5. Kristallographischer Anhang

5.1 2,6-Diformylpyridin-4-phenylsemicarbazon-4-phenylthio-semicarbazon (H_2L3^b)

Tabelle 5.1: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von **H_2L3^b**

Summenformel	$C_{21}H_{19}N_7OS$	
M (g/mol)	417.49	
Temperatur	293(2) K	
Wellenlänge	0.71069 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Monoklin, $P2_1/n$	
Elementarzelle	a = 11.568(5) Å	α= 90°
	b = 7.569(5) Å	β= 90.900(5)°
	c = 23.446(5) Å	γ = 90°
Volumen	2052.6(2) $Å^3$	
Berechnete Dichte	1.351 g/cm^3	
Linearer Absorptionskoeffizient	0.186 mm^{-1}	
F(000)	872	
Kristallgröße	0.50 x 0.25 x 0.1 mm^3	
Theta-Bereich	3.12 - 25.0°	
Indizes	$-13\leq h\leq 13$, $-0\leq k\leq 9$, $-1\leq l\leq 27$	
Zahl der gemessenen Reflexe	3838	
Zahl der unabhängigen Reflexe	12194 [R(int) = 0.0799]	
Absorptionskorrektur	keine	
Zahl der verfeinerten Parameter	271	
Goof	0.978	
R_1 / wR_2 [$I>2\sigma(I)$]	R_1 = 0.0662, wR_2 = 0.1192	
R_1 / wR_2 (alle Reflexe)	R_1 = 0.2518, wR_2 = 0.1825	
Restelektronendichte	0.209 und -0.176 e · $Å^{-3}$	
Diffraktometer	CAD4, Enraf Nonius	
Programm der Strukturlösung	SIR 97[98]	

Tabelle 5.2: Atomkoordinaten(x10^4) und isotrope Temperaturparameter(Å^{2}x10^3) von **H_2L3^b**

	x	y	z	E(eq)
S	5344(1)	2778(3)	9395(1)	107(1)
O	697(3)	784(5)	8974(2)	80(1)
N(1)	199(4)	3429(5)	10522(2)	61(1)
N(2)	2451(4)	3309(6)	10198(2)	61(1)
N(3)	3572(4)	3426(6)	10029(2)	72(1)
N(4)	-1604(4)	1817(7)	9837(3)	76(2)
N(5)	-520(4)	1661(6)	9645(2)	69(1)
N(6)	3228(4)	1459(6)	9311(2)	71(1)
N(7)	-1256(4)	266(6)	8851(2)	71(1)
C(28)	-301(6)	873(8)	9134(3)	68(2)
C(7)	2182(5)	4146(7)	10648(2)	62(2)
C(17)	3988(5)	2539(9)	9574(3)	68(2)
C(6)	1001(6)	4204(8)	10850(3)	62(2)
C(2)	-892(6)	3486(8)	10686(3)	66(2)
C(5)	741(6)	5050(8)	11351(3)	80(2)
C(21)	-1300(6)	-600(8)	8325(3)	71(2)
C(16)	2956(5)	397(9)	8355(3)	82(2)
C(11)	3513(5)	273(9)	8859(3)	64(2)
C(9)	-1751(5)	2640(9)	10308(3)	81(2)
C(3)	-1220(6)	4311(9)	11183(3)	88(2)
C(22)	-380(6)	-735(8)	7978(3)	87(2)
C(4)	-389(8)	5096(8)	11517(3)	92(2)
C(23)	-497(8)	-1582(10)	7445(3)	104(2)
C(12)	4277(5)	-1074(10)	8962(3)	82(2)
C(26)	-2349(6)	-1316(8)	8160(3)	89(2)
C(14)	3907(7)	-2120(11)	8017(3)	101(2)
C(13)	4484(6)	-2285(10)	8524(4)	100(2)
C(15)	3136(6)	-798(11)	7927(3)	101(2)
C(25)	-2458(8)	-2187(10)	7647(4)	110(3)
C(24)	-1542(9)	-2278(10)	7287(4)	114(3)

