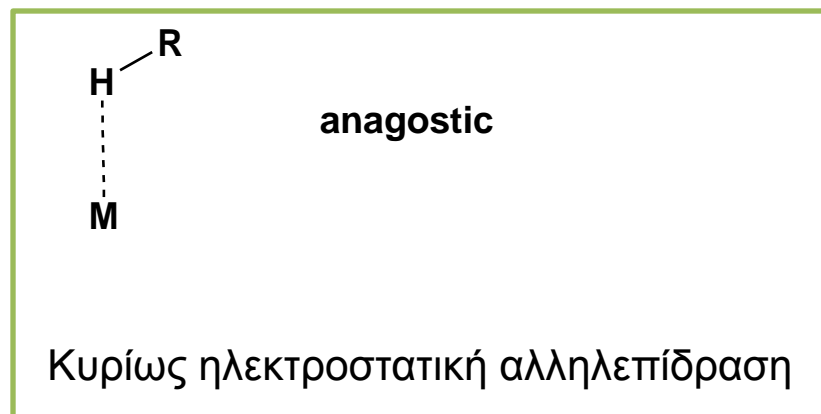
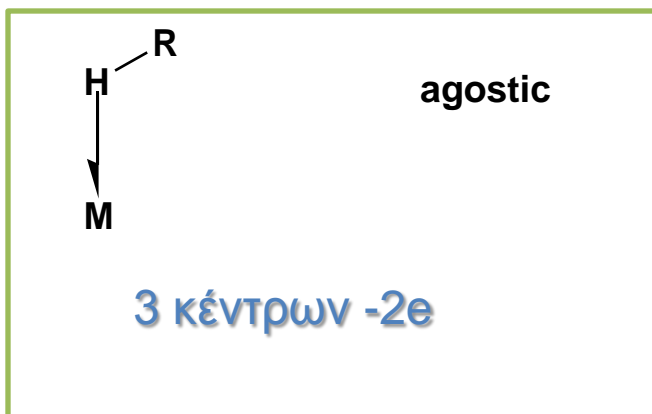


**agostic** από την ελληνική λέξη αγοστω "to hold on to oneself".

Αναφέρεται κυρίως σε ένα **δεσμό C-H ενός υποκαταστάτη** που υφίσταται αλληλεπίδραση με το μεταλλικό σύμπλοκο. Η **ταυτόχρονα συνδεδεμένο με C και με M**.



Ομοιάζει με την αντίδραση οξειδωτικής προσθήκης ή αναγωγικής απόσπασης.

Ο δεσμός μοιάζει με το  $\sigma$ -δεσμό ενός αλκανίου

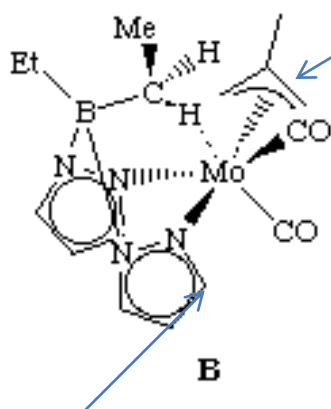
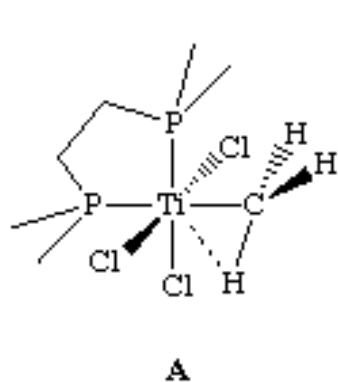
Συμμετέχουν ως ενδιάμεσα αντιδράσεων, μεταβατικές καταστάσεις κλπ

**C-H** δρά ως υποκαταστάτης σε ένα μεταλλικό κέντρο, σχηματίζοντας ομοιοπολικό δεσμό  
3 κέντρων -2e

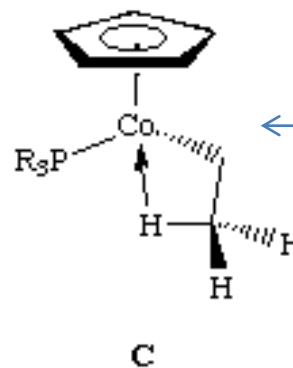
Παροχή ηλεκτρονιακής πυκνότητας από το δεσμό C-H



