kann dies auf eine ungünstige Wahl der stöchiometrischen Verhältnisse, der Reaktionstemperatur oder anderer, schwieriger zu steuernder Reaktionsbedingungen (z. B. Metallverdampfungsgeschwindigkeit) während der Metallatomreaktion zurückzuführen sein. Wir setzten nun Cobaltatome mit 1,2,3,4,5-Pentamethylcyclopentadien (Cp^*H) um. Cp^*H erschien uns als Ligand aufgrund seiner außergewöhnlichen elektronischen Eigenschaften sowie des für die resultierenden Komplexe oftmals exzellenten Kristallisatverhaltens besonders geeignet^[3]. Wir erhielten dabei unter anderem einen Tripeldeckerkomplex sowie ein neuartiges Cp^*Co -Dimer mit ungewöhnlich kurzer Co-Co-Bindung. Bei der Reaktion von Cobaltatomen mit dem unsubstituierten Liganden Cyclopentadien (CpH) bildet sich lediglich der Sandwichkomplex (η^5 -Cyclopentadienyl)(η^4 -cyclopentadien)cobalt 1^[4]. Wie wir bereits bei Reaktionen von Nickelatomen mit mono- und disubstituierten Cyclopentadienen zeigen konnten, lässt sich bei geschickter Wahl der Reaktionsbedingungen neben der Bildung von mononuklearen Metallkomplexen auch ein Clusteraufbau erzielen^[5]. Bringt man nun unter vergleichbaren Bedingungen, d. h. bei einem Ligand/Metall-Verhältnis von ca. 2:1 bis 4:1, Cobaltatome mit Cp^*H zur Reaktion, so kann man nach säulenchromatographischer Aufarbeitung und anschließender Kristallisation des Rohprodukts die drei Cobaltkomplexe 2, 3 und 4 isolieren (Schema 1). 2 ist der zu 1 analoge permethylierte 18 VE-Co¹-Sandwichkomplex und unter den gewählten Reaktionsbedingungen (Verhältnis Cp^*H/Co_{Atome} ca. 3:1, $T = -120^\circ\text{C}$) mit ca. 20% das Hauptprodukt der Um-

setzung. 2 ist eindeutig durch die spektroskopischen Daten und die Elementaranalyse charakterisiert; die Komplexe 3 und 4 fallen als Cokristallat in wechselnden Ausbeuten (3:



Schema 1. Darstellung von 2, 3 und 4 durch Metallatomreaktion.

≤ 5%, 4: 5–15%) an (siehe *Experimentelles*). Bisher konnte nur 4 durch wiederholtes Umkristallisieren analysenrein erhalten werden. Trotz sorgfältiger Kristallisation aus gesättigten Hexanlösungen haben wir Einkristalle von 3 immer als Aufwachungen von 4 erhalten, die nur manuell getrennt werden konnten. Beide Verbindungen sind tiefschwarz und in allen gängigen Lösungsmitteln sehr gut löslich. In Lösung sind 3 und 4 luftraspurlicher als im Festzustand. Kristalle von 3 und 4 sind längere Zeit (>drei Monate) stabil.

3 konnte strukturell charakterisiert werden^[6] (Abb. 1). Die Fehlordnung in der Kristallstruktur von 3 lässt jedoch

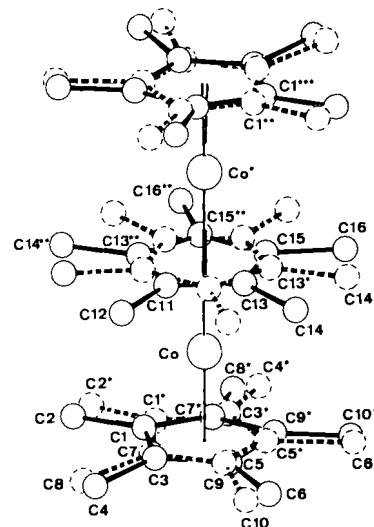


Abb. 1. Struktur von 3 im Kristall. Wichtige Bindungslängen siehe Text. Die Fehlordnung wird durch die Raumgruppensymmetrie (2/m) erzeugt.