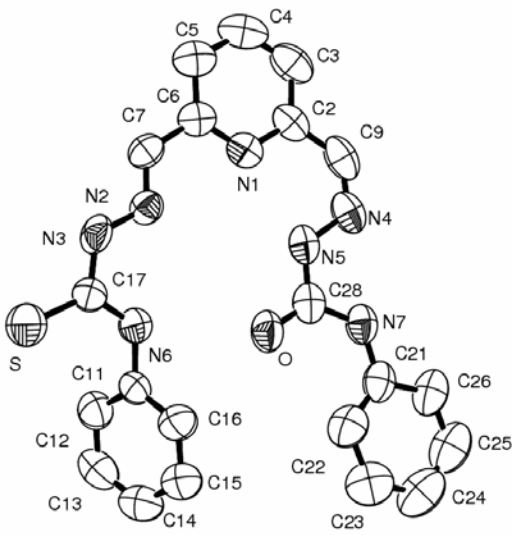

*Abb. 5.1: Ellipsoiddarstellung von **H_2L3^b**. Die Schwingunsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit.*

5.2 2,6-Diformylpyridin-bis-4-phenylsemicarbazon-2,6-diformyl-pyridin-4-phenylsemicarbazon-4-phenylsemicarbazonato-samarium(III)nitrat Methanol/Wasser-Solvat $[Sm(H_2L2^b)(HL2^b)](NO_3)_2 \cdot 2H_2O \cdot MeOH$

Tabelle 5.3: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von $[Sm(H_2L2^b)(HL2^b)](NO_3)_2 \cdot 2H_2O \cdot MeOH$

Summenformel	$C_{43}H_{42}N_{16}O_{13}Sm$	
M (g/mol)	1141.28	
Temperatur	153(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Monoklin, C2/c	
Elementarzelle	a = 22.305(5) Å	α= 90°
	b = 13.016(3) Å	β= 99.471(4)°
	c = 17.779(4) Å	γ = 90°
Volumen	5091.0(2) $Å^3$	
Berechnete Dichte	1.489 g/cm^3	
Linearer Absorptionskoeffizient	1.230 mm^{-1}	
F(000)	2312	
Kristallgröße	0.35 x 0.18 x 0.08 mm^3	
Theta-Bereich	1.82 - 30.54°	
Indizes	$-31 \le h \le 31$, $-18 \le k \le 18$, $-25 \le l \le 25$	
Zahl der gemessenen Reflexe	31250	
Zahl der unabhängigen Reflexe	7792 [R(int) = 0.0435]	
Absorptionskorrektur	semiempirisch (SADABS)	
Zahl der verfeinerten Parameter	319	
Goof	1.109	
R_1 / wR_2 [$I>2\sigma(I)$]	R_1 = 0.0450, wR_2 = 0.1273	
R_1 / wR_2 (alle Reflexe)	R_1 = 0.0540, wR_2 = 0.1351	
Restelektronendichte	2.909 und -1.472 $e.Å^{-3}$	
Diffraktometer	CCD4, Bruker Smart	
Programm der Strukturlösung	SHELXS-86[99]	

Tabelle 5.4: Atomkoordinaten($x10^4$) und isotrope Temperaturparameter($Å^2x10^3$) von **$[Sm(H_2L2^b)(HL2^b)](NO_3)_2 \cdot 2H_2O \cdot MeOH$**

	x	y	z	E(eq)
Sm	5000	1874(1)	7500	16(1)
O(18)	5228(1)	859(2)	8676(1)	23(1)
N(1)	3829(1)	1811(2)	6798(2)	19(1)
N(4)	4602(1)	3207(2)	6433(2)	23(1)
O(28)	5719(1)	2860(2)	6932(1)	23(1)
N(2)	4262(1)	380(2)	7794(2)	22(1)
O(63)	6109(2)	3564(3)	775(2)	45(1)
N(5)	5011(1)	3862(3)	6206(2)	31(1)
N(3)	4509(1)	-335(2)	8315(2)	27(1)
N(6)	5275(1)	-670(2)	9311(2)	26(1)
O(62)	6121(2)	2181(3)	1436(2)	51(1)
O(64)	5316(2)	2605(3)	657(2)	57(1)
C(9)	4048(2)	3290(3)	6108(2)	24(1)
C(2)	3612(1)	2550(3)	6303(2)	22(1)
N(61)	5854(2)	2784(3)	955(2)	33(1)
N(7)	6022(2)	4163(3)	6224(2)	39(1)
C(17)	5026(1)	0(3)	8776(2)	21(1)
C(7)	3706(2)	283(3)	7485(2)	25(1)
C(11)	5813(2)	-524(3)	9841(2)	24(1)
C(21)	6644(2)	3898(3)	6323(2)	29(1)
C(6)	3446(1)	1086(3)	6952(2)	22(1)
C(23)	7559(2)	3271(3)	7074(3)	37(1)
C(16)	6132(2)	393(3)	9924(2)	33(1)
C(13)	6537(2)	-1272(3)	10841(2)	36(1)
C(26)	6939(2)	3972(4)	5704(2)	40(1)
C(3)	3001(2)	2598(3)	5969(2)	28(1)
C(4)	2605(2)	1854(3)	6150(2)	32(1)
C(22)	6960(2)	3568(3)	7019(2)	29(1)
C(27)	5590(2)	3588(3)	6486(2)	25(1)
C(15)	6660(2)	459(4)	10466(2)	38(1)
C(25)	7544(2)	3678(4)	5776(3)	49(1)
C(5)	2830(2)	1078(3)	6646(2)	29(1)
C(14)	6863(2)	-363(4)	10917(2)	37(1)
C(12)	6016(2)	-1354(3)	10308(2)	31(1)
C(24)	7847(2)	3321(4)	6456(3)	45(1)
O(91)	4550(3)	5639(5)	5459(4)	98(2)
C(81)	3817	5856	6925	98(5)
O(82)	4054	6303	6307	260(13)

