

6. Anhang

6.1. Kristallographische Tabellen

6.1.1. Kristallstruktur von 35

Tab. 15a: Kristalldaten und Strukturverfeinerung von 35

Summenformel	C ₁₀ H ₅ F ₆ Mn O
Molekulargewicht	310.08 g mol ⁻¹
Temperatur	173(2) K
Wellenlänge	0.71073 Å
Kristallsystem, Raumgruppe	monoklin, P2(1)/c
Gitterkonstanten:	
a	10.345(4) Å
b	7.919(3) Å
c	12.398(4) Å
α	90 °
β	96.260(8) °
γ	90 °
Zellvolumen	1009.7(6) Å ³
Z, berechnete Dichte	4, 2.040 g cm ⁻³
Absorptionskoeffizient	1.379 mm ⁻¹
F(000)	608
Kristallgröße	0.70 x 0.50 x 0.05 mm
θ-Bereich für die Datensammlung	1.98 to 30.50 °
kleinste und größte Indices	-14<=h<=13, -11<=k<=11, -17<=l<=17
gemessene / unabhängige Reflexe	12057 / 3076 [R(int) = 0.0198]
Vollständigkeit bis θ = 30.50 °	99.8 %
Absorptionskorrektur	empirisch
Maximale und minimale Transmission	1.0 und 0.81
Verfeinerungsmethoden	kleinste Fehlerquadrate
Reflexe / Einschränkungen / Parameter	3076 / 0 / 163
Goodness-of-fit gegen F ²	1.086
endgültiger R-Wert [I>2σ (I)]	R ₁ = 0.0288, wR ₂ = 0.0765
R-Wert (alle Reflexe)	R ₁ = 0.0325, wR ₂ = 0.0790
größte und kleinste Restelektronendichte	0.772 und -0.306 e Å ⁻³

Tab. 15b: Atomkoordinaten (x 10⁴) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren (Å²·10³) für 35
 U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij}-Tensors.

	x	y	z	U(eq)		x	y	z	U(eq)
Mn(1)	2498(1)	-2(1)	7524(1)	17(1)	C(4R)	1484(2)	-510(2)	5971(1)	30(1)
C(1)	4106(2)	-86(2)	8576(1)	25(1)	C(5R)	1191(2)	1151(3)	6278(1)	36(1)
C(2)	3442(2)	1452(2)	8788(1)	23(1)	F(1)	5313(1)	150(2)	8284(1)	38(1)
C(3)	2102(2)	1512(2)	8832(1)	25(1)	F(2)	4233(1)	-1298(1)	9380(1)	35(1)
C(4)	1310(2)	23(2)	8695(1)	27(1)	F(3)	4043(1)	2938(1)	8646(1)	34(1)
C(10)	2487(2)	-2260(2)	7781(1)	28(1)	F(4)	1516(1)	3037(1)	8715(1)	35(1)
C(1R)	2369(2)	2073(2)	6406(1)	40(1)	F(5)	18(1)	331(2)	8502(1)	40(1)
C(2R)	3389(2)	994(3)	6170(1)	37(1)	F(6)	1435(1)	-1161(2)	9510(1)	39(1)
C(3R)	2853(2)	-605(2)	5906(1)	31(1)	O(1)	2479(2)	-3674(2)	7948(1)	44(1)

Anhang

Tab. 15c: Bindungslängen und -winkel in 35

Abstand in Å		Winkel in °					
Mn(1)-C(1O)	1.8166(18)	C(1O)-Mn(1)-C(1)	82.71(7)	C(1)-Mn(1)-C(1R)	115.86(8)	F(4)-C(3)-C(4)	118.56(15)
Mn(1)-C(1)	1.9995(17)	C(1O)-Mn(1)-C(4)	82.32(7)	C(4)-Mn(1)-C(1R)	117.47(8)	C(2)-C(3)-C(4)	121.63(15)
Mn(1)-C(4)	2.0015(17)	C(1)-Mn(1)-C(4)	93.44(7)	C(3)-Mn(1)-C(1R)	93.35(7)	F(4)-C(3)-Mn(1)	123.47(11)
Mn(1)-C(3)	2.0930(16)	C(1O)-Mn(1)-C(3)	114.97(7)	C(2)-Mn(1)-C(1R)	93.06(7)	C(2)-C(3)-Mn(1)	70.74(9)
Mn(1)-C(2)	2.0974(15)	C(1)-Mn(1)-C(3)	74.52(7)	C(4R)-Mn(1)-C(1R)	64.57(8)	C(4)-C(3)-Mn(1)	66.10(9)
Mn(1)-C(4R)	2.1281(17)	C(4)-Mn(1)-C(3)	40.95(7)	C(3R)-Mn(1)-C(1R)	64.44(8)	F(5)-C(4)-F(6)	105.33(13)
Mn(1)-C(3R)	2.1322(17)	C(1O)-Mn(1)-C(2)	114.87(7)	C(5R)-Mn(1)-C(1R)	38.54(8)	F(5)-C(4)-C(3)	114.39(14)
Mn(1)-C(5R)	2.1426(17)	C(1)-Mn(1)-C(2)	40.97(6)	C(1O)-Mn(1)-C(2R)	120.61(8)	F(6)-C(4)-C(3)	117.82(15)
Mn(1)-C(1R)	2.1443(18)	C(4)-Mn(1)-C(2)	74.07(7)	C(1)-Mn(1)-C(2R)	97.18(7)	F(5)-C(4)-Mn(1)	123.10(12)
Mn(1)-C(2R)	2.1508(18)	C(3)-Mn(1)-C(2)	38.87(6)	C(4)-Mn(1)-C(2R)	155.71(8)	F(6)-C(4)-Mn(1)	120.69(12)
C(1)-F(1)	1.351(2)	C(1O)-Mn(1)-C(4R)	87.73(8)	C(3)-Mn(1)-C(2R)	122.12(8)	C(3)-C(4)-Mn(1)	72.94(9)
C(1)-F(2)	1.3787(19)	C(1)-Mn(1)-C(4R)	151.25(7)	C(2)-Mn(1)-C(2R)	100.24(7)	O(1)-C(1O)-Mn(1)	179.66(18)
C(1)-C(2)	1.437(2)	C(4)-Mn(1)-C(4R)	112.11(8)	C(4R)-Mn(1)-C(2R)	64.81(7)	C(2R)-C(1R)-C(5R)	108.53(17)
C(2)-F(3)	1.3511(18)	C(3)-Mn(1)-C(4R)	133.66(7)	C(3R)-Mn(1)-C(2R)	38.34(8)	C(2R)-C(1R)-Mn(1)	71.04(10)
C(2)-C(3)	1.394(2)	C(2)-Mn(1)-C(4R)	157.37(7)	C(5R)-Mn(1)-C(2R)	64.63(8)	C(5R)-C(1R)-Mn(1)	70.66(10)
C(3)-F(4)	1.3518(19)	C(1O)-Mn(1)-C(3R)	87.11(8)	C(1R)-Mn(1)-C(2R)	38.41(9)	C(3R)-C(2R)-C(1R)	107.95(17)
C(3)-C(4)	1.435(2)	C(1)-Mn(1)-C(3R)	112.97(7)	F(1)-C(1)-F(2)	105.74(13)	Mn(1)	70.12(10)
C(4)-F(5)	1.354(2)	C(4)-Mn(1)-C(3R)	150.04(7)	F(1)-C(1)-C(2)	113.94(14)	C(1R)-C(2R)-Mn(1)	70.55(10)
C(4)-F(6)	1.3747(19)	C(3)-Mn(1)-C(3R)	157.76(7)	F(2)-C(1)-C(2)	117.93(14)	C(2R)-C(3R)-C(4R)	107.94(17)
C(1O)-O(1)	1.140(2)	C(2)-Mn(1)-C(3R)	135.39(7)	F(1)-C(1)-Mn(1)	123.23(12)	C(2R)-C(3R)-Mn(1)	71.55(10)
C(1R)-C(2R)	1.413(3)	C(4R)-Mn(1)-C(3R)	39.19(7)	F(2)-C(1)-Mn(1)	120.13(11)	C(4R)-C(3R)-Mn(1)	70.25(9)
C(1R)-C(5R)	1.415(3)	C(1O)-Mn(1)-C(5R)	122.02(8)	C(2)-C(1)-Mn(1)	73.17(9)	C(5R)-C(4R)-C(3R)	107.88(17)
C(2R)-C(3R)	1.407(3)	C(1)-Mn(1)-C(5R)	154.04(8)	F(3)-C(2)-C(3)	116.70(14)	C(5R)-C(4R)-Mn(1)	71.26(9)
C(3R)-C(4R)	1.429(3)	C(4)-Mn(1)-C(5R)	97.43(8)	F(3)-C(2)-C(1)	118.61(14)	C(3R)-C(4R)-Mn(1)	70.56(9)
C(4R)-C(5R)	1.411(3)	C(3)-Mn(1)-C(5R)	98.81(7)	C(3)-C(2)-C(1)	122.21(14)	C(4R)-C(5R)-C(1R)	107.70(17)
		C(2)-Mn(1)-C(5R)	120.69(8)	F(3)-C(2)-Mn(1)	124.32(10)	C(4R)-C(5R)-Mn(1)	70.15(10)
		C(4R)-Mn(1)-C(5R)	38.59(7)	C(3)-C(2)-Mn(1)	70.39(9)	C(1R)-C(5R)-Mn(1)	70.80(10)
		C(3R)-Mn(1)-C(5R)	64.97(7)	C(1)-C(2)-Mn(1)	65.85(9)		
		C(1O)-Mn(1)-C(1R)	150.06(7)	F(4)-C(3)-C(2)	117.49(14)		

Tab. 15d: Anisotrope Temperaturfaktoren für 35 in ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$)Der Exponent des anisotropen Temperaturfaktors nimmt die Form $(-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}])$ an.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}		U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Mn(1)	19(1)	16(1)	16(1)	0(1)	1(1)	0(1)	C(4R)	30(1)	38(1)	20(1)	-4(1)	-4(1)	-5(1)
C(1)	23(1)	28(1)	23(1)	1(1)	0(1)	2(1)	C(5R)	41(1)	45(1)	21(1)	6(1)	-2(1)	17(1)
C(2)	27(1)	22(1)	19(1)	-2(1)	0(1)	-3(1)	F(1)	21(1)	52(1)	41(1)	-5(1)	2(1)	2(1)
C(3)	31(1)	24(1)	21(1)	-2(1)	4(1)	3(1)	F(2)	40(1)	31(1)	32(1)	8(1)	-9(1)	5(1)
C(4)	26(1)	29(1)	27(1)	2(1)	7(1)	0(1)	F(3)	40(1)	24(1)	37(1)	-2(1)	-2(1)	-11(1)
C(1O)	28(1)	23(1)	31(1)	-1(1)	1(1)	-1(1)	F(4)	43(1)	25(1)	38(1)	-3(1)	7(1)	10(1)
C(1R)	74(1)	24(1)	20(1)	5(1)	-3(1)	-4(1)	F(5)	22(1)	51(1)	47(1)	-2(1)	9(1)	0(1)
C(2R)	39(1)	50(1)	21(1)	7(1)	2(1)	-17(1)	F(6)	49(1)	38(1)	34(1)	12(1)	15(1)	-2(1)
C(3R)	35(1)	39(1)	20(1)	-5(1)	5(1)	3(1)	O(1)	55(1)	21(1)	57(1)	3(1)	2(1)	-1(1)

6.1.2. Kristallstruktur von 40

Tab. 16a: Kristalldaten und Strukturverfeinerung von 40

Summenformel	$C_{15} H_{15} F_6 Mn O$
Molekulargewicht	380.21
Temperatur	173(2) K
Wellenlänge	0.71073 \AA
Kristallsystem, Raumgruppe	orthorhombisch, Pnma
Gitterkonstanten:	
a	12.972(6) \AA
b	12.817(7) \AA
c	8.696(7) \AA
α	90 °
β	90 °
γ	90 °
Zellvolumen	1445.9(15) \AA^3
Z, berechnete Dichte	4, 1.747 g cm^{-3}
Absorptionskoeffizient	0.980 mm^{-1}
F(000)	768
Kristallgröße	0.6 x 0.5 x 0.1 mm
θ -Bereich für die Datensammlung	2.82 bis 30.50 °
kleinste und größte Indices	$-17 \leq h \leq 18$ $-10 \leq k \leq 17$ $-8 \leq l \leq 12$
gemessene / unabhängige Reflexe	5568 / 2250 [R(int) = 0.0241]
Vollständigkeit bis $\theta = 30.50$	98.1 %
Absorptionskorrektur	empirisch
Maximale und minimale Transmission	1.0 und 0.728369
Verfeinerungsmethoden	kleinste Fehlerquadrate
Reflexe / Einschränkungen / Parameter	2250 / 0 / 121
Goodness-of-fit gegen F^2	1.051
endgültiger R-Wert [$I > 2\sigma(I)$]	$R_1 = 0.0291$, $wR_2 = 0.0774$
R-Wert (alle Reflexe)	$R_1 = 0.0347$, $wR_2 = 0.0802$
größte und kleinste Restelektronendichte	0.507 und -0.297 e \AA^{-3}

Anhang

Tab. 16b: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für 40 U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U(eq)		x	y	z	U(eq)
C(1)	8852(1)	6371(1)	721(2)	26(1)	C(3M)	5943(1)	6267(2)	-1097(2)	39(1)
C(1M)	6861(2)	7500	4352(2)	44(1)	C(3R)	6285(1)	6938(1)	216(2)	22(1)
C(1O)	8035(2)	7500	-1258(2)	29(1)	O(1)	8186(2)	7500	-2549(2)	48(1)
C(1R)	6680(1)	7500	2651(2)	24(1)	F(1)	9612(1)	6367(1)	-382(1)	35(1)
C(2)	9035(1)	6960(1)	2095(2)	24(1)	F(2)	8644(1)	5348(1)	990(1)	36(1)
C(2M)	6508(1)	5492(1)	2284(2)	44(1)	F(3)	8960(1)	6475(1)	3474(1)	34(1)
C(2R)	6529(1)	6597(1)	1721(2)	24(1)	Mn(1)	7789(1)	7500	776(1)	17(1)

Tab. 16c: Bindungslängen und -winkel in 40

Symmetrieelemente: #1 x,-y+3/2,z (zur Erzeugung äquivalenter Atome)