keine ausführliche Diskussion der einzelnen Bindungslängen und -winkel zu. Die Co-Atome und die Mittelpunkte der Cp^* -Ringe sind linear angeordnet. Der Abstand des Co-Atoms zu dem mittleren Cp^* -Ring beträgt 1.770(2) Å, zu dem äußeren 1.724(1) Å. Der Co-Co¹-Abstand beträgt 3.539(1) Å, eine direkte Metall-Metall-Wechselwirkung kann somit ausgeschlossen werden. Die Verbindung ist ein weiteres Beispiel der bisher nur vier Komplexe umfassenden Gruppe von strukturell charakterisierten homoleptischen Tripeldeckerkomplexen: das von Werner und Salter synthetisierte Tripeldeckerkation $Cp_3Ni_2^+$ ^[7], der Vanadiumkom-

[*] Dr. J. J. Schneider, Dr. R. Goddard, Dipl.-Chem. S. Werner.

Prof. Dr. C. Krüger

Max-Planck-Institut für Kohlenforschung

Kaiser-Wilhelm-Platz 1, W-4330 Mülheim a. d. Ruhr 1

[**] Metallatome in der Synthese von Metallclustern, 4. Mitteilung. J. J. S. dankt Herrn Prof. Dr. G. Wilke für die Förderung dieser Arbeit. – 3. Mitteilung: J. J. Schneider, M. Nolte, C. Krüger, *J. Organomet. Chem.* 403 (1991) C4.

plex Bis(η^5 -cyclopentadienyl)(μ_2 - η^6 : η^6 -benzol)divanadium **6** von Jonas et al.^[8], der kürzlich von Lamanna et al. ebenfalls durch eine Metallatomreaktion dargestellte Komplex Bis(η^6 -mesitylen)(μ_2 - η^6 : η^6 -mesitylen)dichrom **7**^[9], sowie das Tripeldeckerkation $\text{Cp}_3^*\text{Ru}_2^+$ **8** von Rybinskaya et al.^[10]. Im Gegensatz zu **5**, **7** und **8**, die jeweils die 30/34-Valenzelektronen (VE)-Regel von Lauher und Hoffmann für Tripeldeckerkomplexe erfüllen^[11] (**5**: 34 VE, **7**, **8**: 30 VE), ist **3** – wie auch schon **6** (26 VE) – mit formal 33 VE eine Ausnahme von dieser Regel. Im ^1H -NMR-Spektrum werden demzufolge unterschiedliche paramagnetisch induzierte Verschiebungen δ_{para} für **3** beobachtet. So sind die beiden terminalen Cp^* -Ringe relativ zum Solvenssignal nach tieferem, der verbrückende Cp^* -Ring dagegen nach höherem Feld verschoben. Unterschiedliche Spinübertragungsmechanismen können hierfür die Ursache sein. Überraschenderweise ist auch **4** paramagnetisch, wie das ^1H -NMR-Spektrum zeigt. Das Vorliegen eines Triplettzustandes ist möglicherweise eine Erklärung für diese Beobachtung. EPR-Untersuchungen sowie Rechnungen^[12] sollen hier weitere Aufschlüsse bringen. Für beide Cp^* -Ringe wird erwartungsgemäß ein Singulett ($\delta_{\text{para}} = 61$) gefunden. Erste Untersuchungen des Temperaturverhaltens von **4** zeigen eine lineare Abhängigkeit zwischen δ_{para} und der reziproken Temperatur $1/T$.