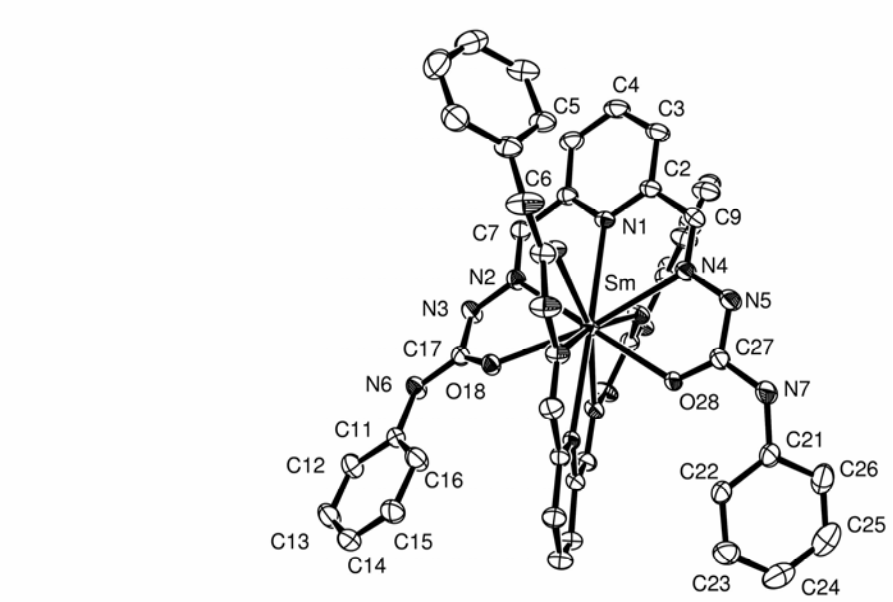

Abb. 5.2: Ellipsoiddarstellung von ***[Sm(H$_2$L2^b)$_2$]$^{2+}$.*** *Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Symmetreioperation für zweiten Ligand:* 1 -x+1,y,-z+3/2

5.3 Bis(2,6-diformylpyridin-bis-4-phenylsemicarbazon)samarium(III)-chlorid Ethanol/Wasser-Solvat $[Sm(H_2L2^b)_2]Cl_3 \cdot 2½H_2O \cdot EtOH$

Tabelle 5.5: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von **$[Sm(H_2L2b)_2]Cl_3 \cdot 2½H_2O \cdot EtOH$**