Abstand in \AA		Winkel in $^\circ$	
C(1)-F(2)	1.3592(19)	F(2)-C(1)-F(1)	105.02(11)
C(1)-F(1)	1.3747(17)	F(2)-C(1)-C(2)	113.42(12)
C(1)-C(2)	1.433(2)	F(1)-C(1)-C(2)	117.69(13)
C(1)-Mn(1)	1.9995(16)	F(2)-C(1)-Mn(1)	123.86(11)
C(1M)-C(1R)	1.498(3)	F(1)-C(1)-Mn(1)	120.89(10)
C(1O)-O(1)	1.140(3)	C(2)-C(1)-Mn(1)	73.32(8)
C(1O)-Mn(1)	1.798(2)	O(1)-C(1O)-Mn(1)	179.6(2)
C(1R)-C(2R)	1.4257(19)	C(2R)-C(1R)-C(2R)#1	108.60(17)
C(1R)-C(2R)#1	1.4257(19)	C(2R)-C(1R)-C(1M)	125.57(8)
C(1R)-Mn(1)	2.175(2)	C(2R)#1-C(1R)-C(1M)	125.57(8)
C(2)-F(3)	1.3548(17)	C(2R)-C(1R)-Mn(1)	70.47(9)
C(2)-C(2)#1	1.386(3)	C(2R)#1-C(1R)-Mn(1)	70.47(9)
C(2)-Mn(1)	2.0991(15)	C(1M)-C(1R)-Mn(1)	129.56(15)
C(2M)-C(2R)	1.498(2)	F(3)-C(2)-C(2)#1	117.30(8)
C(2R)-C(3R)	1.416(2)	F(3)-C(2)-C(1)	119.02(13)
C(2R)-Mn(1)	2.1653(15)	C(2)#1-C(2)-C(1)	121.77(8)
C(3M)-C(3R)	1.497(2)	F(3)-C(2)-Mn(1)	125.43(10)
C(3R)-C(3R)#1	1.440(3)	C(2)#1-C(2)-Mn(1)	70.73(4)
C(3R)-Mn(1)	2.1367(15)	C(1)-C(2)-Mn(1)	65.85(8)
Mn(1)-C(1)#1	1.9995(16)	C(3R)-C(2R)-C(1R)	107.70(13)
Mn(1)-C(2)#1	2.0991(15)	C(3R)-C(2R)-C(2M)	126.16(14)
Mn(1)-C(3R)#1	2.1367(15)	C(1R)-C(2R)-C(2M)	125.76(15)
Mn(1)-C(2R)#1	2.1653(15)	C(3R)-C(2R)-Mn(1)	69.70(8)
		C(1R)-C(2R)-Mn(1)	71.17(9)
		C(2M)-C(2R)-Mn(1)	130.02(11)
		C(2R)-C(3R)-C(3R)#1	108.00(8)
		C(2R)-C(3R)-C(3M)	126.42(14)
		C(3R)#1-C(3R)-C(3M)	125.09(9)
		C(2R)-C(3R)-Mn(1)	71.88(8)
		C(3R)#1-C(3R)-Mn(1)	70.30(4)
		C(3M)-C(3R)-Mn(1)	129.65(10)
		C(1O)-Mn(1)-C(1)#1	81.59(6)
		C(1O)-Mn(1)-C(1)	81.59(6)
		C(1)#1-Mn(1)-C(1)	92.74(10)
		C(1O)-Mn(1)-C(2)#1	113.62(8)
		C(1)#1-Mn(1)-C(2)	40.83(6)
		C(1)-Mn(1)-C(2)#1	73.81(7)
		C(1O)-Mn(1)-C(2)	113.62(8)
		C(2)-Mn(1)-C(2)	73.81(7)
		C(1)#1-Mn(1)-C(2)	40.83(6)
		C(2)#1-Mn(1)-C(2)	38.54(8)
		C(1O)-Mn(1)-C(3R)	86.43(8)
		C(1)#1-Mn(1)-C(3R)	150.27(6)
		C(1)-Mn(1)-C(3R)	112.36(6)
		C(2)#1-Mn(1)-C(3R)	159.90(5)
		C(2)-Mn(1)-C(3R)	135.77(6)
		C(1O)-Mn(1)-C(3R)#1	86.43(8)
		C(1)#1-Mn(1)-C(3R)#1	112.36(6)
		C(1)-Mn(1)-C(3R)#1	150.27(6)
		C(2)#1-Mn(1)-C(3R)#1	135.77(6)
		C(2)-Mn(1)-C(3R)#1	159.90(5)
		C(3R)-Mn(1)-C(3R)#1	39.40(8)
		C(1O)-Mn(1)-C(2R)	120.49(7)
		C(1)#1-Mn(1)-C(2R)	156.48(6)
		C(1)-Mn(1)-C(2R)	98.21(7)
		C(2)#1-Mn(1)-C(2R)	123.42(7)
		C(2)-Mn(1)-C(2R)	101.41(6)
		C(3R)-Mn(1)-C(2R)	38.42(6)
		C(3R)#1-Mn(1)-C(2R)	64.98(6)
		C(1O)-Mn(1)-C(2R)#1	120.49(7)
		C(2R)#1-Mn(1)-C(2R)#1	98.21(7)
		C(1)-Mn(1)-C(2R)#1	156.48(6)
		C(2)#1-Mn(1)-C(2R)#1	101.41(6)
		C(2)-Mn(1)-C(2R)#1	123.42(7)
		C(3R)-Mn(1)-C(2R)#1	64.98(6)
		C(3R)#1-Mn(1)-C(2R)#1	38.42(6)
		C(2R)-Mn(1)-C(2R)#1	64.65(8)
		C(1O)-Mn(1)-C(1R)	148.78(9)
		C(1)#1-Mn(1)-C(1R)	118.33(5)
		C(1)-Mn(1)-C(1R)	118.33(5)
		C(2)#1-Mn(1)-C(1R)	95.76(8)
		C(2)-Mn(1)-C(1R)	95.76(8)
		C(3R)-Mn(1)-C(1R)	64.30(7)
		C(3R)#1-Mn(1)-C(1R)	64.30(7)
		C(2R)-Mn(1)-C(1R)	38.36(5)
		C(2R)#1-Mn(1)-C(1R)	38.36(5)

Tab. 16d: Anisotrope Temperaturfaktoren für 40 in ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$)Der Exponent des anisotropen Temperaturfaktors nimmt die Form $(-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}])$ an.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}		U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
C(1)	23(1)	26(1)	27(1)	-1(1)	2(1)	3(1)	C(3M)	35(1)	47(1)	36(1)	-18(1)	-3(1)	-10(1)
C(1M)	29(1)	86(2)	17(1)	0	1(1)	0	C(3R)	18(1)	26(1)	21(1)	-4(1)	-1(1)	-1(1)
C(1O)	23(1)	42(1)	23(1)	0	-2(1)	0	O(1)	43(1)	83(1)	19(1)	0	2(1)	0
C(1R)	16(1)	40(1)	17(1)	0	1(1)	0	F(1)	28(1)	42(1)	34(1)	-6(1)	8(1)	7(1)
C(2)	18(1)	32(1)	23(1)	3(1)	-4(1)	2(1)	F(2)	40(1)	22(1)	46(1)	-2(1)	2(1)	5(1)
C(2M)	34(1)	34(1)	63(1)	23(1)	5(1)	-1(1)	F(3)	36(1)	40(1)	25(1)	10(1)	-5(1)	6(1)
C(2R)	20(1)	26(1)	26(1)	7(1)	2(1)	0(1)	Mn(1)	16(1)	20(1)	15(1)	0	-1(1)	0

6.1.3. Kristallstruktur von 44

Tab. 17a: Kristalldaten und Strukturverfeinerung von 44

Summenformel	$C_{20} H_{14} F_{12} Mn_2 O$
Molekulargewicht	$608.19 \text{ g mol}^{-1}$
Temperatur	173(2) K
Wellenlänge	0.71073 \AA
Kristallsystem, Raumgruppe	triklin, P-1
Gitterkonstanten:	
a	7.635(4) \AA
b	7.705(5) \AA
c	10.359(5) \AA
α	110.031(16) $^\circ$
β	96.281(19) $^\circ$
γ	111.822(16) $^\circ$
Zellvolumen	511.6(5) \AA^3
Z, berechnete Dichte	2, 1.974 g cm^{-3}
Absorptionskoeffizient	1.354 mm^{-1}
F(000)	300
Kristallgröße	0.5 x 0.25 x 0.2 mm
θ -Bereich für die Datensammlung	2.17 bis 30.53 $^\circ$
kleinste und größte Indices	$-10 \leq h \leq 10$ $-10 \leq k \leq 10$ $-14 \leq l \leq 14$
gemessene / unabhängige Reflexe	8361 / 3048 [R(int) = 0.0182]
Vollständigkeit bis $\theta = 30.53^\circ$	97.8 %
Absorptionskorrektur	empirisch
Maximale und minimale Transmission	1.0 und 0.843540
Verfeinerungsmethoden	kleinste Fehlerquadrate
Reflexe / Einschränkungen / Parameter	3048 / 0 / 161
Goodness-of-fit gegen F^2	1.235
endgültiger R-Wert [$l > 2\sigma(l)$]	$R_1 = 0.0306$, $wR_2 = 0.0841$
R-Wert (alle Reflexe)	$R_1 = 0.0327$, $wR_2 = 0.0850$
größte und kleinste Restelektronendichte	0.484 und $-0.368 \text{ e \AA}^{-3}$

Anhang

**Tab. 17b: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für 44
U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.**

	x	y	z	U(eq)		x	y	z	U(eq)
C(1)	782(3)	6866(3)	8300(2)	22(1)	C(6R)	2730(4)	8878(4)	5719(3)	36(1)
C(1R)	2881(3)	10370(3)	7151(2)	24(1)	O(1)	0	10000	10000	17(1)
C(2)	-1319(3)	5378(3)	7661(2)	25(1)	F(1)	1424(2)	6903(2)	9604(1)	30(1)
C(2R)	1974(3)	11711(3)	7430(2)	26(1)	F(2)	1869(2)	6127(2)	7487(2)	35(1)
C(3)	-2517(3)	5916(3)	7068(2)	26(1)	F(3)	-1889(2)	3515(2)	7670(2)	40(1)
C(3R)	2562(3)	12926(3)	8911(2)	26(1)	F(4)	-4417(2)	4656(2)	6430(2)	45(1)
C(4)	-1717(3)	7991(3)	7063(2)	22(1)	F(5)	-2947(2)	8878(2)	7424(2)	36(1)
C(4R)	3871(3)	12362(3)	9566(2)	24(1)	F(6)	-1757(2)	7772(2)	5683(1)	33(1)
C(5R)	4073(3)	10810(3)	8483(2)	24(1)	Mn(1)	972(1)	9694(1)	8549(1)	15(1)

Tab. 17c: Bindungslängen und -winkel in 44

Abstand in \AA		Winkel in $^\circ$	
C(1)-F(1)	1.373(2)	F(1)-C(1)-F(2)	104.03(16)
C(1)-F(2)	1.378(2)	F(1)-C(1)-C(2)	109.46(16)
C(1)-C(2)	1.485(3)	F(2)-C(1)-C(2)	108.62(17)
C(1)-Mn(1)	2.051(2)	F(1)-C(1)-Mn(1)	110.00(13)
C(1R)-C(2R)	1.415(3)	F(2)-C(1)-Mn(1)	117.60(13)
C(1R)-C(5R)	1.423(3)	C(2)-C(1)-Mn(1)	106.98(14)
C(1R)-C(6R)	1.493(3)	C(2R)-C(1R)-C(5R)	107.06(19)
C(1R)-Mn(1)	2.215(2)	C(2R)-C(1R)-C(6R)	126.5(2)
C(2)-C(3)	1.311(3)	C(5R)-C(1R)-C(6R)	126.3(2)
C(2)-F(3)	1.340(2)	C(2R)-C(1R)-Mn(1)	71.22(11)
C(2R)-C(3R)	1.409(3)	C(5R)-C(1R)-Mn(1)	71.32(12)
C(2R)-Mn(1)	2.212(2)	C(6R)-C(1R)-Mn(1)	125.87(16)
C(3)-F(4)	1.337(2)	C(3)-C(2)-F(3)	122.9(2)
C(3)-C(4)	1.487(3)	C(3)-C(2)-C(1)	118.71(18)
C(3R)-C(4R)	1.423(3)	F(3)-C(2)-C(1)	118.33(19)
C(3R)-Mn(1)	2.198(2)	C(3R)-C(2R)-C(1R)	108.55(19)
C(4)-F(5)	1.367(2)	C(3R)-C(2R)-Mn(1)	70.83(12)
C(4)-F(6)	1.376(2)	C(1R)-C(2R)-Mn(1)	71.49(12)
C(4)-Mn(1)	2.057(2)	C(2)-C(3)-F(4)	122.9(2)
C(4R)-C(5R)	1.403(3)	C(2)-C(3)-C(4)	118.64(18)
C(4R)-Mn(1)	2.204(2)	F(4)-C(3)-C(4)	118.5(2)
C(5R)-Mn(1)	2.216(2)	C(2R)-C(3R)-C(4R)	107.95(19)
O(1)-Mn(1)#1	1.7312(8)	C(2R)-C(3R)-Mn(1)	71.90(12)
O(1)-Mn(1)	1.7312(8)	C(4R)-C(3R)-Mn(1)	71.38(12)
		F(5)-C(4)-F(6)	104.19(16)
		F(5)-C(4)-C(3)	109.90(17)
		F(6)-C(4)-C(3)	108.66(17)
		F(5)-C(4)-Mn(1)	110.27(14)
		F(6)-C(4)-Mn(1)	116.96(14)
		C(3)-C(4)-Mn(1)	106.78(14)
		C(5R)-C(4R)-C(3R)	107.62(19)
		C(5R)-C(4R)-Mn(1)	71.97(12)
		C(3R)-C(4R)-Mn(1)	70.89(12)
		C(4R)-C(5R)-C(1R)	108.81(19)
		C(4R)-C(5R)-Mn(1)	71.02(11)
		C(1R)-C(5R)-Mn(1)	71.23(12)
		Mn(1)#1-O(1)-Mn(1)	180.000(1)
		O(1)-Mn(1)-C(1)	93.82(6)
		O(1)-Mn(1)-C(4)	94.32(7)
		C(1)-Mn(1)-C(4)	83.56(9)
		O(1)-Mn(1)-C(3R)	99.85(6)
		C(1)-Mn(1)-C(3R)	153.74(9)
		C(4)-Mn(1)-C(3R)	117.30(9)
		O(1)-Mn(1)-C(4R)	99.40(7)
		C(1)-Mn(1)-C(4R)	118.01(9)
		C(4)-Mn(1)-C(4R)	153.26(8)
		C(3R)-Mn(1)-C(4R)	37.72(8)
		O(1)-Mn(1)-C(2R)	130.93(7)
		C(1)-Mn(1)-C(2R)	135.25(9)
		C(4)-Mn(1)-C(2R)	91.24(9)
		C(3R)-Mn(1)-C(2R)	37.26(9)
		C(4R)-Mn(1)-C(2R)	62.49(9)
		O(1)-Mn(1)-C(1R)	161.09(6)
		C(1)-Mn(1)-C(1R)	99.92(8)
		C(4)-Mn(1)-C(1R)	100.04(9)
		C(3R)-Mn(1)-C(1R)	62.60(8)
		C(4R)-Mn(1)-C(1R)	62.65(9)
		C(2R)-Mn(1)-C(1R)	37.29(8)
		O(1)-Mn(1)-C(5R)	129.87(6)
		C(1)-Mn(1)-C(5R)	91.84(8)
		C(4)-Mn(1)-C(5R)	135.81(8)
		C(3R)-Mn(1)-C(5R)	62.23(8)
		C(4R)-Mn(1)-C(5R)	37.01(8)
		C(2R)-Mn(1)-C(5R)	62.04(8)
		C(1R)-Mn(1)-C(5R)	37.45(8)