Verbindung **4** ist präzedenzlos, wie die Kristallstrukturanalyse^[6] zweifelsfrei belegt (Abb. 2). Auffallend ist die han-

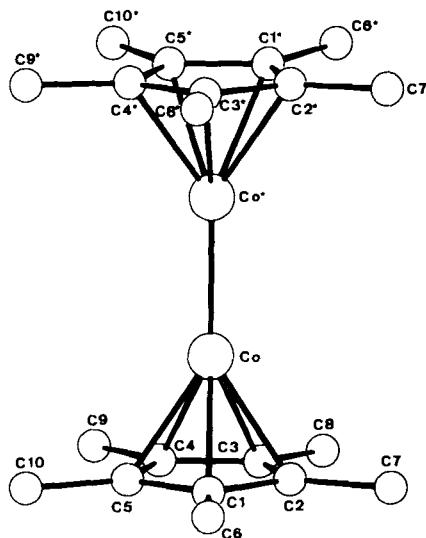


Abb. 2. Struktur von **4** im Kristall. Wichtige Bindungslängen siehe Text.

telartige, exakt lineare Anordnung der beiden Cp^*Co -Einheiten. Der Co-Co-Bindungsvektor ist senkrecht zu einer kristallographischen zweizähligen Drehachse angeordnet. Die Mittelpunkte der Cp^* -Ringe sind von den Co-Atomen 1.689(1) Å entfernt, während der entsprechende Abstand im Tripeldeckerkomplex **3** 1.724(1) Å beträgt. Eine mögliche stärkere Wechselwirkung zwischen dem Cp^* -Liganden und dem Co-Atom in **4** beeinflusst jedoch die Anordnung der Methylgruppen am Fünfring nicht; die C-Atome der Methylgruppen liegen ungefähr in der Ebene des Fünfringes. Die Co-Co-Bindungslänge entspricht mit 2.253(1) Å formal einer Doppelbindung, womit jedes Metallatom in **4** eine 16 VE-Schale erreicht. Andere ähnlich aufgebaute Verbindungen enthalten entweder zusätzlich noch verbrückende Liganden, wodurch in einigen Fällen eine Abwinklung der terminalen Ringe bewirkt wird^[13], oder sie weisen weitaus größere Metall-Metall-Abstände auf, die dann trotz zusätzli-

cher Verbrückung noch eine lineare Anordnung der Metall-Ligand-Einheiten ermöglichen^[14].

Nach ersten Untersuchungen reagiert **4** mit Ethylen oder auch CO nicht (1 bar, Raumtemperatur); es wird aus der Reaktionsmischung unverändert wiedergewonnen. Als Ursache für die Bildung des Tripeldeckerkomplexes **3** sowie des Dimers **4** sehen wir die vergleichsweise hohen Metallatomkonzentrationen im Vergleich zu den üblicherweise in Metallatomreaktionen verwendeten an^[15]. Während des Fortschreitens der Reaktion verarmt die Reaktionslösung in erheblichem Maße an freiem Liganden Cp^*H , da dieser für die primäre Bildung von **2** bzw. Cp^*Co -Einheiten verbraucht wird^[16]. Diese Cp^*Co -Einheiten können dann bei einer ausreichenden Konzentration in der Reaktionslösung zu **4** dimerisieren. Gestützt auf Matrixisolationsexperimente postulierten Ozin und Andrews bereits früher einen zu **4** analogen Komplextyp^[17], der bei der Addition von nackten Metallatomen an Bis(aren)metall-Komplexe entstanden sein soll.

Die Reaktion von hochreaktiven Cp^*Co -Einheiten mit bereits gebildetem **2** führt unter Wasserstoffabspaltung zu **3**. Denkbar wäre allerdings auch eine Reaktion von Cp^*Co -Einheiten mit gebildetem Decamethylcobaltocen unter Bildung von **3**, ähnlich der Bildung von **7** aus Mesitylen und Chromatomen^[18]. Durch Optimierung der Reaktionsbedingungen (Temperatur, Metallatom/Ligand-Verhältnis, Metallverdampfungsgeschwindigkeit etc.) hoffen wir, die Ausbeuten an **3** und **4** zu steigern, um diese Komplexe, auch im Hinblick auf mögliche interessante Folgereaktionen, in größerer Menge zugänglich zu machen.