Summenformel	$C_{44}H_{43}Cl_3N_{14}O_{7.5}Sm$	
M (g/mol)	1144.62	
Temperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Monoklin, $P2_1/n$	
Elementarzelle	a = 11.861(1) Å	α= 90°
	b = 23.709(2) Å	β= 101.291(1)°
	c = 18.193(2) Å	γ = 90°
Volumen	5017(6) $Å^3$	
Berechnete Dichte	1.489 g/cm^3	
Linearer Absorptionskoeffizient	1.394 mm^{-1}	
F(000)	2312	
Kristallgröße	0.18 x 0.14 x 0.05 mm^3	
Theta-Bereich	1.43 - 28.03°	
Indizes	$-15 \le h \le 7$, $-31 \le k \le 28$, $-23 \le l \le 23$	
Zahl der gemessenen Reflexe	29378	
Zahl der unabhängigen Reflexe	11541 [R(int) = 0.0666]	
Absorptionskorrektur	semiempirisch (SADABS)	
Zahl der verfeinerten Parameter	649	
Goof	0.878	
R_1 / wR_2 [$I>2\sigma(I)$]	R_1 = 0.0444, wR_2 = 0.0913	
R_1 / wR_2 (alle Reflexe)	R_1 = 0.0980, wR_2 = 0.1023	
Restelektronendichte	1.085 und -0.671 $e.Å^{-3}$	
Diffraktometer	CCD4, Bruker Smart	
Programm der Strukturlösung	SIR 92[98]	

Tabelle 5.6: Atomkoordinaten($x10^4$) und isotrope Temperaturparameter($Å^2x10^3$) von **$[Sm(H_2L2b)_2]Cl_3 \cdot 2½H_2O \cdot EtOH$**

	x	y	z	E(eq)
Sm	2430(1)	753(1)	2735(1)	15(1)
Cl(2)	5849(1)	2631(1)	4816(1)	31(1)
Cl(3)	7353(1)	4300(1)	2826(1)	29(1)
Cl(1)	9746(1)	3395(1)	1149(1)	32(1)
O(58)	1653(3)	139(2)	1711(2)	21(1)
O(28)	1013(3)	1480(1)	2642(2)	24(1)
O(18)	3042(3)	154(2)	3837(2)	25(1)
O(48)	4047(3)	1383(2)	2735(2)	23(1)
N(1)	3653(3)	644(2)	1592(2)	14(1)
N(32)	3169(4)	1414(2)	3914(2)	19(1)
N(36)	5323(4)	2090(2)	3175(2)	22(1)
N(31)	1258(4)	822(2)	3900(2)	17(1)
N(34)	492(4)	152(2)	2745(2)	16(1)
N(4)	2043(4)	1438(2)	1532(2)	16(1)
N(2)	3966(4)	-83(2)	2718(2)	18(1)
N(7)	19(4)	2278(2)	2212(2)	23(1)
N(3)	4084(4)	-457(2)	3294(2)	22(1)
N(5)	1241(4)	1848(2)	1534(2)	21(1)
N(37)	457(4)	-504(2)	1008(2)	20(1)
N(35)	112(4)	-189(2)	2139(2)	20(1)
N(33)	4129(4)	1719(2)	3903(2)	24(1)
N(6)	3800(4)	-632(2)	4478(2)	23(1)
C(7)	4590(5)	-160(2)	2222(3)	19(1)
C(6)	4469(5)	254(2)	1609(3)	18(1)
C(32)	284(5)	529(2)	3901(3)	18(1)
C(17)	3609(5)	-285(2)	3885(3)	17(1)
C(41)	5836(5)	2188(2)	2539(3)	21(1)
C(2)	3515(5)	1021(2)	1029(3)	18(1)
C(25)	-1014(5)	3093(2)	3663(3)	29(1)
C(36)	1645(5)	1154(2)	4495(3)	20(1)
C(39)	-104(5)	171(2)	3255(3)	19(1)
C(51)	971(5)	-531(2)	367(3)	18(1)
C(16)	3420(5)	17(2)	5456(3)	20(1)
C(37)	2696(5)	1467(2)	4483(3)	24(1)
C(45)	6451(5)	1915(2)	1417(3)	33(2)
C(12)	3370(5)	-986(2)	5625(3)	24(1)
C(53)	2099(5)	-151(2)	-482(3)	27(1)
C(42)	6331(5)	2713(2)	2495(3)	24(1)
C(46)	5898(5)	1783(2)	2000(3)	26(1)
C(9)	2625(5)	1444(2)	1016(3)	20(1)
C(14)	3076(5)	-366(2)	6616(3)	25(1)
C(33)	-328(5)	565(2)	4485(3)	25(1)
C(54)	1852(5)	-615(2)	-941(3)	27(1)
C(3)	4180(5)	1013(2)	475(3)	22(1)
C(5)	5183(5)	230(2)	1088(3)	23(1)
C(27)	757(5)	1857(2)	2159(3)	21(1)
C(15)	3200(5)	89(2)	6170(3)	26(1)