Tab. 17d: Anisotrope Temperaturfaktoren für 44 in ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$)Der Exponent des anisotropen Temperaturfaktors nimmt die Form $(-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}])$ an.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}		U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
C(1)	25(1)	20(1)	24(1)	10(1)	8(1)	13(1)	C(6R)	37(1)	46(1)	27(1)	14(1)	18(1)	21(1)
C(1R)	21(1)	28(1)	26(1)	14(1)	12(1)	9(1)	O(1)	16(1)	16(1)	18(1)	7(1)	6(1)	7(1)
C(2)	32(1)	15(1)	22(1)	6(1)	7(1)	5(1)	F(1)	36(1)	27(1)	30(1)	14(1)	2(1)	16(1)
C(2R)	26(1)	28(1)	32(1)	21(1)	12(1)	12(1)	F(2)	42(1)	30(1)	46(1)	15(1)	24(1)	26(1)
C(3)	20(1)	23(1)	20(1)	4(1)	2(1)	0(1)	F(3)	53(1)	17(1)	38(1)	12(1)	7(1)	4(1)
C(3R)	27(1)	17(1)	37(1)	14(1)	13(1)	8(1)	F(4)	23(1)	41(1)	44(1)	14(1)	-6(1)	-7(1)
C(4)	19(1)	27(1)	21(1)	9(1)	3(1)	10(1)	F(5)	24(1)	43(1)	42(1)	14(1)	5(1)	22(1)
C(4R)	17(1)	20(1)	27(1)	7(1)	4(1)	1(1)	F(6)	31(1)	41(1)	21(1)	15(1)	0(1)	10(1)
C(5R)	15(1)	26(1)	31(1)	13(1)	9(1)	8(1)	Mn(1)	14(1)	14(1)	17(1)	6(1)	5(1)	6(1)

6.1.4. Kristallstruktur von 45

Tab. 18a: Kristalldaten und Strukturverfeinerung von 45

Summenformel	$C_{28} H_{30} F_{12} Mn_2 O$
Molekulargewicht	720.40
Temperatur	173(2) K
Wellenlänge	0.71073 \AA
Kristallsystem, Raumgruppe	tetragonal, $I4(1)/a$
Gitterkonstanten:	
a	16.778(5) \AA
b	16.778(5) \AA
c	20.231(7) \AA
α	90°
β	90°
γ	90°
Zellvolumen	5695(3) \AA^3
Z, berechnete Dichte	8, 1.680 g cm^{-3}
Absorptionskoeffizient	0.988 mm^{-1}
F(000)	2912
Kristallgröße	0.23 x 0.16 x 0.14 mm
θ -Bereich für die Datensammlung	1.58 bis 30.52°
kleinste und größte Indices	$-23 \leq h \leq 23$ $-23 \leq k \leq 23$ $-28 \leq l \leq 28$
gemessene / unabhängige Reflexe	34766 / 4345 [R(int) = 0.0328]
Vollständigkeit bis $\theta = 30.50^\circ$	99.8 %
Absorptionskorrektur	empirisch
Maximale und minimale Transmission	1.0 und 0.930337
Verfeinerungsmethoden	kleinste Fehlerquadrate
Reflexe / Einschränkungen / Parameter	4345 / 0 / 200
Goodness-of-fit gegen F^2	1.031
endgültiger R-Wert [$I > 2\sigma(I)$]	$R_1 = 0.0335$, $wR_2 = 0.0802$
R-Wert (alle Reflexe)	$R_1 = 0.0497$, $wR_2 = 0.0894$
größte und kleinste Restelektronendichte	0.374 und -0.264 $e \text{\AA}^{-3}$

**Tab. 18b: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für 45
U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.**

	x	y	z	U(eq)		x	y	z	U(eq)
Mn(1)	4174(1)	1833(1)	1086(1)	20(1)	C(1R)	3119(1)	2565(1)	762(1)	26(1)
C(1)	4876(1)	818(1)	1133(1)	31(1)	C(2R)	3558(1)	2324(1)	187(1)	24(1)
C(2)	5277(1)	834(1)	1787(1)	35(1)	C(3R)	3539(1)	1477(1)	155(1)	25(1)
C(3)	4932(1)	1243(1)	2261(1)	35(1)	C(4R)	3091(1)	1193(1)	708(1)	28(1)
C(4)	4166(1)	1648(1)	2098(1)	31(1)	F(1)	4517(1)	75(1)	1058(1)	44(1)
C(1M)	2924(1)	3399(1)	976(1)	41(1)	F(2)	5432(1)	829(1)	630(1)	40(1)
C(2M)	3934(1)	2862(1)	-316(1)	36(1)	F(3)	5936(1)	385(1)	1882(1)	49(1)
C(3M)	3886(1)	977(1)	-388(1)	40(1)	F(4)	5195(1)	1259(1)	2889(1)	51(1)
C(4M)	2827(1)	349(1)	827(1)	46(1)	F(5)	3559(1)	1177(1)	2364(1)	46(1)
C(5M)	2232(1)	1853(2)	1632(1)	47(1)	F(6)	4097(1)	2357(1)	2430(1)	40(1)
C(5R)	2824(1)	1869(1)	1076(1)	28(1)	O(1)	5000	2500	1094(1)	20(1)

Tab. 18c: Bindungslängen und -winkel in 45

Abstand in Å		Winkel in °					
Mn(1)-O(1)	1.7815(5)	O(1)-Mn(1)-C(4)	95.20(7)	F(2)-C(1)-F(1)	102.95(14)	C(2R)-C(1R)-Mn(1)	71.26(9)
Mn(1)-C(4)	2.0706(19)	O(1)-Mn(1)-C(1)	94.17(5)	F(2)-C(1)-C(2)	110.51(14)	C(1M)-C(1R)-Mn(1)	126.63(12)
Mn(1)-C(1)	2.0737(17)	C(4)-Mn(1)-C(1)	80.48(7)	F(1)-C(1)-C(2)	107.96(14)	C(3R)-C(2R)-C(1R)	107.87(14)
Mn(1)-C(4R)	2.2451(17)	O(1)-Mn(1)-C(4R)	158.99(6)	F(2)-C(1)-Mn(1)	109.83(11)	C(3R)-C(2R)-C(2M)	125.51(15)
Mn(1)-C(3R)	2.2451(17)	C(4)-Mn(1)-C(4R)	105.02(7)	F(1)-C(1)-Mn(1)	118.98(11)	C(1R)-C(2R)-C(2M)	126.54(15)
Mn(1)-C(2R)	2.2482(17)	C(1)-Mn(1)-C(4R)	94.73(7)	C(2)-C(1)-Mn(1)	106.52(12)	C(3R)-C(2R)-Mn(1)	71.43(9)
Mn(1)-C(1R)	2.2512(16)	O(1)-Mn(1)-C(3R)	122.95(7)	C(3)-C(2)-F(3)	123.27(19)	C(1R)-C(2R)-Mn(1)	71.49(9)
Mn(1)-C(5R)	2.2657(17)	C(4)-Mn(1)-C(3R)	141.85(7)	C(3)-C(2)-C(1)	117.33(15)	C(2M)-C(2R)-Mn(1)	125.20(11)
C(1)-F(2)	1.381(2)	C(1)-Mn(1)-C(3R)	95.12(7)	F(3)-C(2)-C(1)	119.21(18)	C(2R)-C(3R)-C(4R)	108.03(14)
C(1)-F(1)	1.394(2)	C(4R)-Mn(1)-C(3R)	37.17(6)	C(2)-C(3)-F(4)	123.67(17)	C(2R)-C(3R)-C(3M)	125.66(16)
C(1)-C(2)	1.484(3)	O(1)-Mn(1)-C(2R)	97.77(6)	C(2)-C(3)-C(4)	117.20(17)	C(4R)-C(3R)-C(3M)	126.21(16)
C(2)-C(3)	1.315(3)	C(4)-Mn(1)-C(2R)	148.48(6)	F(4)-C(3)-C(4)	118.88(17)	C(2R)-C(3R)-Mn(1)	71.67(9)
C(2)-F(3)	1.3520(19)	C(1)-Mn(1)-C(2R)	126.76(7)	F(6)-C(4)-F(5)	104.00(14)	C(4R)-C(3R)-Mn(1)	71.42(10)
C(3)-F(4)	1.347(2)	C(4R)-Mn(1)-C(2R)	61.83(6)	F(6)-C(4)-C(3)	111.06(16)	C(3M)-C(3R)-Mn(1)	125.46(12)
C(3)-C(4)	1.490(3)	C(3R)-Mn(1)-C(2R)	36.90(6)	F(5)-C(4)-C(3)	106.62(14)	C(5R)-C(4R)-C(3R)	107.90(14)
C(4)-F(6)	1.372(2)	O(1)-Mn(1)-C(1R)	105.79(5)	F(6)-C(4)-Mn(1)	110.69(11)	C(5R)-C(4R)-C(4M)	124.96(17)
C(4)-F(5)	1.396(2)	C(4)-Mn(1)-C(1R)	111.40(7)	F(5)-C(4)-Mn(1)	118.06(12)	C(3R)-C(4R)-C(4M)	126.44(17)
C(1M)-C(1R)	1.501(2)	C(1)-Mn(1)-C(1R)	155.25(7)	C(3)-C(4)-Mn(1)	106.36(12)	C(5R)-C(4R)-Mn(1)	72.32(9)
C(2M)-C(2R)	1.498(2)	C(4R)-Mn(1)-C(1R)	61.70(6)	C(1R)-C(5R)-C(4R)	108.17(14)	C(3R)-C(4R)-Mn(1)	71.42(9)
C(3M)-C(3R)	1.500(2)	C(3R)-Mn(1)-C(1R)	61.86(6)	C(1R)-C(5R)-C(5M)	125.53(17)	C(4M)-C(4R)-Mn(1)	129.43(13)
C(4M)-C(4R)	1.503(2)	C(2R)-Mn(1)-C(1R)	37.24(6)	C(4R)-C(5R)-C(5M)	125.68(18)	Mn(1)-O(1)-Mn(1)#1	178.96(10)
C(5M)-C(5R)	1.502(2)	O(1)-Mn(1)-C(5R)	139.59(5)	C(1R)-C(5R)-Mn(1)	71.15(9)		
C(5R)-C(1R)	1.418(2)	C(4)-Mn(1)-C(5R)	90.39(6)	C(4R)-C(5R)-Mn(1)	70.75(9)		
C(5R)-C(4R)	1.429(2)	C(1)-Mn(1)-C(5R)	126.19(7)	C(5M)-C(5R)-Mn(1)	130.84(13)		
C(1R)-C(2R)	1.437(2)	C(4R)-Mn(1)-C(5R)	36.93(6)	C(5R)-C(1R)-C(2R)	108.02(14)		
C(2R)-C(3R)	1.422(2)	C(3R)-Mn(1)-C(5R)	61.66(6)	C(5R)-C(1R)-C(1M)	124.25(16)		
C(3R)-C(4R)	1.431(2)	C(2R)-Mn(1)-C(5R)	61.56(6)	C(2R)-C(1R)-C(1M)	127.48(17)		
O(1)-Mn(1)#1	1.7815(5)	C(1R)-Mn(1)-C(5R)	36.60(6)	C(5R)-C(1R)-Mn(1)	72.25(9)		

Tab. 19d: Anisotrope Temperaturfaktoren für 45 in ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$)Der Exponent des anisotropen Temperaturfaktors nimmt die Form $(-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}])$ an.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}		U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Mn(1)	18(1)	18(1)	24(1)	0(1)	2(1)	3(1)	C(1R)	20(1)	25(1)	32(1)	-7(1)	-5(1)	6(1)
C(1)	25(1)	19(1)	48(1)	2(1)	7(1)	3(1)	C(2R)	21(1)	24(1)	25(1)	0(1)	-3(1)	1(1)
C(2)	23(1)	28(1)	54(1)	18(1)	0(1)	5(1)	C(3R)	23(1)	25(1)	28(1)	-7(1)	-1(1)	1(1)
C(3)	32(1)	37(1)	37(1)	17(1)	-3(1)	0(1)	C(4R)	21(1)	25(1)	37(1)	2(1)	0(1)	-2(1)
C(4)	27(1)	37(1)	29(1)	8(1)	4(1)	2(1)	F(1)	35(1)	20(1)	77(1)	1(1)	4(1)	1(1)
C(1M)	29(1)	31(1)	63(1)	-21(1)	-12(1)	11(1)	F(2)	33(1)	31(1)	55(1)	-2(1)	16(1)	8(1)
C(2M)	31(1)	39(1)	37(1)	13(1)	-3(1)	-3(1)	F(3)	30(1)	40(1)	78(1)	26(1)	-1(1)	13(1)
C(3M)	37(1)	42(1)	40(1)	-20(1)	2(1)	5(1)	F(4)	48(1)	66(1)	39(1)	24(1)	-11(1)	1(1)
C(4M)	33(1)	30(1)	74(2)	12(1)	-4(1)	-10(1)	F(5)	32(1)	63(1)	43(1)	23(1)	7(1)	-5(1)
C(5M)	25(1)	82(2)	36(1)	2(1)	9(1)	9(1)	F(6)	41(1)	51(1)	29(1)	-6(1)	4(1)	10(1)
C(5R)	17(1)	39(1)	28(1)	-2(1)	1(1)	4(1)	O(1)	20(1)	18(1)	23(1)	0	0	4(1)

6.1.5. Kristallstrukturen der Solvate von 49

Tab. 20a: Kristalldaten und Strukturverfeinerung von 49 · CH₂Cl₂

Summenformel	C ₄₂ H ₃₂ Cl ₃ F ₄ Ir O P ₂
Molekulargewicht	989.17 g mol ⁻¹
Temperatur	173(2) K
Wellenlänge	0.71073 Å
Kristallsystem, Raumgruppe	Monoklin, P2 ₁ /n
Gitterkonstanten:	
a	12.092(3) Å
b	23.019(5) Å
c	13.640(3) Å
α	90 °
β	90.031(6) °
γ	90 °
Zellvolumen	3796.5(16) Å ³
Z, berechnete Dichte	4, 1.731 g/cm ³
Absorptionskoeffizient	3.866 mm ⁻¹
F(000)	1944
Kristallgröße	0.29 x 0.11 x 0.03 mm
θ-Bereich für die Datensammlung	1.74 bis 25.05 °
kleinste und größte Indices	=-14<=h<=14, -27<=k<=26, -15<=l<=16
gemessene / unabhängige Reflexe	30098 / 6668 [R(int) = 0.0956]
Vollständigkeit bis θ = 25.05°	99.4 %
Absorptionskorrektur	empirisch
Maximale und minimale Transmission	1.0 und 0.642006
Verfeinerungsmethoden	kleinste Fehlerquadrate
Reflexe / Einschränkungen / Parameter	6668 / 0 / 478
Goodness-of-fit gegen F ²	1.033
endgültiger R-Wert [$I > 2\sigma(I)$]	R1 = 0.0454, wR2 = 0.1018
R-Wert (alle Reflexe)	R1 = 0.0781, wR2 = 0.1161
größte und kleinste Restelektronendichte	1.172 und -1.767 e.Å ⁻³