Experimentelles

Während 2 h wurden in einem rotierenden Metalldampfreaktor [19] (80 U/min) 3 g (50.9 mmol) Cobalt in 150 mL einer auf -120°C gekühlten 5 proz. Lösung von Cp^*H in Methylcyclohexan verdampft. Gegen Ende der Reaktion hatte sich eine braunschwarze Reaktionslösung gebildet. Diese wurde bei Raumtemperatur ausgehebelt, filtriert und die erhaltene braunschwarze Reaktionslösung im Hochvakuum eingeengt. Der olige Rückstand wurde in wenig THF aufgenommen, mit 20 g Al_2O_3 (5% H_2O) versetzt und bis zur Rieselfähigkeit getrocknet. Chromatographie an Al_2O_3 (5% H_2O) mit Pentan ergab nach anschließender Kristallisation 3.3 g (10 mmol) **2** (rote Kristalle, -30°C , Ethanol/Pantan), danach wurde mit Pentan/Ether (1:1) **3** sowie **4** als schwarze Zone eluiert (Ausbeute: 2.5 g, schwarze Kristalle, -20°C , Hexan).

2: ^1H -NMR ($[\text{D}_8]$ Toluol, 200 MHz): $\delta = 1.62$ (s, 15 H; CH_3), 0.38 (d, $^3J(\text{H}, \text{H}) = 6.1$ Hz, 3 H; CH_3), 0.92 (s, 6 H; CH_3), 1.81 (s, 6 H; CH_3), 2.15 (q, $^4J(\text{H}, \text{H}) = 0.3$ Hz; 1 H); ^{13}C -NMR ($[\text{D}_8]$ Benzol, 75.5 MHz): $\delta = 9.3$ (q, $^1J(\text{C}, \text{H}) = 125$ Hz; $\text{CH}_3(\text{Cp}^*)$), 10.6 (q, $^1J(\text{C}, \text{H}) = 124$ Hz; CH_3), 11.8 (q, $^1J(\text{C}, \text{H}) = 124$ Hz; CH_3), 19.3 (q, $^1J(\text{C}, \text{H}) = 125$ Hz; CH), 54.4 (s, C_{Dien}), 55.7 (d, $^1J(\text{C}, \text{H}) = 135$ Hz; C_{sp}), 85.1 (s, C_{Dien}), 87.6 (s, $\text{Cp}^*(\text{C}_{\text{sp}})$), MS (70 eV): m/z 330 (M^+ , 10%), 315 ($M^+ - \text{CH}_3$, 100). Korrekte C, H, Co-Analyse.

3: ^1H -NMR ($[\text{D}_8]$ Toluol, 200 MHz, 30°C): $\delta = 38.8$ (s, 30 H; CH_3), -41.0 (s, 15 H; $\text{CH}_3(\mu\text{-Cp}^*)$), MS (70 eV): m/z 523 (M^+ , 21%), 329 ($M^+ - \text{Cp}^* - \text{Co}$, 100).

4: ^1H -NMR ($[\text{D}_8]$ Toluol, 200 MHz, 30°C): $\delta = 61.3$ (s, br; CH_3), MS: Zersetzung. Korrekte C, H, Co-Analyse.

Eingegangen am 30. April 1991 [Z 4599]

CAS-Registry-Nummern:

2, 135075-04-6; **3**, 135015-05-7; **4**, 135075-06-8; Cp^*H , 4045-44-7; Co, 7440-48-4.

[1] a) F. A. Vollenbroek, P. C. P. Bouton, J. P. van den Berg, J. J. Bour, *Inorg. Chem.* 17 (1978) 1345; b) J. W. A. van Velden, J. J. Bour, F. A. Vollenbroek, P. T. Beurskens, J. M. Smits, *J. Chem. Soc. Chem. Commun.* 1979, 1162.

[2] a) L. Vasquez, H. Pritzkow, U. Zenneck, *Angew. Chem. 100* (1988) 705; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 29 (1988) 706; b) G. J. Zimmermann, R. Wilozynski, L. G. Sneddon, *J. Organomet. Chem.* 154 (1978) C29.