Σε Μεταλλικό κέντρο με διαμόρφωση  $< \mathbf{\dot{h}} = 16 e$



$d(\text{M-H}) = 2.1 \text{ \AA}$ ; IR: 2704, 2664  $\text{cm}^{-1}$ , -3.8 ppm

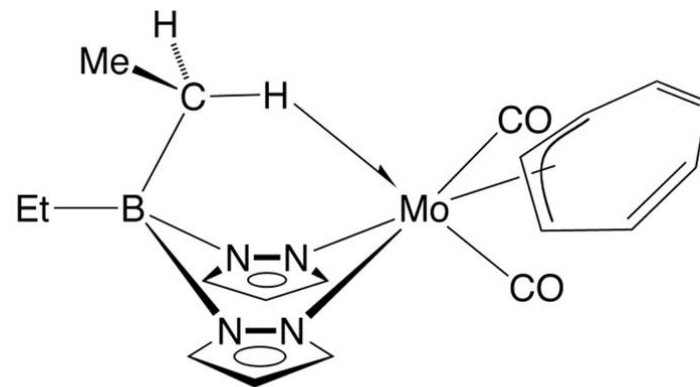
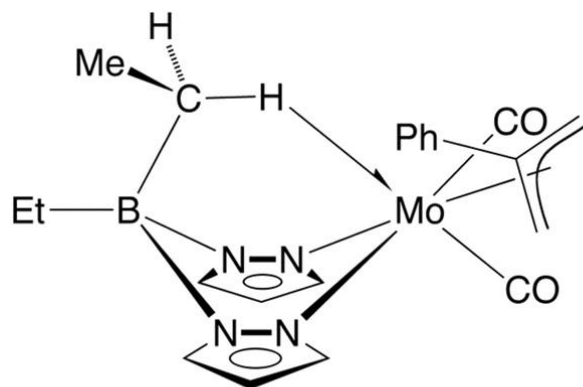
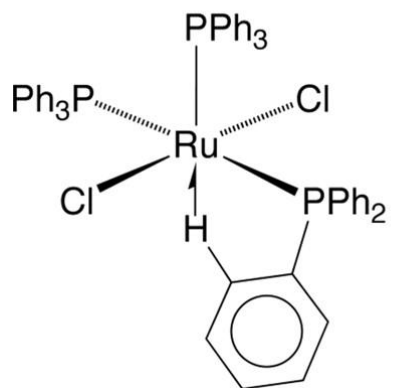


Πιο σταθερό

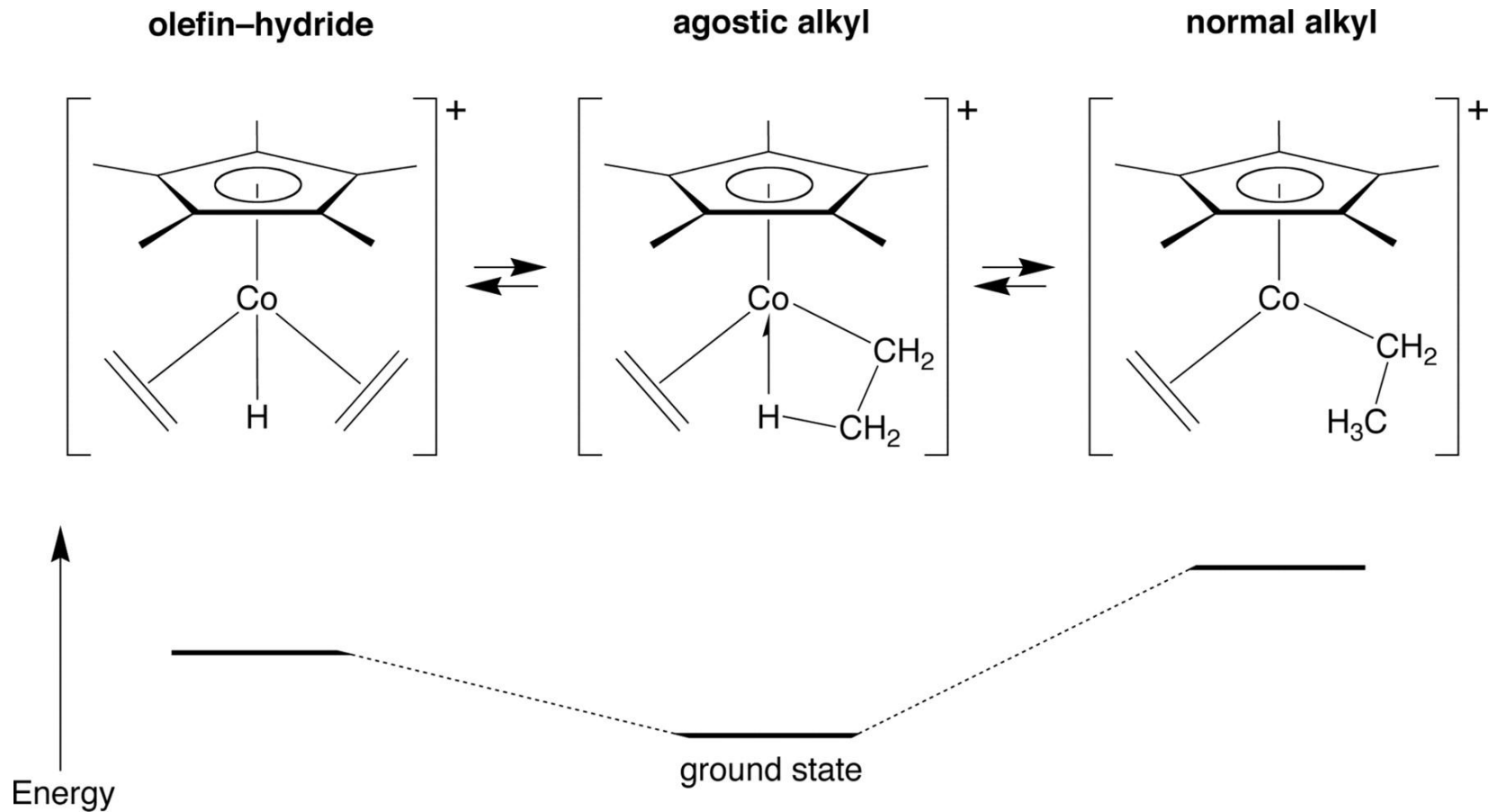
[Al Cotton](#) , 1974, το πρώτο παράδειγμα -agostic interaction