Tab. 20b: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für 49 · CH₂Cl₂ U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij}-Tensors.

	x	y	z	U(eq)		x	y	z	U(eq)
C(1)	715(7)	8176(3)	3356(6)	28(2)	C(22)	3619(9)	10675(4)	5717(7)	44(2)
C(1B)	3861(8)	8709(4)	2715(7)	41(2)	C(23)	4383(8)	10657(4)	4974(8)	48(3)
C(1L)	2203(14)	8912(7)	7622(16)	147(8)	C(24)	4087(7)	10590(3)	4001(7)	35(2)
C(1O)	247(8)	9864(3)	2689(6)	35(2)	C(25)	3713(7)	10531(4)	1771(7)	40(2)
C(2)	88(7)	8346(4)	4150(6)	35(2)	C(26)	3985(8)	11072(4)	1448(8)	53(3)
C(2B)	3005(7)	9023(3)	2850(6)	33(2)	C(27)	4929(9)	11179(5)	916(8)	63(3)
C(3)	238(8)	8097(4)	5060(7)	41(2)	C(28)	5619(12)	10764(6)	705(12)	108(6)
C(3B)	2313(7)	9201(3)	3628(6)	35(2)	C(29)	5416(16)	10222(6)	1100(20)	224(15)
C(4)	1032(9)	7672(4)	5197(7)	52(3)	C(30)	4444(13)	10106(5)	1580(15)	152(10)
C(4B)	2180(9)	9146(4)	4567(7)	43(2)	C(31)	1605(7)	11018(3)	2237(5)	27(2)
C(5)	1677(8)	7501(4)	4408(7)	46(2)	C(32)	869(7)	10983(3)	1444(6)	33(2)
C(6)	1513(7)	7752(3)	3484(6)	36(2)	C(33)	243(8)	11459(4)	1197(6)	44(2)
C(7)	1173(6)	8081(3)	1290(6)	26(2)	C(34)	329(8)	11971(4)	1720(7)	43(2)
C(8)	2160(7)	8156(3)	821(6)	31(2)	C(35)	1043(8)	12007(3)	2498(6)	36(2)
C(9)	2536(8)	7745(4)	151(6)	43(2)	C(36)	1675(7)	11534(4)	2750(6)	34(2)
C(10)	1916(8)	7268(4)	-44(7)	44(2)	O(1)	-524(6)	10068(3)	2988(6)	57(2)
C(11)	911(9)	7184(4)	400(7)	49(3)	F(1)	4449(5)	8438(2)	3424(5)	62(2)
C(12)	539(8)	7590(3)	1073(7)	42(2)	F(2)	4353(4)	8587(2)	1874(5)	54(2)
C(13)	-797(6)	8659(3)	1930(6)	27(2)	F(3)	2881(6)	8871(3)	5166(4)	72(2)
C(14)	-1605(7)	8305(3)	2342(6)	34(2)	F(4)	1359(6)	9361(2)	5104(4)	62(2)
C(15)	-2708(7)	8374(4)	2074(6)	35(2)	P(1)	665(2)	8589(1)	2218(2)	23(1)
C(16)	-3011(7)	8771(4)	1378(6)	41(2)	P(2)	2503(2)	10398(1)	2521(2)	26(1)
C(17)	-2210(7)	9125(4)	956(7)	42(2)	Cl(1)	1634(2)	9590(1)	582(1)	34(1)
C(18)	-1127(7)	9076(3)	1235(6)	31(2)	Cl(1L)	3079(4)	9490(2)	7233(4)	119(1)
C(19)	2966(6)	10532(3)	3773(6)	28(2)	Cl(2L)	2845(5)	8238(2)	7439(4)	145(2)
C(20)	2192(7)	10555(3)	4525(6)	30(2)	Ir(1)	1599(1)	9488(1)	2374(1)	23(1)
C(21)	2522(8)	10628(3)	5489(6)	35(2)					

Tab. 20c: Bindungslängen und -winkel in 49 · CH₂Cl₂

Abstand in Å				Winkel in °			
C(1)-C(2)	1.380(11)	C(27)-C(28)	1.300(16)	C(2)-C(1)-C(6)	119.0(8)	C(23)-C(24)-C(19)	118.3(9)
C(1)-C(6)	1.384(11)	C(28)-C(29)	1.380(18)	C(2)-C(1)-P(1)	120.2(6)	C(30)-C(25)-C(26)	116.3(9)
C(1)-P(1)	1.820(8)	C(29)-C(30)	1.374(17)	C(6)-C(1)-P(1)	119.9(6)	C(30)-C(25)-P(2)	121.1(8)
C(1B)-C(2B)	1.275(12)	C(31)-C(36)	1.382(11)	C(2B)-C(1B)-F(2)	127.7(9)	C(26)-C(25)-P(2)	122.3(7)
C(1B)-F(2)	1.323(11)	C(31)-C(32)	1.402(11)	C(2B)-C(1B)-F(1)	125.7(9)	C(25)-C(26)-C(27)	122.4(10)
C(1B)-F(1)	1.352(10)	C(31)-P(2)	1.834(8)	F(2)-C(1B)-F(1)	106.6(8)	C(28)-C(27)-C(26)	121.2(10)
C(1L)-Cl(2L)	1.754(17)	C(32)-C(33)	1.375(12)	Cl(2L)-C(1L)-Cl(1L)	110.8(10)	C(27)-C(28)-C(29)	117.6(11)
C(1L)-Cl(1L)	1.780(15)	C(33)-C(34)	1.382(12)	O(1)-C(1O)-Ir(1)	171.7(8)	C(30)-C(29)-C(28)	121.0(13)
C(1O)-O(1)	1.121(10)	C(34)-C(35)	1.369(12)	C(3)-C(2)-C(1)	121.1(8)	C(25)-C(30)-C(29)	120.9(11)
C(1O)-Ir(1)	1.899(10)	C(35)-C(36)	1.374(12)	C(1B)-C(2B)-C(3B)	139.0(9)	C(36)-C(31)-C(32)	118.6(7)
C(2)-C(3)	1.379(11)	P(1)-Ir(1)	2.3679(19)	C(1B)-C(2B)-Ir(1)	153.6(8)	C(36)-C(31)-P(2)	121.7(6)
C(2B)-C(3B)	1.412(12)	P(2)-Ir(1)	2.371(2)	C(3B)-C(2B)-Ir(1)	66.8(5)	C(32)-C(31)-P(2)	119.6(6)
C(2B)-Ir(1)	2.112(9)	Cl(1)-Ir(1)	2.456(2)	C(2)-C(3)-C(4)	120.4(9)	C(33)-C(32)-C(31)	119.5(7)
C(3)-C(4)	1.384(13)			C(4B)-C(3B)-C(2B)	142.0(9)	C(32)-C(33)-C(34)	120.8(8)
C(3B)-C(4B)	1.297(12)			C(4B)-C(3B)-Ir(1)	144.3(8)	C(35)-C(34)-C(33)	119.9(8)
C(3B)-Ir(1)	2.027(8)			C(2B)-C(3B)-Ir(1)	73.3(5)	C(34)-C(35)-C(36)	119.8(8)
C(4)-C(5)	1.386(13)			C(3)-C(4)-C(5)	119.1(9)	C(35)-C(36)-C(31)	121.4(8)
C(4B)-F(4)	1.329(11)			C(3B)-C(4B)-F(4)	127.0(9)	C(13)-P(1)-C(1)	105.2(4)
C(4B)-F(3)	1.336(11)			C(3B)-C(4B)-F(3)	124.8(10)	C(13)-P(1)-C(7)	103.5(3)
C(5)-C(6)	1.400(12)			F(4)-C(4B)-F(3)	108.2(8)	C(1)-P(1)-C(7)	104.2(4)
C(7)-C(8)	1.365(11)			C(4)-C(5)-C(6)	120.2(9)	C(13)-P(1)-Ir(1)	113.9(2)
C(7)-C(12)	1.396(11)			C(1)-C(6)-C(5)	120.2(8)	C(1)-P(1)-Ir(1)	111.4(3)
C(7)-P(1)	1.829(8)			C(8)-C(7)-C(12)	118.9(7)	C(7)-P(1)-Ir(1)	117.4(3)
C(8)-C(9)	1.392(11)			C(8)-C(7)-P(1)	122.5(6)	C(25)-P(2)-C(19)	104.7(4)
C(9)-C(10)	1.357(13)			C(12)-C(7)-P(1)	118.6(6)	C(25)-P(2)-C(31)	103.1(4)
C(10)-C(11)	1.372(14)			C(7)-C(8)-C(9)	120.6(8)	C(19)-P(2)-C(31)	104.4(3)
C(11)-C(12)	1.386(12)			C(10)-C(9)-C(8)	119.8(9)	C(25)-P(2)-Ir(1)	118.3(3)
C(13)-C(14)	1.391(11)			C(9)-C(10)-C(11)	121.1(8)	C(19)-P(2)-Ir(1)	111.7(2)
C(13)-C(18)	1.408(11)			C(10)-C(11)-C(12)	119.0(9)	C(31)-P(2)-Ir(1)	113.3(3)
C(13)-P(1)	1.818(8)			C(11)-C(12)-C(7)	120.5(9)	C(1O)-Ir(1)-C(3B)	108.9(4)
C(14)-C(15)	1.392(12)			C(14)-C(13)-C(18)	118.3(7)	C(1O)-Ir(1)-C(2B)	148.7(4)
C(15)-C(16)	1.367(12)			C(14)-C(13)-P(1)	122.9(6)	C(3B)-Ir(1)-C(2B)	39.8(3)
C(16)-C(17)	1.391(12)			C(18)-C(13)-P(1)	118.8(6)	C(1O)-Ir(1)-P(1)	90.5(2)
C(17)-C(18)	1.368(11)			C(13)-C(14)-C(15)	120.0(8)	C(3B)-Ir(1)-P(1)	89.6(2)
C(19)-C(20)	1.391(11)			C(16)-C(15)-C(14)	121.1(8)	C(2B)-Ir(1)-P(1)	88.1(2)
C(19)-C(24)	1.397(11)			C(15)-C(16)-C(17)	119.4(8)	C(1O)-Ir(1)-P(2)	88.6(2)
C(19)-P(2)	1.822(8)			C(18)-C(17)-C(16)	120.3(8)	C(3B)-Ir(1)-P(2)	91.2(2)
C(20)-C(21)	1.383(11)			C(17)-C(18)-C(13)	120.9(7)	C(2B)-Ir(1)-P(2)	92.9(2)
C(21)-C(22)	1.367(13)			C(20)-C(19)-C(24)	119.0(8)	P(1)-Ir(1)-P(2)	178.92(7)
C(22)-C(23)	1.372(14)			C(20)-C(19)-P(2)	119.5(6)	C(1O)-Ir(1)-Cl(1)	101.4(3)
C(23)-C(24)	1.384(13)			C(24)-C(19)-P(2)	121.5(6)	C(3B)-Ir(1)-Cl(1)	149.7(3)
C(25)-C(30)	1.345(14)			C(21)-C(20)-C(19)	120.8(8)	C(2B)-Ir(1)-Cl(1)	109.9(2)
C(25)-C(26)	1.360(12)			C(22)-C(21)-C(20)	120.3(9)	P(1)-Ir(1)-Cl(1)	90.14(7)
C(25)-P(2)	1.811(8)			C(21)-C(22)-C(23)	118.9(9)	P(2)-Ir(1)-Cl(1)	89.55(7)
C(26)-C(27)	1.374(13)			C(22)-C(23)-C(24)	122.5(9)		

Tab. 20d: Anisotrope Temperaturfaktoren für 49 · CH₂Cl₂ in (Å²·10³)Der Exponent des anisotropen Temperaturfaktors nimmt die Form $(-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}])$ an.

	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂		U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂
C(1)	33(5)	20(4)	31(5)	1(4)	6(4)	-5(4)	C(22)	62(7)	25(5)	45(6)	4(4)	-20(5)	-6(4)
C(1B)	35(5)	37(5)	52(6)	-1(5)	-9(5)	-1(4)	C(23)	43(6)	28(5)	72(8)	5(5)	-15(6)	-1(4)
C(1L)	114(14)	82(11)	250(20)	72(13)	23(14)	-15(10)	C(24)	32(5)	23(4)	50(6)	1(4)	7(4)	-2(4)
C(1O)	44(6)	20(4)	39(5)	-2(4)	8(4)	-11(4)	C(25)	37(5)	40(5)	42(5)	-3(4)	19(4)	-12(4)
C(2)	43(5)	29(5)	31(5)	5(4)	10(4)	-3(4)	C(26)	39(6)	41(6)	78(8)	22(5)	19(5)	1(5)
C(2B)	34(5)	27(4)	37(5)	-1(4)	5(4)	-9(4)	C(27)	52(7)	60(7)	75(8)	33(6)	10(6)	-16(6)
C(3)	49(6)	40(5)	34(5)	5(4)	11(4)	-10(4)	C(28)	101(11)	59(8)	164(15)	-1(9)	102(11)	-10(8)
C(3B)	40(5)	25(4)	39(5)	0(4)	-1(4)	-14(4)	C(29)	176(18)	41(8)	460(40)	36(14)	260(20)	30(10)
C(4)	80(8)	34(5)	42(6)	15(5)	-8(6)	-7(5)	C(30)	146(14)	29(6)	280(20)	6(9)	184(16)	6(8)
C(4B)	59(6)	39(5)	32(5)	1(4)	5(5)	-17(5)	C(31)	39(5)	18(4)	23(4)	0(3)	7(4)	-2(4)
C(5)	66(7)	22(4)	49(6)	11(4)	-8(5)	5(4)	C(32)	49(5)	19(4)	31(5)	-4(4)	3(4)	-5(4)
C(6)	48(6)	18(4)	41(5)	-4(4)	5(4)	2(4)	C(33)	62(6)	37(5)	33(5)	0(4)	-10(5)	1(5)
C(7)	27(4)	21(4)	31(5)	-1(3)	1(4)	3(3)	C(34)	61(6)	28(5)	41(5)	9(4)	-4(5)	14(4)
C(8)	37(5)	23(4)	33(5)	-7(4)	2(4)	1(4)	C(35)	53(6)	22(4)	33(5)	-2(4)	8(4)	-4(4)
C(9)	57(6)	41(5)	32(5)	-9(4)	14(5)	5(5)	C(36)	35(5)	33(5)	35(5)	2(4)	11(4)	-6(4)
C(10)	62(7)	39(5)	33(5)	-9(4)	2(5)	23(5)	O(1)	47(4)	40(4)	84(5)	-13(4)	34(4)	3(3)
C(11)	69(7)	22(5)	54(6)	-16(4)	-11(6)	3(5)	F(1)	56(4)	40(3)	90(4)	-3(3)	-36(3)	4(3)
C(12)	52(6)	24(5)	49(6)	-7(4)	8(5)	-3(4)	F(2)	34(3)	45(3)	82(4)	-12(3)	8(3)	2(2)
C(13)	28(4)	20(4)	33(5)	-7(3)	12(4)	1(3)	F(3)	93(5)	73(4)	49(4)	23(3)	-23(3)	-21(4)
C(14)	38(5)	25(4)	39(5)	-1(4)	1(4)	0(4)	F(4)	104(5)	45(3)	36(3)	-6(3)	21(3)	-30(3)
C(15)	35(5)	37(5)	35(5)	4(4)	4(4)	-15(4)	P(1)	25(1)	17(1)	26(1)	-2(1)	6(1)	-1(1)
C(16)	27(5)	54(6)	42(5)	8(5)	2(4)	-3(4)	P(2)	30(1)	18(1)	30(1)	-2(1)	9(1)	-5(1)
C(17)	32(5)	44(5)	51(6)	20(5)	2(4)	0(4)	Cl(1)	48(1)	25(1)	28(1)	-1(1)	12(1)	-4(1)
C(18)	35(5)	29(4)	29(5)	9(4)	17(4)	-8(4)	Cl(1L)	107(3)	100(3)	150(4)	14(3)	1(3)	-1(2)
C(19)	30(4)	15(4)	37(5)	-4(4)	1(4)	-4(3)	Cl(2L)	233(6)	78(3)	124(4)	-1(3)	-29(4)	28(3)
C(20)	27(4)	28(4)	35(5)	-1(4)	2(4)	-5(4)	Ir(1)	28(1)	16(1)	25(1)	-1(1)	9(1)	-4(1)
C(21)	51(6)	23(4)	30(5)	0(4)	8(4)	-1(4)							