[3] E. J. Miller, S. J. Landon, T. B. Brill, *Organometallics* 4 (1985) 533.

[4] P. L. Timms, *Adv. Inorg. Chem. Radiochem.* 14 (1972) 121.

[5] J. J. Schneider, R. Goddard, C. Krüger, S. Werner, B. Metz, *Chem. Ber.* 124 (1991) 301.

[6] Kristalldaten von **3**: Cmca , $a = 15.203(1)$, $b = 12.289(1)$, $c = 14.714(1)$ Å, $V = 2748.9$ Å 3 , $Z = 4$, $\rho_{\text{er}} = 1.26$ g cm $^{-3}$, $\lambda = 0.71069$ Å, $\mu = 12.19$ cm $^{-1}$, 8752 gemessene Reflexe ($\pm h, \pm k, \pm l$), 2078 unabhängige Reflexe, davon 1636 beobachtet ($I > 2\sigma(I)$), $R = 0.085$, $R_w = 0.087$, 67 verfeinerte Parameter, Restelektronendichte 1.3 e Å $^{-3}$, die Fehlordnung

- (50:50) ließ sich auch durch Verfeinerung in der nicht-zentrosymmetrischen Raumgruppe $Ab\bar{2}$ (Nr. 41) nicht aufheben. Es wurden keine H-Atompositionen berechnet. Kristalldaten von **4**: $P2/c$, $a = 9.533(1)$, $b = 8.514(2)$, $c = 12.376(2)$ Å, $\beta = 105.95(1)^\circ$, $V = 965.8$ Å 3 , $T = -173^\circ\text{C}$, $Z = 2$, $\rho_{\text{ber.}} = 1.34$ g cm $^{-3}$, $\lambda = 0.71069$ Å, $\mu = 17.10$ cm $^{-1}$, 28 569 gemessene Reflexe ($\pm h, \pm k, +l$), analytische Absorptionskorrektur (Transmission 0.5–0.9), 4973 unabhängige Reflexe, davon 3863 beobachtet ($I > 3\sigma(I)$), $R = 0.040$, $R_w = 0.062$, 100 verfeinerte Parameter, Restelektronendichte $e = 2.5$ Å $^{-3}$ auf der kristallographischen zweizähligen Achse, 1.8 Å von beiden Co-Atomen entfernt. Weitere Einzelheiten zu den Kristallstrukturanalysen können beim Fachinformationszentrum Karlsruhe, Gesellschaft für wissenschaftlich-technische Information mbH, W-7514 Eggenstein-Leopoldshafen 2, unter Angabe der Hinterlegungsnummer CSD-55400, der Autoren und des Zeitschriftenzitats angefordert werden.
- [7] H. Werner, A. Salzer, *Angew. Chem.* 84 (1972) 949; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 11 (1972) 930.
- [8] A. W. Duff, K. Jonas, R. Goddard, H. J. Kraus, C. Krüger, *J. Am. Chem. Soc.* 105 (1983) 5479.
- [9] W. M. Lamanna, W. B. Gleason, D. Britton, *Organometallics* 6 (1987) 1583.
- [10] A. R. Kudinov, M. I. Rybinskaya, Y. T. Struchkov, A. I. Yanovskii, P. V. Petrovskii, *J. Organomet. Chem.* 336 (1987) 187.
- [11] J. W. Lauher, M. Elian, R. H. Summerville, R. Hoffmann, *J. Am. Chem. Soc.* 98 (1976) 3219.
- [12] F. Mark, MPI für Strahlenchemie, Mülheim a. d. Ruhr, unveröffentlicht.
- [13] a) R. E. Ginsburg, L. M. Cirjak, L. F. Dahl, *J. Chem. Soc. Chem. Commun.* 1979, 468; *Inorg. Chem.* 21 (1982) 940; b) M. Schulz, S. Stahl, H. Werner, *J. Organomet. Chem.* 394 (1990) 469.
- [14] a) P. Louca, J. A. K. Howard, *Acta Crystallogr. Sect. C* 43 (1987) 1908; b) I. Bernal, J. D. Korp, G. M. Reisner, W. A. Herrmann, *J. Organomet. Chem.* 139 (1977) 321.
- [15] J. R. Blackborrow, D. Young: *Metal Vapour Synthesis in Organometallic Chemistry*, Springer, Berlin 1979, Kap. 1.
- [16] Zum Nachweis von reaktiven M-L-Fragmenten bei tiefen Temperaturen siehe: M. P. Andrews, S. M. Mattar, G. A. Ozin, *J. Phys. Chem.* 90 (1986) 744.
- [17] M. P. Andrews, G. A. Ozin, *J. Phys. Chem.* 90 (1986) 1245.
- [18] W. M. Lamanna, *J. Am. Chem. Soc.* 108 (1986) 2096.
- [19] P. L. Timms, *Angew. Chem.* 87 (1975) 295; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 14 (1975) 273.