	x	y	z	E(eq)
C(11)	3505(5)	-524(2)	5190(3)	23(1)
C(47)	4482(5)	1715(2)	3235(3)	21(1)
C(26)	-586(5)	2955(2)	3039(3)	25(1)
C(21)	-444(5)	2394(2)	2860(3)	22(1)
C(56)	703(5)	-990(2)	-109(3)	34(2)
C(24)	-1306(5)	2673(2)	4125(3)	30(1)
C(4)	5044(5)	620(2)	521(3)	26(1)
C(22)	-752(5)	1973(2)	3304(3)	29(2)
C(52)	1666(5)	-110(2)	169(3)	25(1)
C(43)	6880(5)	2842(2)	1915(3)	34(2)
C(13)	3157(5)	-903(2)	6343(3)	27(1)
C(57)	786(5)	-172(2)	1608(3)	18(1)
C(44)	6951(5)	2438(2)	1376(3)	35(2)
C(23)	-1176(5)	2117(2)	3937(3)	32(2)
C(34)	93(5)	909(2)	5097(3)	30(2)
C(35)	1095(5)	1205(2)	5108(3)	29(2)
C(55)	1161(6)	-1033(3)	-748(3)	38(2)
O(61)	-1516(3)	-1202(2)	816(2)	33(1)
O(84)	1931(10)	7750(5)	226(7)	87(4)
O(81)	2334(10)	7643(4)	1924(6)	72(3)
C(83)	2782(8)	8020(5)	742(6)	102(4)
C(82)	2491(9)	8143(4)	1470(5)	98(3)
O(91)	1158(8)	-1379(3)	3143(5)	43(2)
O(92)	1693(11)	8144(4)	3843(11)	131(7)
O(93)	2354(13)	7977(4)	3470(5)	90(5)

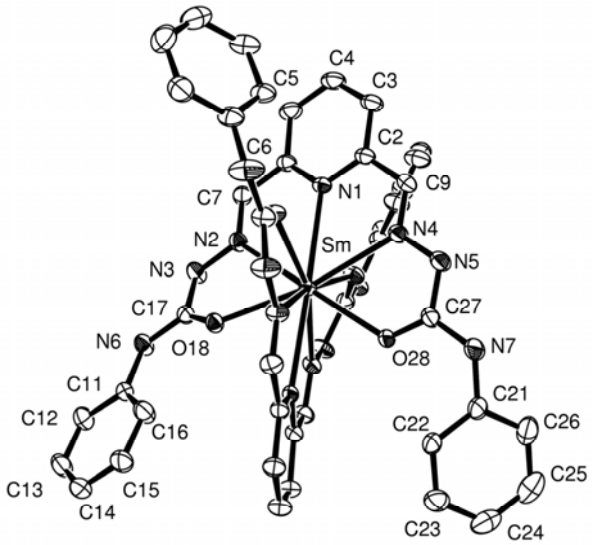

Abb. 5.3: Ellipsoiddarstellung von ***[Sm(H$_2$L2^b)$_2$]$^{2+}$.*** *Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Aus Gründen der Übersicht wurde nur ein Ligand beschriftet.*

5.4 Bis(2,6-Diformylpyridin-bis-4-phenylsemicarbazon)europium(III)-chlorid Ethanol/Wasser-Solvat $[Eu(H_2L2^b)_2]Cl_3 \cdot H_2O \cdot 3EtOH$

Tabelle 5.7: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von $[Eu(H_2L2^b)_2]Cl_3 \cdot H_2O \cdot 3EtOH$

Summenformel	$C_{48}H_{56}Cl_3N_{14}O_8Eu$	
M (g/mol)	1215.39	
Temperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Monoklin, C2/c	
Elementarzelle	a = 33.695(8) Å	α= 90°
	b = 16.556(4) Å	β= 125.545(4)°
	c = 25.499(6) Å	γ = 90°
Volumen	11574(5) $Å^3$	
Berechnete Dichte	1.395 g/cm^3	
Linearer Absorptionskoeffizient	1.283 mm^{-1}	
F(000)	4959	
Kristallgröße	0.53 x 0.46 x 0.25 mm^3	
Theta-Bereich	1.48 - 30.60°	
Indizes	$-48 \le h \le 43$, $-23 \le k \le 23$, $-34 \le l \le 36$	
Zahl der gemessenen Reflexe	70390	
Zahl der unabhängigen Reflexe	17676 [R(int) = 0.0337]	
Absorptionskorrektur	keine	
Zahl der verfeinerten Parameter	665	
Goof	1.107	
R_1 / wR_2 [$I>2\sigma(I)$]	R_1 = 0.0451, wR_2 = 0.1132	
R_1 / wR_2 (alle Reflexe)	R_1 = 0.0562, wR_2 = 0.1201	
Restelektronendichte	1.607 und -1.778 $e.Å^{-3}$	
Diffraktometer	CCD4, Bruker Smart	
Programm der Strukturlösung	SIR 92[98]	