Tab. 21a: Kristalldaten und Strukturverfeinerung von $49 \cdot 3 \text{CHCl}_3$

Summenformel	$\text{C}_{44} \text{H}_{33} \text{Cl}_7 \text{F}_4 \text{Ir O P}_2$
Molekulargewicht	1156.08
Temperatur	173(2) K
Wellenlänge	0.71069 Å
Kristallsystem, Raumgruppe	monoklin, $P2(1)/c$
Gitterkonstanten:	
a	14.577(5) Å
b	12.233(5) Å
c	27.982(5) Å
α	90.000(5) °
β	101.746(5) °
γ	90.000(5) °
Zellvolumen	4885(3) Å ³
Z, berechnete Dichte	4, 1.712 g cm ⁻³
Absorptionskoeffizient	3.395 mm ⁻¹
F(000)	2460
Kristallgröße	0.2 x 0.17 x 0.03 mm
θ -Bereich für die Datensammlung	1.43 bis 25.04 °
kleinste und größte Indices	$-17 \leq h \leq 17$ $-14 \leq k \leq 11$ $-33 \leq l \leq 23$
gemessene / unabhängige Reflexe	39494 / 8632 [R(int) = 0.1397]
Vollständigkeit bis $\theta = 25.04^\circ$	99.7 %
Absorptionskorrektur	keine
Verfeinerungsmethoden	kleinste Fehlerquadrate
Reflexe / Einschränkungen / Parameter	8632 / 0 / 556
Goodness-of-fit gegen F^2	0.975
endgültiger R-Wert [$I > 2\sigma(I)$]	$R_1 = 0.0519$, $wR_2 = 0.1232$
R-Wert (alle Reflexe)	$R_1 = 0.1012$, $wR_2 = 0.1526$
größte und kleinste Restelektronendichte	1.767 und -2.339 e Å ⁻³

Tab. 21b: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für $49 \cdot 3 \text{CHCl}_3$. $U(\text{eq})$ ist definiert als $1/3$ des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U(eq)		x	y	z	U(eq)
C(1L)	2362(9)	762(13)	5897(5)	81(5)	C(27)	3392(9)	4822(9)	4955(4)	51(3)
C(1O)	4013(9)	217(8)	3701(4)	46(3)	C(28)	2662(9)	4537(10)	5183(4)	59(3)
C(2)	745(7)	-1841(9)	3384(4)	48(3)	C(29)	2164(9)	3607(10)	5053(4)	58(3)
C(2B)	1472(7)	954(7)	3725(3)	35(2)	C(30)	2351(7)	2957(8)	4674(4)	42(3)
C(2L)	5216(10)	1709(12)	2543(5)	82(4)	C(31)	4558(7)	2641(8)	3967(3)	34(2)
C(3)	122(9)	-2104(10)	2953(5)	72(4)	C(32)	5177(7)	2105(8)	4340(4)	43(3)
C(3B)	1886(7)	751(7)	3310(4)	37(3)	C(33)	6123(7)	2202(9)	4407(4)	48(3)
C(3L)	852(10)	5080(12)	6437(5)	72(4)	C(34)	6492(8)	2852(9)	4076(4)	51(3)
C(4)	448(11)	-2233(10)	2533(5)	74(4)	C(35)	5897(7)	3388(8)	3703(4)	45(3)
C(4B)	1690(7)	663(9)	2844(3)	39(2)	C(36)	4938(7)	3280(8)	3650(4)	37(2)
C(5)	1387(11)	-2125(9)	2538(4)	64(4)	F(1)	-132(4)	1264(6)	3467(2)	70(2)
C(6)	1988(9)	-1872(8)	2961(4)	48(3)	F(2)	444(4)	1289(5)	4242(2)	60(2)
C(7)	1903(6)	-1700(8)	4424(3)	31(2)	F(3)	856(5)	765(5)	2554(2)	62(2)
C(8)	1472(7)	-954(8)	4679(3)	37(2)	F(4)	2325(5)	438(5)	2567(2)	56(2)
C(9)	957(7)	-1299(9)	5015(4)	44(3)	P(1)	2497(2)	-1290(2)	3945(1)	29(1)
C(10)	863(8)	-2416(9)	5105(4)	52(3)	P(2)	3304(2)	2442(2)	3932(1)	30(1)
C(11)	1286(8)	-3147(9)	4849(5)	57(3)	Cl(1)	3480(2)	496(2)	4807(1)	35(1)
C(12)	1807(7)	-2816(8)	4521(4)	48(3)	Cl(11)	1264(3)	1294(3)	5704(2)	89(1)
C(13)	3497(6)	-2214(7)	3996(3)	25(2)	Cl(12)	2321(4)	-413(4)	6244(2)	131(2)
C(14)	3433(7)	-3192(7)	3738(3)	37(2)	Cl(13)	3118(3)	1735(5)	6229(2)	131(2)
C(15)	4203(7)	-3869(8)	3772(4)	41(3)	Cl(21)	5273(3)	3022(3)	2316(2)	93(1)
C(16)	5035(8)	-3589(8)	4075(4)	43(3)	Cl(22)	4253(3)	1020(4)	2213(2)	96(1)
C(17)	5107(7)	-2645(8)	4348(4)	42(3)	Cl(23)	6251(3)	984(4)	2549(2)	116(2)
C(18)	4344(6)	-1956(8)	4307(3)	35(2)	Cl(31)	84(11)	4312(12)	6048(5)	177(5)
C(19)	2738(7)	3250(8)	3398(4)	37(2)	Cl(32)	1073(9)	6339(11)	6259(4)	146(4)
C(20)	2861(8)	2924(9)	2937(4)	45(3)	Cl(33)	1944(10)	4343(11)	6389(5)	165(5)
C(21)	2460(9)	3519(10)	2530(4)	55(3)	Cl(34)	981(6)	3787(8)	6248(3)	98(2)
C(22)	1894(9)	4390(10)	2575(4)	61(4)	Cl(35)	-181(6)	5707(7)	6046(3)	97(2)
C(23)	1751(8)	4703(9)	3021(5)	58(3)	Cl(36)	1779(6)	5901(7)	6385(3)	85(2)
C(24)	2142(7)	4132(8)	3430(4)	43(3)	Ir(1)	2907(1)	571(1)	3918(1)	28(1)
C(25)	3077(7)	3232(8)	4441(3)	38(2)	O(1)	4637(5)	33(6)	3514(3)	52(2)
C(26)	3597(8)	4169(8)	4587(4)	46(3)					

Tab. 21c: Bindungslängen in 49 · 3 CHCl₃

Abstand in Å							
C(1)-C(6)	1.365(14)	C(3B)-Ir(1)	2.033(10)	C(13)-C(14)	1.391(12)	C(29)-C(30)	1.396(14)
C(1)-C(2)	1.372(14)	C(3L)-Cl(32)	1.670(18)	C(13)-P(1)	1.826(8)	C(31)-C(36)	1.381(13)
C(1)-P(1)	1.839(10)	C(3L)-Cl(31)	1.681(18)	C(14)-C(15)	1.382(13)	C(31)-C(32)	1.395(13)
C(1B)-C(2B)	1.263(14)	C(3L)-Cl(34)	1.691(17)	C(15)-C(16)	1.374(14)	C(31)-P(2)	1.826(10)
C(1B)-F(2)	1.334(12)	C(3L)-Cl(36)	1.714(16)	C(16)-C(17)	1.378(14)	C(32)-C(33)	1.358(14)
C(1B)-F(1)	1.350(12)	C(3L)-Cl(35)	1.840(16)	C(17)-C(18)	1.382(13)	C(33)-C(34)	1.408(15)
C(1L)-Cl(11)	1.710(13)	C(3L)-Cl(33)	1.86(2)	C(19)-C(20)	1.397(14)	C(34)-C(35)	1.381(14)
C(1L)-Cl(12)	1.742(16)	C(4)-C(5)	1.372(19)	C(19)-C(24)	1.400(14)	C(35)-C(36)	1.382(14)
C(1L)-Cl(13)	1.755(15)	C(4B)-F(3)	1.323(11)	C(19)-P(2)	1.841(10)	P(1)-Ir(1)	2.359(3)
C(1O)-O(1)	1.160(13)	C(4B)-F(4)	1.351(12)	C(20)-C(21)	1.377(14)	P(2)-Ir(1)	2.359(3)
C(1O)-Ir(1)	1.886(13)	C(5)-C(6)	1.356(14)	C(21)-C(22)	1.369(17)	Cl(1)-Ir(1)	2.459(2)
C(2)-C(3)	1.393(15)	C(7)-C(8)	1.385(13)	C(22)-C(23)	1.361(17)	Cl(31)-Cl(34)	1.462(16)
C(2B)-C(3B)	1.438(14)	C(7)-C(12)	1.404(13)	C(23)-C(24)	1.362(15)	Cl(31)-Cl(35)	1.750(16)
C(2B)-Ir(1)	2.105(11)	C(7)-P(1)	1.810(9)	C(25)-C(26)	1.388(14)	Cl(32)-Cl(36)	1.150(13)
C(2L)-Cl(22)	1.734(15)	C(8)-C(9)	1.384(14)	C(25)-C(30)	1.392(14)	Cl(32)-Cl(35)	1.962(15)
C(2L)-Cl(21)	1.735(15)	C(9)-C(10)	1.401(14)	C(25)-P(2)	1.808(10)	Cl(33)-Cl(34)	1.537(15)
C(2L)-Cl(23)	1.747(14)	C(10)-C(11)	1.368(15)	C(26)-C(27)	1.383(15)	Cl(33)-Cl(36)	1.922(15)
C(3)-C(4)	1.361(19)	C(11)-C(12)	1.368(15)	C(27)-C(28)	1.392(17)		
C(3B)-C(4B)	1.279(13)	C(13)-C(18)	1.395(12)	C(28)-C(29)	1.359(16)		

Tab. 21d: Bindungswinkel in 49 · 3 CHCl₃

Winkel in °					
C(6)-C(1)-C(2)	119.0(10)	Cl(31)-C(3L)-Cl(36)	134.8(10)	C(32)-C(31)-P(2)	117.8(8)
C(6)-C(1)-P(1)	120.6(8)	Cl(34)-C(3L)-Cl(36)	112.5(9)	C(33)-C(32)-C(31)	123.2(10)
C(2)-C(1)-P(1)	120.2(8)	Cl(32)-C(3L)-Cl(35)	67.8(8)	C(32)-C(33)-C(34)	118.1(10)
C(2B)-C(1B)-F(2)	126.5(10)	Cl(31)-C(3L)-Cl(35)	59.4(7)	C(35)-C(34)-C(33)	120.0(10)
C(2B)-C(1B)-F(1)	126.4(10)	Cl(34)-C(3L)-Cl(35)	109.5(8)	C(36)-C(35)-C(34)	120.1(10)
F(2)-C(1B)-F(1)	107.1(8)	Cl(36)-C(3L)-Cl(35)	105.6(8)	C(31)-C(36)-C(35)	121.0(10)
Cl(11)-C(1L)-Cl(12)	110.8(8)	Cl(32)-C(3L)-Cl(33)	101.9(9)	C(7)-P(1)-C(13)	105.3(4)
Cl(11)-C(1L)-Cl(13)	110.9(9)	Cl(31)-C(3L)-Cl(33)	98.5(10)	C(7)-P(1)-C(1)	103.0(4)
Cl(12)-C(1L)-Cl(13)	110.8(7)	Cl(34)-C(3L)-Cl(33)	51.1(6)	C(13)-P(1)-C(1)	104.7(4)
O(1)-C(1O)-Ir(1)	172.1(10)	Cl(36)-C(3L)-Cl(33)	64.9(7)	C(7)-P(1)-Ir(1)	117.0(3)
C(1)-C(2)-C(3)	120.0(12)	Cl(35)-C(3L)-Cl(33)	140.2(9)	C(13)-P(1)-Ir(1)	113.4(3)
C(1B)-C(2B)-C(3B)	137.5(10)	C(3)-C(4)-C(5)	120.1(12)	C(1)-P(1)-Ir(1)	112.2(3)
C(1B)-C(2B)-Ir(1)	155.3(9)	C(3B)-C(4B)-F(3)	127.2(10)	C(25)-P(2)-C(31)	103.2(4)
C(3B)-C(2B)-Ir(1)	67.0(6)	C(3B)-C(4B)-F(4)	124.3(9)	C(25)-P(2)-C(19)	103.3(4)
Cl(22)-C(2L)-Cl(21)	110.4(8)	F(3)-C(4B)-F(4)	108.5(8)	C(31)-P(2)-C(19)	104.5(4)
Cl(22)-C(2L)-Cl(23)	111.3(8)	C(6)-C(5)-C(4)	119.8(13)	C(25)-P(2)-Ir(1)	116.6(3)
Cl(21)-C(2L)-Cl(23)	111.7(8)	C(1)-C(6)-C(5)	121.5(12)	C(31)-P(2)-Ir(1)	111.7(3)
C(4)-C(3)-C(2)	119.6(13)	C(8)-C(7)-C(12)	117.9(9)	C(19)-P(2)-Ir(1)	116.1(3)
C(4B)-C(3B)-C(2B)	142.6(10)	C(8)-C(7)-P(1)	122.3(7)	Cl(34)-Cl(31)-C(3L)	64.6(9)
C(4B)-C(3B)-Ir(1)	144.8(8)	C(12)-C(7)-P(1)	119.6(8)	Cl(34)-Cl(31)-Cl(35)	127.6(11)
C(2B)-C(3B)-Ir(1)	72.4(6)	C(9)-C(8)-C(7)	121.0(10)	C(3L)-Cl(31)-Cl(35)	64.8(8)
Cl(32)-C(3L)-Cl(31)	117.7(11)	C(8)-C(9)-C(10)	120.4(10)	Cl(36)-Cl(32)-C(3L)	72.2(10)
Cl(32)-C(3L)-Cl(34)	136.8(10)	C(11)-C(10)-C(9)	118.2(10)	Cl(36)-Cl(32)-Cl(35)	129.1(11)
Cl(31)-C(3L)-Cl(34)	51.4(7)	C(12)-C(11)-C(10)	122.0(10)	C(3L)-Cl(32)-Cl(35)	60.2(7)
Cl(32)-C(3L)-Cl(36)	39.7(5)	C(11)-C(12)-C(7)	120.5(10)	Cl(34)-Cl(33)-C(3L)	58.8(7)