dem drei äußere Ru₃S-Tetraeder ein inneres Ru₃H-Tetraeder einschließen, besticht durch die Ästhetik seiner molekularen Architektur.

Das Clusteranion **1** entsteht in einer unübersichtlichen Reaktion bei der Umsetzung von [Ru₃(CO)₁₂] mit Tetramethylthioharnstoff unter Inertgasdruck (65 bar Methan oder Stickstoff) in THF-Lösung bei 150°C; bei der Aufarbeitung des Reaktionsgemisches fällt es als Tetramethylformamidinium-Salz aus Dichlormethan analysenrein aus. Unter Normaldruck unterbleibt die Bildung von **1**.

Die Einkristall-Röntgenstrukturanalyse von **1**^[4] (Abb. 1) zeigt einen annähernd planaren, sechskernigen Metallver-

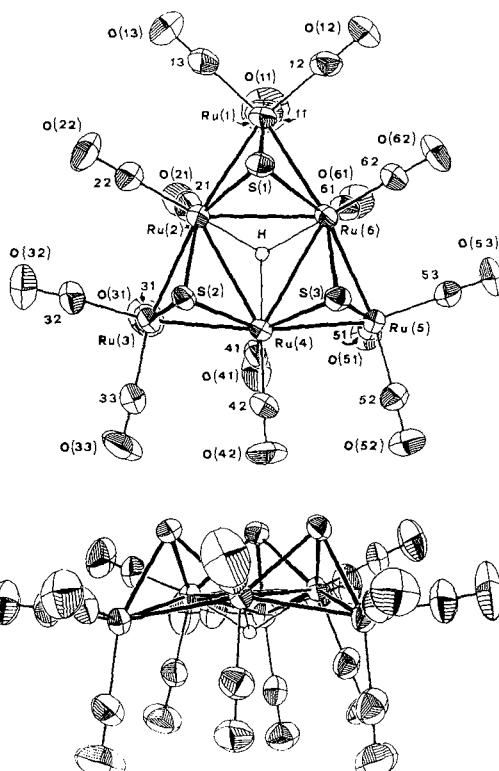


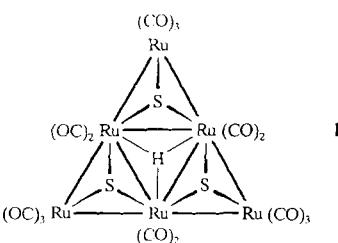
Abb. 1. Aufsicht (oben) und Seitenansicht (unten) des Clusteranions $[\text{Ru}_6\text{H}(\text{CO})_{15}\text{S}_3]^-$ **1** (ORTEP, Schwingungsellipsoide mit 50% Wahrscheinlichkeit, C-Atome der CO-Liganden nur mit einfachen Zahlen versehen). Wichtige Atomabstände [Å] und Bindungswinkel [$^\circ$]: Ru(1)-Ru(2) 2.779(1), Ru(1)-Ru(6) 2.767(1), Ru(2)-Ru(3) 2.776(1), Ru(2)-Ru(4) 3.027(1), Ru(2)-Ru(6) 3.003(1), Ru(3)-Ru(4) 2.790(1), Ru(4)-Ru(5) 2.763(1), Ru(4)-Ru(6) 3.034(1), Ru(5)-Ru(6) 2.772(1), Ru(1)-S(1) 2.302(1), Ru(2)-S(1) 2.384(1), Ru(2)-S(2) 2.370(1), Ru(3)-S(2) 2.303(1), Ru(4)-S(2) 2.375(1), Ru(4)-S(3) 2.372(1), Ru(5)-S(3) 2.308(1), Ru(6)-S(1) 2.379(1), Ru(6)-S(3) 2.371(1); Ru(2)-Ru(1)-Ru(6) 65.58(1), Ru(1)-Ru(2)-Ru(3) 157.92(2), Ru(1)-Ru(2)-Ru(6) 57.01(1), Ru(3)-Ru(2)-Ru(4) 57.27(1), Ru(4)-Ru(2)-Ru(6) 60.41(1), Ru(2)-Ru(3)-Ru(4) 65.89(1), Ru(2)-Ru(4)-Ru(3) 56.84(2), Ru(2)-Ru(4)-Ru(6) 59.40(1), Ru(3)-Ru(4)-Ru(5) 153.32(2), Ru(5)-Ru(4)-Ru(6) 56.92(1), Ru(4)-Ru(5)-Ru(6) 66.48(2), Ru(1)-Ru(6)-Ru(2) 57.40(2), Ru(1)-Ru(6)-Ru(5) 156.63(2), Ru(2)-Ru(6)-Ru(4) 60.19(1), Ru(4)-Ru(6)-Ru(5) 56.60(1).