Tabelle 5.8: Atomkoordinaten($x10^4$) und isotrope Temperaturparameter($Å^2x10^3$) von **$[Eu(H_2L2^b)_2]Cl_3 \cdot H_2O \cdot 3EtOH$**

	x	y	z	E(eq)
Eu	941(1)	7449(1)	813(1)	23(1)
Cl(1)	1318(1)	3255(1)	356(1)	37(1)
Cl(2)	1621(1)	3802(1)	2037(1)	44(1)
Cl(3)	739(1)	397(1)	3562(1)	53(1)
N(1)	1162(1)	6566(2)	86(1)	31(1)
N(2)	1224(1)	5894(2)	1077(1)	33(1)
N(3)	1289(1)	5593(2)	1619(2)	40(1)
N(4)	955(1)	8127(2)	-131(2)	37(1)
N(5)	886(1)	8947(2)	-200(2)	43(1)
N(6)	1295(1)	5871(2)	2507(2)	51(1)
N(7)	809(1)	10110(2)	216(2)	37(1)
N(31)	686(1)	8336(1)	1502(1)	26(1)
N(32)	1610(1)	8251(2)	1891(1)	31(1)
N(33)	2088(1)	8163(2)	2105(2)	39(1)
N(34)	21(1)	7500(1)	464(1)	26(1)
N(35)	-312(1)	7044(2)	-54(1)	31(1)
N(36)	2609(1)	7497(2)	1956(2)	59(1)
N(37)	-439(1)	6162(2)	-834(1)	35(1)
O(18)	1018(1)	6789(1)	1703(1)	35(1)
O(28)	793(1)	8874(1)	604(1)	34(1)
O(48)	1785(1)	7362(2)	1233(1)	46(1)
O(58)	319(1)	6650(2)	-74(1)	33(1)
C(2)	1123(2)	6897(2)	-419(2)	42(1)
C(3)	1180(2)	6458(3)	-839(3)	65(1)
C(4)	1287(2)	5645(3)	-721(3)	71(2)
C(5)	1328(2)	5293(2)	-201(2)	54(1)
C(6)	1264(1)	5771(2)	193(2)	37(1)
C(7)	1306(1)	5429(2)	749(2)	38(1)
C(9)	1020(2)	7763(2)	-517(2)	46(1)
C(11)	1200(2)	6297(2)	2904(2)	45(1)
C(12)	1487(2)	6124(3)	3559(2)	60(1)
C(13)	1393(2)	6502(4)	3961(2)	70(2)
C(14)	1029(2)	7046(4)	3724(3)	70(2)
C(15)	751(2)	7230(3)	3082(3)	64(1)
C(16)	828(2)	6854(3)	2664(2)	55(1)
C(17)	1189(1)	6115(2)	1938(2)	35(1)
C(21)	761(1)	10593(2)	638(2)	36(1)
C(22)	453(2)	10387(2)	813(2)	40(1)
C(23)	411(2)	10898(2)	1212(2)	49(1)
C(24)	683(2)	11609(3)	1442(2)	59(1)
C(25)	986(2)	11809(2)	1259(2)	58(1)
C(26)	1024(2)	11309(2)	859(2)	47(1)
C(27)	825(1)	9300(2)	227(2)	32(1)
C(32)	222(1)	8384(2)	1308(2)	29(1)
C(33)	80(1)	8842(2)	1632(2)	37(1)
C(34)	429(2)	9276(2)	2171(2)	43(1)
C(35)	906(1)	9236(2)	2371(2)	39(1)