Winkel in °					
Cl(31)-C(3L)-Cl(36)	134.8(10)	C(18)-C(13)-C(14)	118.5(8)	Cl(34)-Cl(33)-Cl(36)	109.3(9)
C(6)-C(1)-C(2)	119.0(10)	C(18)-C(13)-P(1)	120.0(7)	C(3L)-Cl(33)-Cl(36)	53.9(6)
C(6)-C(1)-P(1)	120.6(8)	C(14)-C(13)-P(1)	121.6(7)	Cl(31)-Cl(34)-Cl(33)	127.0(10)
C(2)-C(1)-P(1)	120.2(8)	C(15)-C(14)-C(13)	120.8(9)	Cl(31)-Cl(34)-C(3L)	64.0(8)
C(2B)-C(1B)-F(2)	126.5(10)	C(16)-C(15)-C(14)	119.7(9)	Cl(33)-Cl(34)-C(3L)	70.1(8)
C(2B)-C(1B)-F(1)	126.4(10)	C(17)-C(16)-C(15)	120.6(9)	Cl(31)-Cl(35)-C(3L)	55.8(7)
F(2)-C(1B)-F(1)	107.1(8)	C(16)-C(17)-C(18)	119.8(10)	Cl(31)-Cl(35)-Cl(32)	101.1(8)
Cl(11)-C(1L)-Cl(12)	110.8(8)	C(17)-C(18)-C(13)	120.6(9)	C(3L)-Cl(35)-Cl(32)	52.0(6)
Cl(11)-C(1L)-Cl(13)	110.9(9)	C(20)-C(19)-C(24)	118.5(9)	Cl(32)-Cl(36)-C(3L)	68.1(9)
Cl(12)-C(1L)-Cl(13)	110.8(7)	C(20)-C(19)-P(2)	118.5(8)	Cl(32)-Cl(36)-Cl(33)	124.5(10)
O(1)-C(1O)-Ir(1)	172.1(10)	C(24)-C(19)-P(2)	122.9(8)	C(3L)-Cl(36)-Cl(33)	61.2(7)
C(1)-C(2)-C(3)	120.0(12)	C(21)-C(20)-C(19)	120.0(11)	C(1O)-Ir(1)-C(3B)	106.4(4)
C(1B)-C(2B)-C(3B)	137.5(10)	C(22)-C(21)-C(20)	119.9(11)	C(1O)-Ir(1)-C(2B)	147.0(4)
C(1B)-C(2B)-Ir(1)	155.3(9)	C(23)-C(22)-C(21)	120.7(11)	C(3B)-Ir(1)-C(2B)	40.6(4)
C(3B)-C(2B)-Ir(1)	67.0(6)	C(24)-C(23)-C(22)	120.6(12)	C(1O)-Ir(1)-P(2)	90.3(3)
Cl(22)-C(2L)-Cl(21)	110.4(8)	C(23)-C(24)-C(19)	120.0(11)	C(3B)-Ir(1)-P(2)	92.5(3)
Cl(22)-C(2L)-Cl(23)	111.3(8)	C(26)-C(25)-C(30)	118.9(10)	C(2B)-Ir(1)-P(2)	90.9(3)
Cl(21)-C(2L)-Cl(23)	111.7(8)	C(26)-C(25)-P(2)	119.8(8)	C(1O)-Ir(1)-P(1)	91.5(3)
C(4)-C(3)-C(2)	119.6(13)	C(30)-C(25)-P(2)	121.2(8)	C(3B)-Ir(1)-P(1)	89.1(3)
C(4B)-C(3B)-C(2B)	142.6(10)	C(27)-C(26)-C(25)	120.5(11)	C(2B)-Ir(1)-P(1)	88.7(3)
C(4B)-C(3B)-Ir(1)	144.8(8)	C(26)-C(27)-C(28)	119.9(11)	P(2)-Ir(1)-P(1)	177.13(9)
C(2B)-C(3B)-Ir(1)	72.4(6)	C(29)-C(28)-C(27)	120.2(11)	C(1O)-Ir(1)-Cl(1)	100.4(3)
Cl(32)-C(3L)-Cl(31)	117.7(11)	C(28)-C(29)-C(30)	120.3(12)	C(3B)-Ir(1)-Cl(1)	153.1(3)
Cl(32)-C(3L)-Cl(34)	136.8(10)	C(25)-C(30)-C(29)	120.2(11)	C(2B)-Ir(1)-Cl(1)	112.5(3)
Cl(31)-C(3L)-Cl(34)	51.4(7)	C(36)-C(31)-C(32)	117.6(9)	P(2)-Ir(1)-Cl(1)	89.31(8)
Cl(32)-C(3L)-Cl(36)	39.7(5)	C(36)-C(31)-P(2)	124.6(7)	P(1)-Ir(1)-Cl(1)	88.19(8)

Tab. 21e: Anisotrope Temperaturfaktoren für 49 · 3 CHCl₃ in (Å²·10³)Der Exponent des anisotropen Temperaturfaktors nimmt die Form $(-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}])$ an.

	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂		U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂
C(1)	49(6)	17(5)	44(7)	6(4)	3(5)	-1(4)	C(23)	51(7)	39(7)	72(9)	19(6)	-15(6)	-9(5)
C(1B)	38(6)	49(7)	50(7)	17(5)	18(5)	19(5)	C(24)	41(6)	38(7)	50(7)	-2(5)	6(5)	1(5)
C(1L)	57(8)	137(14)	48(8)	-9(8)	9(6)	10(8)	C(25)	47(6)	26(6)	38(6)	4(4)	5(5)	15(5)
C(1O)	63(8)	16(5)	57(7)	3(5)	5(6)	-17(5)	C(26)	63(7)	32(6)	42(6)	-3(5)	9(5)	7(5)
C(2)	34(6)	50(7)	52(7)	0(5)	-10(5)	0(5)	C(27)	73(8)	27(6)	44(7)	-13(5)	-6(6)	11(5)
C(2B)	56(7)	17(5)	36(6)	5(4)	16(5)	-3(4)	C(28)	78(9)	43(8)	52(8)	-11(6)	7(7)	27(7)
C(2L)	85(10)	79(11)	90(11)	-4(9)	36(9)	13(8)	C(29)	75(9)	55(8)	49(8)	8(6)	24(6)	20(7)
C(3)	62(9)	60(9)	78(10)	6(7)	-23(8)	-5(7)	C(30)	52(7)	35(6)	40(6)	-2(5)	15(5)	6(5)
C(3B)	38(6)	20(6)	58(8)	6(5)	19(5)	4(4)	C(31)	45(6)	26(5)	29(5)	-4(4)	6(4)	6(4)
C(3L)	79(10)	76(10)	61(9)	-7(7)	12(7)	-19(8)	C(32)	51(7)	30(6)	48(7)	1(5)	11(5)	-3(5)
C(4)	95(12)	55(9)	54(9)	-11(7)	-29(8)	-8(8)	C(33)	39(6)	52(7)	46(7)	-1(5)	-7(5)	-11(5)
C(4B)	47(6)	46(7)	21(5)	3(5)	4(5)	-2(5)	C(34)	43(6)	47(7)	62(8)	-5(6)	9(6)	1(5)
C(5)	106(12)	44(7)	34(7)	-10(5)	-5(7)	1(7)	C(35)	51(7)	33(6)	54(7)	0(5)	17(5)	-2(5)
C(6)	80(8)	27(6)	37(7)	-3(5)	11(6)	-8(6)	C(36)	44(6)	22(5)	46(6)	1(5)	11(5)	-1(4)
C(7)	30(5)	31(5)	32(6)	1(4)	3(4)	-3(4)	F(1)	41(4)	89(5)	76(5)	14(4)	5(3)	21(4)
C(8)	40(6)	32(6)	37(6)	-1(4)	5(5)	-4(4)	F(2)	57(4)	64(5)	68(5)	9(3)	34(3)	20(3)
C(9)	35(6)	54(7)	44(7)	-1(5)	11(5)	5(5)	F(3)	68(4)	70(5)	38(4)	0(3)	-12(3)	17(4)
C(10)	49(7)	44(7)	66(8)	10(6)	21(6)	-1(6)	F(4)	85(5)	50(4)	39(4)	1(3)	28(3)	-2(3)
C(11)	59(7)	27(6)	92(10)	23(6)	27(7)	3(5)	P(1)	35(1)	22(1)	31(1)	-1(1)	7(1)	1(1)
C(12)	46(6)	32(6)	67(8)	2(5)	15(6)	5(5)	P(2)	36(1)	22(1)	34(1)	0(1)	9(1)	0(1)
C(13)	23(5)	22(5)	31(5)	3(4)	7(4)	14(4)	Cl(1)	42(1)	32(1)	31(1)	-1(1)	7(1)	0(1)
C(14)	48(6)	20(5)	41(6)	1(4)	7(5)	-5(5)	Cl(11)	68(2)	66(2)	123(3)	-11(2)	1(2)	10(2)
C(15)	52(7)	30(6)	40(6)	-4(5)	8(5)	6(5)	Cl(12)	189(5)	104(4)	85(3)	0(3)	-10(3)	52(3)
C(16)	53(7)	28(6)	51(7)	5(5)	19(5)	14(5)	Cl(13)	78(3)	237(6)	77(3)	-10(3)	12(2)	-66(3)
C(17)	38(6)	39(6)	49(7)	6(5)	6(5)	7(5)	Cl(21)	110(3)	66(3)	108(3)	15(2)	34(2)	-1(2)
C(18)	38(6)	35(6)	33(6)	2(4)	10(4)	-1(5)	Cl(22)	93(3)	87(3)	117(3)	-18(2)	42(3)	-16(2)
C(19)	37(6)	33(6)	38(6)	3(5)	4(4)	-11(5)	Cl(23)	100(3)	153(4)	94(3)	38(3)	14(2)	54(3)
C(20)	56(7)	34(6)	43(7)	4(5)	6(5)	-3(5)	Ir(1)	34(1)	21(1)	29(1)	-1(1)	8(1)	0(1)
C(21)	70(8)	54(8)	39(7)	2(6)	9(6)	-13(7)	O(1)	46(5)	50(5)	69(6)	-4(4)	32(4)	1(4)
C(22)	74(8)	53(8)	45(8)	25(7)	-16(6)	-19(7)							

6.1.6. Kristallstruktur von 50·2 CH₂Cl₂Tab. 22a: Kristalldaten und Strukturverfeinerung von 50 · 2 CH₂Cl₂

Summenformel	C ₄₃ H ₃₄ Cl ₅ F ₄ OP ₂ Rh
Molekulargewicht	984.80
Temperatur	173(2) K
Wellenlänge	0.71073 Å
Kristallsystem, Raumgruppe	triklin, P-1
Gitterkonstanten:	
a =	10.47(4) Å
b =	13.78(3) Å
c =	16.20(4) Å
α =	72.91(9) °
β =	73.41(14) °
γ =	74.1(2) °
Zellvolumen	2095(10) Å ³
Z, berechnete Dichte	2, 1.561 g cm ⁻³
Absorptionskoeffizient	0.855 mm ⁻¹
F(000)	992
Kristallgröße	0.2 x 0.1 x 0.06 mm
θ-Bereich für die Datensammlung	1.35 bis 26.43 °
kleinste und größte Indices	=-11<=h<=13 -16<=k<=17 -20<=l<=20
gemessene / unabhängige Reflexe	18835 / 8431 [R(int) = 0.0747]
Vollständigkeit bis θ = 25.05°	97.7 %
Absorptionskorrektur	empirisch
Maximale und minimale Transmission	1.0 und 0.746444
Verfeinerungsmethoden	kleinste Fehlerquadrate
Reflexe / Einschränkungen / Parameter	8431 / 0 / 505
Goodness-of-fit gegen F ²	1.025
endgültiger R-Wert [$I > 2\sigma(I)$]	R ₁ = 0.0609, wR ₂ = 0.1331
R-Wert (alle Reflexe)	R ₁ = 0.1189, wR ₂ = 0.1586
größte und kleinste Restelektronendichte	1.502 und -1.540 e Å ⁻³

Tab. 22b: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für 50 $\cdot 2 \text{CH}_2\text{Cl}_2$ U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U(eq)		x	y	z	U(eq)
C(1)	5426(6)	7801(4)	9412(4)	23(1)	C(22)	2349(7)	8315(6)	5958(5)	42(2)
C(1B)	6710(7)	9560(5)	6791(4)	35(2)	C(23)	3252(6)	8974(5)	5540(4)	36(2)
C(1L)	1109(10)	3506(7)	7561(8)	97(4)	C(24)	4642(6)	8598(5)	5511(4)	33(2)
C(1O)	6535(6)	5711(4)	7941(4)	27(1)	C(25)	7919(6)	7880(4)	5097(4)	24(1)
C(2)	4397(6)	7243(5)	9786(4)	33(2)	C(26)	7735(6)	8122(4)	4245(4)	29(1)
C(2B)	6472(6)	8631(4)	7120(4)	22(1)	C(27)	8597(7)	8646(4)	3553(4)	35(2)
C(2L)	6108(14)	2592(8)	6926(8)	110(4)	C(28)	9655(6)	8922(4)	3705(4)	33(2)
C(3)	3093(6)	7738(5)	10136(5)	38(2)	C(29)	9831(6)	8718(4)	4550(4)	31(2)
C(3B)	5344(5)	8174(4)	7497(4)	19(1)	C(30)	8959(6)	8209(4)	5255(4)	28(1)
C(4)	2800(6)	8786(6)	10101(5)	42(2)	C(31)	7380(6)	5848(4)	5656(4)	24(1)
C(4B)	4036(6)	8339(4)	7740(4)	29(2)	C(32)	8370(6)	5038(4)	5994(4)	32(2)
C(5)	3815(7)	9345(5)	9716(5)	38(2)	C(33)	8821(7)	4150(4)	5656(5)	39(2)
C(6)	5131(6)	8858(4)	9370(4)	30(2)	C(34)	8284(7)	4060(5)	5009(5)	39(2)
C(7)	8269(5)	7913(4)	8892(4)	21(1)	C(35)	7299(8)	4859(5)	4684(5)	42(2)
C(8)	9163(6)	8302(4)	8114(4)	25(1)	C(36)	6848(7)	5752(4)	5008(4)	35(2)
C(9)	10090(6)	8822(4)	8162(4)	29(2)	O(1)	6109(5)	4978(3)	8254(3)	48(1)
C(10)	10117(6)	8982(4)	8952(5)	32(2)	F(1)	5736(4)	10446(3)	6722(3)	54(1)
C(11)	9229(6)	8604(5)	9719(4)	31(2)	F(2)	7912(4)	9826(3)	6462(3)	48(1)
C(12)	8311(6)	8073(4)	9682(4)	29(2)	F(3)	3197(3)	9286(3)	7668(3)	40(1)
C(13)	7533(6)	5938(4)	9667(4)	26(1)	F(4)	3283(3)	7627(3)	8113(2)	39(1)
C(14)	7034(6)	5852(5)	10562(4)	33(2)	P(1)	7095(2)	7160(1)	8864(1)	21(1)
C(15)	7473(7)	4947(5)	11151(5)	44(2)	P(2)	6895(1)	7073(1)	6008(1)	22(1)
C(16)	8396(7)	4129(5)	10862(5)	43(2)	Cl(1)	9552(1)	6331(1)	7135(1)	28(1)
C(17)	8894(7)	4212(4)	9975(5)	39(2)	Cl(1L)	-456(2)	3134(2)	7935(2)	69(1)
C(18)	8476(6)	5114(4)	9368(5)	31(2)	Cl(2L)	2449(3)	2519(3)	7850(2)	92(1)
C(19)	5128(5)	7562(4)	5898(4)	24(1)	Cl(3L)	6268(5)	1889(3)	7942(3)	156(2)
C(20)	4207(6)	6910(5)	6310(4)	31(2)	Cl(4L)	5204(3)	3853(2)	6862(2)	104(1)
C(21)	2826(7)	7288(6)	6340(5)	41(2)	Rh(1)	7047(1)	7027(1)	7453(1)	19(1)