Das Clusteranion $[\text{Ru}_6\text{H}(\text{CO})_{15}\text{S}_3]^-$: ein planares sechskerniges Metallgerüst mit nahezu perfekter C_{3v} -Symmetrie

Von Ulf Bodensieck, Helen Stoeckli-Evans und Georg Süss-Fink*

Seit der Strukturuntersuchung des Osmiumkomplexes $[\text{Os}_6(\text{CO})_{17}\{\text{P}(\text{OMe})_3\}_4]$ durch Lewis et al. ist bekannt, daß ein sechskerniges Clustergerüst planar sein kann^[1]. Obwohl inzwischen mehrere solcher „raft cluster“ synthetisiert wurden, ist die ebene Anordnung der Metallatome eines sechskernigen Clusters eher die Ausnahme^[2].

Bei dem Versuch, die an dem System Rutheniumcarbonyl-Alkylthioharnstoff beobachtete Aktivierung von C_{sp^2} -H-Bindungen^[3] auf Methan auszudehnen, haben wir überraschenderweise das neue Clusteranion $[\text{Ru}_6\text{H}(\text{CO})_{15}\text{S}_3]^-$ **1** erhalten, das einen annähernd planaren, sechskernigen Rutheniumverband mit C_{3v} -Symmetrie enthält. Anion **1**, in



* Prof. Dr. G. Süss-Fink, Prof. Dr. H. Stoeckli-Evans, U. Bodensieck
Institut de Chimie, Université de Neuchâtel
Avenue de Bellevaux 51, CH-2000 Neuchâtel (Schweiz)

band in Form eines großen Dreiecks, das aus vier kleinen Dreiecken zusammengesetzt ist. Die äußeren drei kleinen Ru₃-Dreiecke sind jeweils von einem μ_3 -Sulfidoliganden überdeckt, das innere Ru₃-Dreieck auf der den Sulfidoliganden gegenüberliegenden Seite des Metallgerüsts dagegen von einem μ_3 -Hydridoliganden. Die Rutheniumatome Ru(1), Ru(3), Ru(5) an den Ecken des großen Dreiecks sind im Mittel um 0.55 Å aus der durch Ru(2), Ru(4), Ru(6) definierten Ebene nach der den Sulfidoliganden abgewandten Seite herausgedrückt.

Die μ_3 -Verbrückung des Hydridoliganden folgt auch aus der ungewöhnlichen Hochfeldlage seines NMR-Signals