	x	y	z	E(eq)
C(36)	1021(1)	8759(2)	2025(2)	31(1)
C(37)	1523(1)	8690(2)	2229(2)	35(1)
C(39)	-135(1)	7913(2)	742(2)	30(1)
C(41)	2772(2)	6936(4)	1704(3)	80(2)
C(42)	3242(2)	6961(3)	1908(3)	65(1)
C(43)	3430(2)	6439(5)	1684(4)	94(2)
C(44)	3159(2)	5832(6)	1293(4)	144(5)
C(45)	2688(3)	5746(8)	1117(6)	218(8)
C(46)	2493(2)	6315(6)	1307(6)	196(7)
C(47)	2147(1)	7653(2)	1739(2)	44(1)
C(51)	-277(1)	5654(2)	-1132(2)	34(1)
C(52)	44(1)	5031(2)	-787(2)	40(1)
C(53)	197(2)	4532(2)	-1082(2)	47(1)
C(54)	23(2)	4661(3)	-1714(2)	51(1)
C(55)	-303(2)	5276(3)	-2057(2)	59(1)
C(56)	-453(2)	5780(3)	-1768(2)	48(1)
C(57)	-125(1)	6617(2)	-316(2)	29(1)
O(61)	2373(1)	3244(4)	1592(2)	109(2)
C(62)	2566(2)	2630(6)	1374(4)	118(3)
C(63)	2651(4)	3004(9)	953(5)	160(5)
O(71)	1133(1)	959(2)	9556(2)	61(1)
C(72)	1604(4)	1263(7)	9823(5)	133(3)
C(73)	1990(7)	859(11)	9970(9)	242(8)
O(81)	1746(5)	5632(9)	8275(7)	149(5)
C(82)	2258(7)	5922(12)	9093(9)	118(6)
C(83)	2758(8)	6480(13)	9555(10)	143(7)
O(91)	2331(3)	4927(5)	3206(4)	80(2)
C(92)	2729	5311	3200	136(7)
C(93)	2707(7)	5471(12)	2725(7)	138(8)
O(111)	519(5)	7851(7)	7770(6)	106(3)
O(112)	83(7)	7645(9)	7316(7)	143(5)

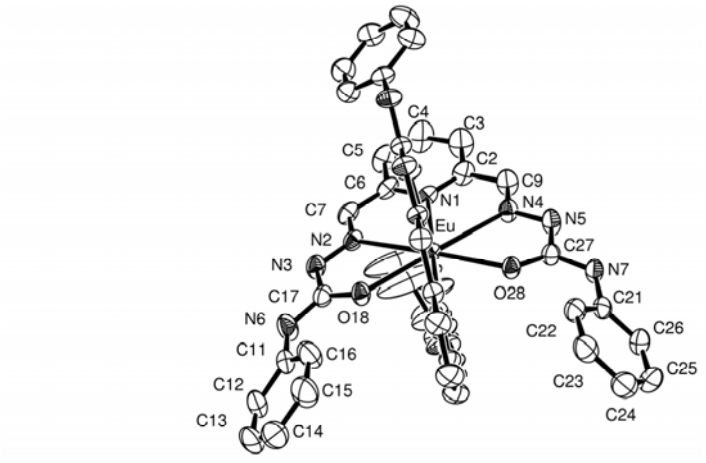

Abb. 5.4: Ellipsoiddarstellung von ***[Eu(H$_2$L2^b)$_2$]$^{3+}$.*** *Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Aus Gründen der Übersicht wurde nur ein Ligand beschriftet.*

5.5 Bis(2,6-diacetylpyridin-benzoylhydrazon-benzoylhydrazonato)-lanthan(III)-nitrat Wasser-Solvat $[La(HL1^a)_2]NO_3 \cdot H_2O$

Tabelle 5.9: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von $[La(HL1^a)_2]NO_3 \cdot H_2O$

Summenformel	$C_{46}H_{40}LaN_{11}O_8$	
M (g/mol)	1013.80	
Temperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Triklin, P-1	
Elementarzelle	a = 11.571(2) Å	α= 70.413(3)°
	b = 12.034(2) Å	β= 89.052(4)°
	c = 16.875(3) Å	γ = 82.409(4)°
Volumen	2193(1) $Å^3$	
Berechnete Dichte	1.535 g/cm^3	
Linearer Absorptionskoeffizient	1.042 mm^{-1}	
F(000)	1028	
Kristallgröße	0.31 x 0.23 x 0.14 mm^3	
Theta-Bereich	1.28 - 30.348°	
Indizes	$-16 \le h \le 12$, $-13 \le k \le 17$, $-24 \le l \le 24$	
Zahl der gemessenen Reflexe	27610	
Zahl der unabhängigen Reflexe	13187 [R(int) = 0.0205]	
Absorptionskorrektur	semiempirisch (SADABS)	
Zahl der verfeinerten Parameter	603	
Goof	1.102	
R_1 / wR_2 [$I>2\sigma(I)$]	R_1 = 0.0301, wR_2 = 0.0715	
R_1 / wR_2 (alle Reflexe)	R_1 = 0.0407, wR_2 = 0.0803	
Restelektronendichte	1.175 und -0.742 $e.Å^{-3}$	
Diffraktometer	CCD4, Bruker Smart	
Programm der Strukturlösung	SIR 92[98]	