Tab. 22c: Bindungslängen und -winkel in 50 · 2 CH₂Cl₂

Abstand in Å				Winkel in °			
C(1)-C(2)	1.388(9)	C(13)-C(18)	1.391(9)	C(2)-C(1)-C(6)	119.6(6)	C(22)-C(23)-C(24)	119.7(6)
C(1)-C(6)	1.390(9)	C(13)-P(1)	1.836(7)	C(2)-C(1)-P(1)	119.0(5)	C(19)-C(24)-C(23)	120.5(6)
C(1)-P(1)	1.831(8)	C(14)-C(15)	1.384(8)	C(6)-C(1)-P(1)	121.1(5)	C(26)-C(25)-C(30)	119.1(6)
C(1B)-C(2B)	1.298(9)	C(15)-C(16)	1.371(11)	C(2B)-C(1B)-F(2)	127.4(6)	C(26)-C(25)-P(2)	121.1(5)
C(1B)-F(2)	1.326(9)	C(16)-C(17)	1.363(11)	C(2B)-C(1B)-F(1)	124.9(7)	C(30)-C(25)-P(2)	119.7(5)
C(1B)-F(1)	1.358(8)	C(17)-C(18)	1.391(8)	F(2)-C(1B)-F(1)	107.7(6)	C(27)-C(26)-C(25)	120.5(6)
C(1L)-Cl(2L)	1.730(12)	C(19)-C(20)	1.392(9)	Cl(2L)-C(1L)-Cl(1L)	113.3(6)	C(28)-C(27)-C(26)	120.2(6)
C(1L)-Cl(1L)	1.740(12)	C(19)-C(24)	1.396(8)	O(1)-C(1O)-Rh(1)	173.6(5)	C(27)-C(28)-C(29)	120.3(6)
C(1O)-O(1)	1.137(8)	C(19)-P(2)	1.829(9)	C(3)-C(2)-C(1)	119.8(6)	C(28)-C(29)-C(30)	120.2(6)
C(1O)-Rh(1)	1.911(8)	C(20)-C(21)	1.388(10)	C(1B)-C(2B)-C(3B)	137.5(6)	C(29)-C(30)-C(25)	119.7(6)
C(2)-C(3)	1.388(10)	C(21)-C(22)	1.383(10)	C(1B)-C(2B)-Rh(1)	153.7(5)	C(36)-C(31)-C(32)	119.6(5)
C(2B)-C(3B)	1.390(9)	C(22)-C(23)	1.386(10)	C(3B)-C(2B)-Rh(1)	68.7(4)	C(36)-C(31)-P(2)	120.0(4)
C(2B)-Rh(1)	2.072(7)	C(23)-C(24)	1.398(10)	Cl(3L)-C(2L)-Cl(4L)	115.9(7)	C(32)-C(31)-P(2)	120.3(5)
C(2L)-Cl(3L)	1.675(12)	C(25)-C(26)	1.378(9)	C(4)-C(3)-C(2)	120.6(7)	C(33)-C(32)-C(31)	119.5(6)
C(2L)-Cl(4L)	1.726(12)	C(25)-C(30)	1.398(9)	C(4B)-C(3B)-C(2B)	145.4(5)	C(34)-C(33)-C(32)	120.6(6)
C(3)-C(4)	1.380(10)	C(25)-P(2)	1.829(7)	C(4B)-C(3B)-Rh(1)	142.9(5)	C(33)-C(34)-C(35)	119.6(6)
C(3B)-C(4B)	1.287(9)	C(26)-C(27)	1.376(9)	C(2B)-C(3B)-Rh(1)	71.7(4)	C(34)-C(35)-C(36)	120.4(7)
C(3B)-Rh(1)	2.034(8)	C(27)-C(28)	1.369(10)	C(5)-C(4)-C(3)	119.6(6)	C(31)-C(36)-C(35)	120.3(6)
C(4)-C(5)	1.378(11)	C(28)-C(29)	1.369(9)	C(3B)-C(4B)-F(4)	126.6(5)	C(7)-P(1)-C(1)	104.2(4)
C(4B)-F(4)	1.324(8)	C(29)-C(30)	1.383(9)	C(3B)-C(4B)-F(3)	125.1(6)	C(7)-P(1)-C(13)	102.5(3)
C(4B)-F(3)	1.353(7)	C(31)-C(36)	1.373(9)	F(4)-C(4B)-F(3)	108.3(5)	C(1)-P(1)-C(13)	104.7(3)
C(5)-C(6)	1.392(9)	C(31)-C(32)	1.397(8)	C(4)-C(5)-C(6)	120.5(6)	C(7)-P(1)-Rh(1)	116.6(2)
C(7)-C(12)	1.375(9)	C(31)-P(2)	1.834(7)	C(1)-C(6)-C(5)	119.9(7)	C(1)-P(1)-Rh(1)	110.9(3)
C(7)-C(8)	1.398(9)	C(32)-C(33)	1.396(9)	C(12)-C(7)-C(8)	119.3(6)	C(13)-P(1)-Rh(1)	116.6(3)
C(7)-P(1)	1.829(8)	C(33)-C(34)	1.371(10)	C(12)-C(7)-P(1)	120.3(5)	C(25)-P(2)-C(19)	106.7(3)
C(8)-C(9)	1.386(9)	C(34)-C(35)	1.380(10)	C(8)-C(7)-P(1)	120.3(5)	C(25)-P(2)-C(31)	101.6(3)
C(9)-C(10)	1.370(9)	C(35)-C(36)	1.391(9)	C(9)-C(8)-C(7)	119.0(6)	C(19)-P(2)-C(31)	103.4(3)
C(10)-C(11)	1.379(10)	P(1)-Rh(1)	2.361(5)	C(10)-C(9)-C(8)	121.0(6)	C(25)-P(2)-Rh(1)	115.7(3)
C(11)-C(12)	1.381(9)	P(2)-Rh(1)	2.373(6)	C(9)-C(10)-C(11)	119.9(6)	C(19)-P(2)-Rh(1)	109.8(2)
C(13)-C(14)	1.375(9)	Cl(1)-Rh(1)	2.491(10)	C(10)-C(11)-C(12)	119.6(7)	C(31)-P(2)-Rh(1)	118.4(2)
				C(7)-C(12)-C(11)	121.0(6)	C(1O)-Rh(1)-C(3B)	109.3(3)
				C(14)-C(13)-C(18)	119.4(5)	C(1O)-Rh(1)-C(2B)	148.9(3)
				C(14)-C(13)-P(1)	121.1(5)	C(3B)-Rh(1)-C(2B)	39.6(3)
				C(18)-C(13)-P(1)	119.3(5)	C(1O)-Rh(1)-P(1)	91.5(2)
				C(13)-C(14)-C(15)	119.5(6)	C(3B)-Rh(1)-P(1)	87.6(2)
				C(16)-C(15)-C(14)	121.4(7)	C(2B)-Rh(1)-P(1)	87.7(2)
				C(17)-C(16)-C(15)	119.2(6)	C(1O)-Rh(1)-P(2)	92.8(2)
				C(16)-C(17)-C(18)	120.6(6)	C(3B)-Rh(1)-P(2)	87.4(2)
				C(13)-C(18)-C(17)	119.8(7)	C(2B)-Rh(1)-P(2)	86.6(2)
				C(20)-C(19)-C(24)	119.0(6)	P(1)-Rh(1)-P(2)	174.2(1)
				C(20)-C(19)-P(2)	118.5(5)	C(1O)-Rh(1)-Cl(1)	96.2(3)
				C(24)-C(19)-P(2)	122.1(5)	C(3B)-Rh(1)-Cl(1)	154.5(2)
				C(21)-C(20)-C(19)	120.4(6)	C(2B)-Rh(1)-Cl(1)	114.9(3)
				C(22)-C(21)-C(20)	120.4(7)	P(1)-Rh(1)-Cl(1)	90.7(2)
				C(21)-C(22)-C(23)	120.0(6)	P(2)-Rh(1)-Cl(1)	92.6(2)

Tab. 22d: Anisotrope Temperaturfaktoren für $50 \cdot 2 \text{ CH}_2\text{Cl}_2$ in ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$)Der Exponent des anisotropen Temperaturfaktors nimmt die Form $(-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}])$ an.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}		U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
C(1)	18(3)	30(3)	20(3)	-7(2)	-6(2)	1(2)	C(22)	22(3)	61(4)	44(5)	-21(4)	-15(3)	7(3)
C(1B)	35(4)	29(3)	39(4)	-3(3)	-17(3)	-2(3)	C(23)	22(3)	40(4)	41(4)	-11(3)	-14(3)	7(3)
C(1L)	86(8)	54(5)	121(10)	-27(6)	34(7)	-17(5)	C(24)	25(3)	31(3)	40(4)	-8(3)	-12(3)	1(3)
C(1O)	26(3)	27(3)	26(4)	-10(3)	-9(3)	4(3)	C(25)	22(3)	20(3)	26(4)	-5(2)	-5(3)	2(2)
C(2)	23(3)	38(3)	35(4)	-11(3)	-4(3)	-2(3)	C(26)	27(3)	28(3)	31(4)	-9(3)	-7(3)	-2(2)
C(2B)	23(3)	20(3)	24(3)	-8(2)	-7(3)	1(2)	C(27)	46(4)	27(3)	25(4)	-2(3)	-8(3)	-1(3)
C(2L)	141(12)	68(7)	106(10)	-24(6)	13(8)	-34(7)	C(28)	24(3)	25(3)	38(4)	3(3)	-2(3)	0(2)
C(3)	19(3)	58(4)	36(4)	-18(3)	-2(3)	-6(3)	C(29)	22(3)	32(3)	36(4)	-1(3)	-9(3)	-7(3)
C(3B)	16(3)	21(3)	21(3)	-8(2)	-5(2)	1(2)	C(30)	23(3)	25(3)	33(4)	-2(3)	-10(3)	-3(2)
C(4)	13(3)	65(5)	47(5)	-32(4)	-7(3)	12(3)	C(31)	22(3)	21(3)	30(4)	-10(2)	-5(3)	-2(2)
C(4B)	23(3)	25(3)	37(4)	-10(3)	-14(3)	6(2)	C(32)	24(3)	28(3)	43(4)	-14(3)	-9(3)	3(2)
C(5)	27(4)	41(4)	51(5)	-30(3)	-16(3)	13(3)	C(33)	31(4)	25(3)	56(5)	-14(3)	-11(3)	7(3)
C(6)	19(3)	32(3)	42(4)	-17(3)	-11(3)	4(2)	C(34)	41(4)	30(3)	45(5)	-21(3)	-4(3)	0(3)
C(7)	11(3)	16(2)	29(4)	-2(2)	-2(2)	5(2)	C(35)	55(5)	36(4)	45(5)	-24(3)	-20(4)	-2(3)
C(8)	21(3)	27(3)	31(4)	-9(3)	-17(3)	4(2)	C(36)	42(4)	25(3)	33(4)	-7(3)	-12(3)	4(3)
C(9)	23(3)	27(3)	39(4)	-6(3)	-16(3)	0(2)	O(1)	61(3)	35(3)	51(3)	2(2)	-15(3)	-25(2)
C(10)	22(3)	25(3)	52(5)	-14(3)	-14(3)	2(2)	F(1)	65(3)	20(2)	70(3)	-5(2)	-21(2)	4(2)
C(11)	24(3)	37(3)	38(4)	-16(3)	-17(3)	4(3)	F(2)	54(3)	40(2)	51(3)	2(2)	-10(2)	-26(2)
C(12)	19(3)	32(3)	36(4)	-10(3)	-10(3)	2(2)	F(3)	22(2)	38(2)	54(3)	-17(2)	-10(2)	12(2)
C(13)	16(3)	22(3)	38(4)	-5(3)	-9(3)	0(2)	F(4)	22(2)	48(2)	44(2)	-8(2)	-4(2)	-11(2)
C(14)	31(3)	30(3)	32(4)	-5(3)	-4(3)	-1(3)	P(1)	18(1)	18(1)	26(1)	-5(1)	-7(1)	1(1)
C(15)	45(4)	40(4)	37(4)	9(3)	-15(3)	-8(3)	P(2)	17(1)	18(1)	29(1)	-7(1)	-7(1)	2(1)
C(16)	39(4)	33(3)	54(5)	9(3)	-22(4)	-8(3)	Cl(1)	14(1)	28(1)	39(1)	-11(1)	-5(1)	2(1)
C(17)	31(4)	19(3)	63(5)	-2(3)	-22(4)	5(3)	Cl(1L)	61(1)	74(1)	59(2)	-20(1)	2(1)	-4(1)
C(18)	28(3)	26(3)	38(4)	-6(3)	-14(3)	1(3)	Cl(2L)	67(2)	156(3)	72(2)	-41(2)	-17(1)	-36(2)
C(19)	16(3)	26(3)	28(4)	-7(2)	-9(2)	3(2)	Cl(3L)	211(5)	162(4)	107(3)	-14(3)	-97(3)	-12(3)
C(20)	26(3)	35(3)	36(4)	-11(3)	-8(3)	-9(3)	Cl(4L)	105(2)	67(2)	130(3)	-24(2)	1(2)	-31(2)
C(21)	25(4)	60(4)	48(5)	-17(4)	-10(3)	-18(3)	Rh(1)	12(1)	18(1)	26(1)	-6(1)	-6(1)	2(1)