MAURICE BROOKHART I and MALCOLM L.H. GREEN, *Journal of Organometallic Chemistry*, 250 (1983) 395-408

## Παραδείγματα ενώσεων με αγωγικές αλληλεπιδράσεις M-H-C



Δυναμική ισοροπία παρούσα στην ένωση  $\text{Cp}^*\text{Co}(\eta^2\text{-C}_2\text{H}_4)(\beta\text{-agostic-C}_2\text{H}_5)$ .



## Φασματοσκοπικά και δομικά χαρακτηριστικά

Ανιχνεύονται με  $^1\text{H}$  NMR φασματοσκοπία. Εμφανίζεται σήμα που εμφανίζεται κοντά στα υδρίδια (-5 ως -15 ppm, αλλά και +25 ως -60 ppm).

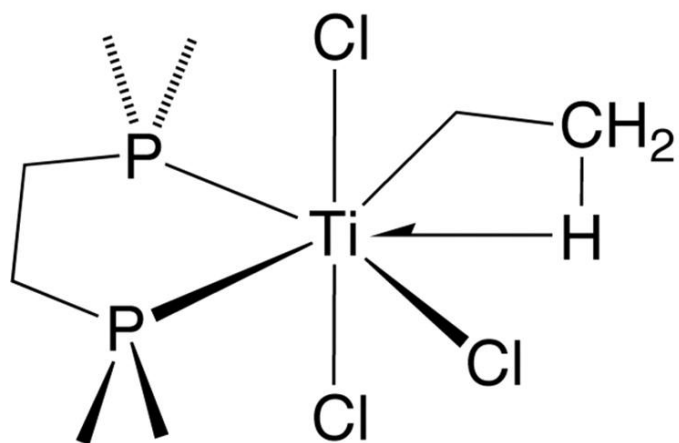
- $J_{\text{CH}} = 70\text{-}100$  Hz versus the 125 για  $\text{sp}^3$  C
- Fluxional molecules (ρευστά μόρια) < ---δυσκολεύουν την ανάλυση
- C-H δόνηση τάσεως στο υπέρυθρο (IR)

### Δομικός χαρακτηρισμός

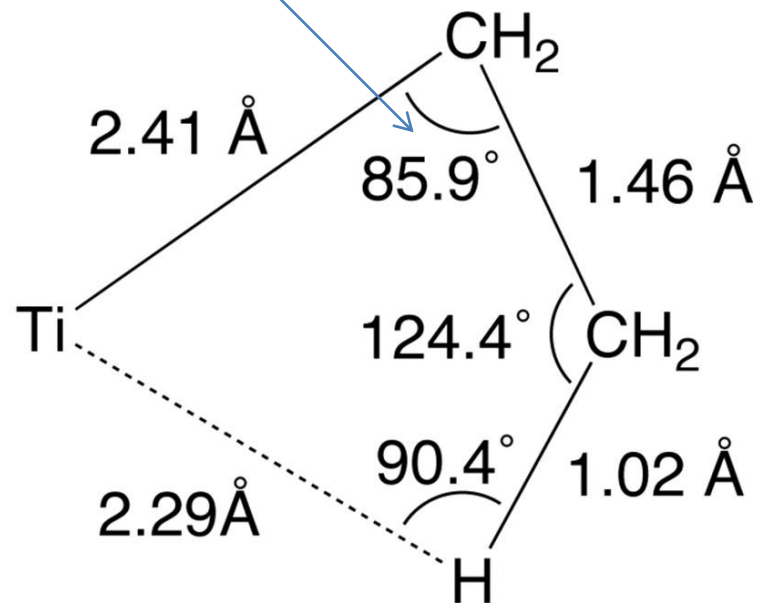
Σκέδαση νετρονίων λόγω δυσκολιών στον προσδιορισμό της ακριβούς θέσεως του H μέσω κρυσταλλογραφίας ακτίνων -X.

Τυπικές αποστάσεις δεσμών M-H σε αγοστικές σύμπλοκες ενώσεις κυμαίνονται από 1.85 - 2.4 angstroms.

Η πρώτη δομικά χαρακτηρισμένη ένωση μεταλλο-αλκυλίου με β-αγοστικό δεσμό



Αναμενόμενη  $109^\circ$



Brookhart M et al. PNAS 2007;104:6908-6914