6.1.7. Kristallstruktur von 51

Tab. 23a: Kristalldaten und Strukturverfeinerung von 51

Summenformel	C ₁₃ H ₂ F ₉ Fe ₁ O ₇
Molekulargewicht	496
Temperatur	173(2) K
Wellenlänge	0.71073 Å
Kristallsystem, Raumgruppe	monoklin, P2(1)/n
Gitterkonstanten:	
a	6.907(3) Å
b	13.446(8) Å
c	15.882(8) Å
α	90°
β	90.959(16)°
γ	90°
Zellvolumen	1474.7(12) Å ³
Z	4
berechnete Dichte	1.982 Mg/m ³
Absorptionskoeffizient	1.133 mm ⁻¹
F(000)	864
Kristallgröße	0.34 x 0.16 x 0.1 mm ³
θ-Bereich für die Datensammlung	1.98 bis 30.56°
kleinste und größte Indices	=-9<=h<=5 -19<=k<=19 -22<=l<=13
gemessene Reflexe	11736
unabhängige Reflexe	4220 [R(int) = 0.0447]
Vollständigkeit bis θ = 30.56°	93.3 %
Absorptionskorrektur	keine
Verfeinerungsmethoden	kleinste Fehlerquadrate
Reflexe / Einschränkungen / Parameter	4220 / 0 / 252
Goodness-of-fit gegen F ²	1.021
endgültiger R-Wert [I>2σ (I)]	R ₁ = 0.0457, wR ₂ = 0.1030
R-Wert (alle Reflexe)	R ₁ = 0.0831, wR ₂ = 0.1199
größte und kleinste Restelektronendichte	0.814 und -0.556 e.Å ⁻³

Tab. 23b: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für 51 U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U(eq)		x	y	z	U(eq)
C(1)	10123(4)	6792(2)	1745(2)	25(1)	O(2)	11367(4)	4437(2)	810(2)	42(1)
C(2)	7083(4)	5541(2)	1225(2)	26(1)	O(5)	12722(3)	4885(2)	2575(1)	33(1)
C(4X)	5777(4)	6924(2)	2571(2)	26(1)	O(3)	5931(4)	5415(2)	735(2)	42(1)
C(1Y)	9478(4)	6946(2)	4792(2)	26(1)	O(1Y)	14364(3)	4970(2)	4002(1)	27(1)
C(3)	10534(4)	4859(2)	1297(2)	28(1)	O(4)	10761(3)	7546(2)	1618(2)	39(1)
C(1X)	7634(4)	7333(2)	4340(2)	26(1)	O(2Y)	12754(3)	5699(2)	5043(1)	30(1)
C(4)	8091(4)	4546(2)	2610(2)	23(1)	F(4X)	4855(3)	6878(2)	1840(1)	40(1)
C(5)	11285(4)	5431(2)	2875(2)	20(1)	F(3X)	4758(3)	7522(1)	3064(1)	35(1)
C(3Y)	11352(4)	5747(2)	3701(2)	20(1)	F(2X)	7636(3)	8332(1)	4196(1)	42(1)
C(2Y)	9817(4)	6360(2)	4009(2)	20(1)	F(1X)	5947(3)	7152(1)	4738(1)	40(1)
C(2X)	8182(4)	6685(2)	3620(2)	20(1)	F(1Y)	9142(3)	6443(1)	5511(1)	34(1)
C(3X)	7419(4)	6483(2)	2788(2)	20(1)	F(2Y)	10808(3)	7651(1)	4991(1)	37(1)
C(4Y)	12935(4)	5447(2)	4253(2)	23(1)	Fe(1)	9069(1)	5593(1)	2031(1)	19(1)
O(1)	7507(3)	3923(1)	3004(1)	35(1)					

Tab. 23c: Bindungslängen und -winkel in 51

Abstand in \AA		Winkel in $^\circ$			
C(1)-O(4)	1.125(3)	O(4)-C(1)-Fe(1)	175.9(3)	C(2Y)-C(2X)-C(3X)	130.4(2)
C(1)-Fe(1)	1.830(3)	O(3)-C(2)-Fe(1)	173.3(2)	C(2Y)-C(2X)-C(1X)	93.4(2)
C(2)-O(3)	1.116(3)	F(4X)-C(4X)-C(3X)	127.6(3)	C(3X)-C(2X)-C(1X)	136.1(2)
C(2)-Fe(1)	1.862(3)	F(4X)-C(4X)-F(3X)	107.1(2)	C(4X)-C(3X)-C(2X)	117.0(3)
C(4X)-F(4X)	1.317(3)	C(3X)-C(4X)-F(3X)	125.3(3)	C(4X)-C(3X)-Fe(1)	126.3(2)
C(4X)-C(3X)	1.320(4)	F(1Y)-C(1Y)-F(2Y)	106.2(2)	C(2X)-C(3X)-Fe(1)	116.65(18)
C(4X)-F(3X)	1.331(3)	F(1Y)-C(1Y)-C(2Y)	118.1(2)	O(1Y)-C(4Y)-O(2Y)	121.9(3)
C(1Y)-F(1Y)	1.350(3)	F(2Y)-C(1Y)-C(2Y)	116.6(3)	O(1Y)-C(4Y)-C(3Y)	122.8(3)
C(1Y)-F(2Y)	1.354(3)	F(1Y)-C(1Y)-C(1X)	114.2(3)	O(2Y)-C(4Y)-C(3Y)	115.2(3)
C(1Y)-C(2Y)	1.494(4)	F(2Y)-C(1Y)-C(1X)	115.2(2)	C(4)-Fe(1)-C(1)	163.97(12)
C(1Y)-C(1X)	1.541(4)	C(2Y)-C(1Y)-C(1X)	86.0(2)	C(4)-Fe(1)-C(3)	96.78(13)
C(3)-O(2)	1.126(4)	O(2)-C(3)-Fe(1)	175.8(3)	C(1)-Fe(1)-C(3)	95.12(13)
C(3)-Fe(1)	1.843(3)	F(1X)-C(1X)-F(2X)	105.0(2)	C(4)-Fe(1)-C(2)	92.48(12)
C(1X)-F(1X)	1.357(4)	F(1X)-C(1X)-C(2X)	118.9(2)	C(1)-Fe(1)-C(2)	98.82(12)
C(1X)-F(2X)	1.364(3)	F(2X)-C(1X)-C(2X)	116.5(2)	C(3)-Fe(1)-C(2)	87.17(13)
C(1X)-C(2X)	1.491(4)	F(1X)-C(1X)-C(1Y)	115.6(2)	C(4)-Fe(1)-C(5)	82.28(11)
C(4)-O(1)	1.124(3)	F(2X)-C(1X)-C(1Y)	114.0(2)	C(1)-Fe(1)-C(5)	87.70(11)
C(4)-Fe(1)	1.817(3)	C(2X)-C(1X)-C(1Y)	86.7(2)	C(3)-Fe(1)-C(5)	86.80(12)
C(5)-O(5)	1.330(3)	O(1)-C(4)-Fe(1)	176.6(2)	C(2)-Fe(1)-C(5)	171.49(10)
C(5)-C(3Y)	1.379(4)	O(5)-C(5)-C(3Y)	119.8(2)	C(4)-Fe(1)-C(3X)	86.61(12)
C(5)-Fe(1)	2.029(3)	O(5)-C(5)-Fe(1)	112.47(19)	C(1)-Fe(1)-C(3X)	81.91(12)
C(3Y)-C(2Y)	1.435(4)	C(3Y)-C(5)-Fe(1)	127.5(2)	C(3)-Fe(1)-C(3X)	176.14(11)
C(3Y)-C(4Y)	1.447(4)	C(5)-C(3Y)-C(2Y)	119.2(2)	C(2)-Fe(1)-C(3X)	90.86(12)
C(2Y)-C(2X)	1.351(4)	C(5)-C(3Y)-C(4Y)	120.2(2)	C(5)-Fe(1)-C(3X)	95.50(11)
C(2X)-C(3X)	1.441(4)	C(2Y)-C(3Y)-C(4Y)	120.5(2)		
C(3X)-Fe(1)	2.054(3)	C(2X)-C(2Y)-C(3Y)	130.3(2)		
C(4Y)-O(1Y)	1.248(3)	C(2X)-C(2Y)-C(1Y)	93.9(2)		
C(4Y)-O(2Y)	1.306(4)	C(3Y)-C(2Y)-C(1Y)	135.5(2)		

Tab. 23d: Anisotrope Temperaturfaktoren für 51

Der Exponent des anisotropen Temperaturfaktors nimmt die Form $(-2 p^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}])$ an.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}		U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
C(1)	23(1)	27(1)	24(1)	4(1)	4(1)	3(1)	O(2)	46(2)	48(1)	31(1)	-13(1)	7(1)	5(1)
C(2)	34(2)	22(1)	24(2)	-2(1)	-3(1)	0(1)	O(5)	30(1)	43(1)	26(1)	-6(1)	-3(1)	17(1)
C(4X)	29(2)	26(1)	24(2)	1(1)	0(1)	3(1)	O(3)	50(2)	36(1)	39(1)	-6(1)	-20(1)	5(1)
C(1Y)	33(2)	22(1)	24(1)	-3(1)	-1(1)	1(1)	O(1Y)	24(1)	36(1)	23(1)	-2(1)	-1(1)	10(1)
C(3)	31(2)	29(1)	22(2)	-2(1)	-1(1)	-1(1)	O(4)	34(1)	27(1)	56(2)	12(1)	12(1)	-2(1)
C(1X)	31(2)	19(1)	28(2)	-3(1)	5(1)	3(1)	O(2Y)	28(1)	40(1)	22(1)	-3(1)	-6(1)	11(1)
C(4)	25(1)	20(1)	25(1)	-6(1)	2(1)	1(1)	F(4X)	33(1)	53(1)	33(1)	-2(1)	-10(1)	17(1)
C(5)	22(1)	19(1)	21(1)	1(1)	1(1)	2(1)	F(3X)	31(1)	38(1)	37(1)	-4(1)	2(1)	15(1)
C(3Y)	18(1)	19(1)	22(1)	1(1)	1(1)	1(1)	F(2X)	55(1)	18(1)	51(1)	-7(1)	-9(1)	10(1)
C(2Y)	25(1)	16(1)	20(1)	0(1)	1(1)	-1(1)	F(1X)	33(1)	54(1)	32(1)	-6(1)	9(1)	9(1)
C(2X)	25(1)	14(1)	20(1)	-1(1)	2(1)	-1(1)	F(1Y)	42(1)	39(1)	21(1)	0(1)	3(1)	7(1)
C(3X)	21(1)	18(1)	21(1)	2(1)	3(1)	-1(1)	F(2Y)	42(1)	27(1)	41(1)	-13(1)	-9(1)	-5(1)
C(4Y)	26(1)	22(1)	22(1)	-1(1)	-4(1)	-2(1)	Fe(1)	22(1)	17(1)	17(1)	1(1)	0(1)	0(1)
O(1)	44(1)	23(1)	40(1)	2(1)	12(1)	-5(1)							

6.1.8. veröffentlichte Strukturen

Tab. 24: CCDC-Nummern der veröffentlichten Kristallstrukturen

Substanz	CCDC-Nummer
35	CCDC-231985 [71]
38	CCDC-231984 [71]
43	CCDC-231983 [71]
49 · CH ₂ Cl ₂	CCDC-637685 [102]
49 · 3 CHCl ₃	CCDC-637686 [102]
50 · 2 CH ₂ Cl ₂	CCDC-637687 [102]

Die kristallographischen Daten (ohne Strukturaktoren) der in Tabelle 24 genannten Strukturen wurden als „supplementary publication nos.“ beim Cambridge Crystallographic Data Centre hinterlegt. Kopien der Daten können kostenlos bei folgender Adresse in Großbritannien angefordert werden: CCDC, 12 Union Road, Cambridge CB21EZ (Fax:(+44)1223-336-033; E-mail: deposit@ccdc.cam.ac.uk).

6.2. Physikalische Grundlagen

6.2.1. Berechnung der Kraftkonstante

Die Infrarotbande einer Schwingung liegt bei der Frequenz, mit der die Atome tatsächlich schwingen. Diese Frequenz f lässt sich aus der Wellenzahl $\tilde{\nu}$ und der Lichtgeschwindigkeit c berechnen:

$$f = c \cdot \tilde{\nu}. \quad (\text{Gl. 12})$$

Wenn man nun die Schwingung als harmonischen Oszillator beschreibt, gilt die Formel:

$$f = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}. \quad (\text{Gl. 13})$$

mit der Kraftkonstante k der Schwingung und der reduzierten Masse μ der schwingenden Atome. Die reduzierte Masse ist definiert als:

$$\mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}. \quad (\text{Gl. 14})$$

mit den Atommassen m_1 und m_2 .

Einsetzen von Gleichung 14 in 13 und Umstellen nach k ergibt:

$$\begin{aligned} c \cdot \tilde{\nu} \cdot 2\pi &= \sqrt{\frac{k}{\mu}} \\ \Leftrightarrow c^2 \cdot \tilde{\nu}^2 \cdot 4\pi^2 &= \frac{k}{\mu} \\ \Leftrightarrow c^2 \cdot \tilde{\nu}^2 \cdot 4\pi^2 \cdot \mu &= k \\ \Leftrightarrow c^2 \cdot \tilde{\nu}^2 \cdot 4\pi^2 \cdot \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2} &= k \end{aligned} \quad (\text{Gl. 15})$$

mit m_1 als Masse von Sauerstoff-16 und m_2 der Masse von Kohlenstoff-12 erhält man also für eine schwingende Carbonyleinheit:

$$k = \tilde{\nu}^2 \cdot 4.0458 \cdot 10^{-8} \text{ kg m}^2 \text{ s}^{-2} \text{ in SI-Einheiten (N/m für die Kraftkonstante).}$$

Will man die Wellenzahl in cm^{-1} einsetzen, so ergibt sich stattdessen:

$$k = \tilde{\nu}^2 \cdot 4.0458 \cdot 10^{-6} \text{ kg m s}^{-2} \text{ cm (mit k in N/cm, der weiter verbreiteten Einheit).}$$

6.2.2. NMR-Spektroskopie – chemische Verschiebung

Die chemische Verschiebung eines NMR-Signals geht auf die Abschirmung des Kernes, zu dem das Signal gehört, gegenüber dem äußeren Magnetfeld zurück. Diese Abschirmung wird mit der Größe σ_i für den Kern i quantitativ beschrieben. Diese Konstante setzt sich aus mehreren Einflüssen auf den Kern zusammen:

$$\sigma_i = \sigma_{dia} + \sigma_{para} + \sum_{i \neq j} \sigma_j. \quad (\text{Gl. 16})$$

Der diamagnetische Anteil beschreibt die Abschirmung durch die Elektronen des betrachteten Atoms in sphärischer Symmetrie. In Wasserstoffatomen, also in der ^1H NMR-Spektroskopie ist dieser Term dominierend. Der zweite Anteil ist der paramagnetische Abschirmungsterm, der alle Abweichungen von der sphärischen Ladungsverteilung, angeregte Zustände, Bahnmomente und Bindungen sowie die Elektronendichte beschreibt. Dieser Term dominiert bei allen Kernen außer ^1H . Die dritte Komponente beschreibt den Einfluss aller anderen Atome in der Probe, wie Anisotropie durch Bindungen, Ringströme, das elektrische Feld polarer Gruppen im Molekül und das Lösungsmittel. Ihr Einfluss auf die chemische Verschiebung liegt bei ^{13}C -Kernen um 10%, bei Protonen deutlich höher. [103]