Tabelle 5.10: Atomkoordinaten($x10^4$) und isotrope Temperaturparameter($Å^2x10^3$) von **$[La(HL1^a)_2]NO_3 \cdot H_2O$**

	x	y	z	E(eq)
La	1015(1)	1707(1)	2297(1)	16(1)
O(18)	-1117(1)	2005(1)	2075(1)	25(1)
O(58)	1855(1)	2947(1)	2971(1)	24(1)
O(48)	1086(1)	1598(1)	790(1)	24(1)
N(32)	807(2)	-350(2)	2003(1)	22(1)
O(28)	2615(1)	40(2)	3319(1)	27(1)
N(34)	144(2)	1905(2)	3712(1)	20(1)
N(35)	333(2)	2916(2)	3890(1)	22(1)
N(4)	3270(2)	1335(2)	1834(1)	22(1)
N(5)	3878(2)	229(2)	2261(1)	25(1)
N(31)	-161(2)	-60(2)	3371(1)	19(1)
N(2)	-120(2)	3868(2)	1581(1)	23(1)
C(34)	-1707(2)	-1579(2)	4278(2)	30(1)
N(1)	2079(2)	3476(2)	1133(1)	20(1)
O(62)	4489(2)	-3111(2)	1193(2)	65(1)
O(63)	2641(2)	-2451(2)	1142(1)	44(1)
C(32)	-805(2)	202(2)	3978(1)	21(1)
C(43)	2127(2)	-191(2)	-1283(2)	30(1)
O(64)	3932(2)	-1323(2)	1185(2)	57(1)
N(33)	1275(2)	-417(2)	1248(1)	23(1)
C(36)	-304(2)	-1055(2)	3203(1)	21(1)
N(3)	-1281(2)	4036(2)	1809(1)	25(1)
C(37)	313(2)	-1238(2)	2465(1)	22(1)
C(45)	2941(2)	1598(2)	-1384(2)	31(1)
C(4)	3116(2)	5283(2)	-19(2)	36(1)
C(8)	-315(2)	6048(2)	892(2)	35(1)
C(47)	1391(2)	642(2)	662(1)	21(1)
N(61)	3697(2)	-2296(2)	1175(1)	39(1)
C(51)	1620(2)	4391(2)	3657(1)	20(1)
C(52)	2386(2)	5068(2)	3119(1)	24(1)
C(27)	3518(2)	-347(2)	3043(1)	22(1)
C(33)	-1590(2)	-549(2)	4442(1)	26(1)
C(15)	-4473(2)	1892(3)	2996(2)	35(1)
C(7)	330(2)	4812(2)	1151(1)	22(1)
C(41)	1867(2)	627(2)	-159(1)	22(1)
C(13)	-4871(2)	4013(3)	2357(2)	45(1)
C(23)	5057(3)	-2702(3)	4921(2)	46(1)
C(3)	3668(2)	4123(2)	229(2)	32(1)
C(35)	-1057(2)	-1846(2)	3653(1)	27(1)
C(2)	3131(2)	3244(2)	825(1)	23(1)
C(9)	3741(2)	2006(2)	1180(1)	24(1)
C(55)	1622(2)	5635(2)	4517(2)	30(1)
C(39)	-649(2)	1308(2)	4138(1)	20(1)
C(53)	2767(2)	6022(2)	3282(2)	31(1)
C(6)	1527(2)	4603(2)	863(1)	22(1)
C(57)	1260(2)	3348(2)	3483(1)	19(1)
C(21)	4309(2)	-1428(2)	3551(1)	25(1)

	x	y	z	E(eq)
C(16)	-3324(2)	1923(2)	2746(2)	29(1)
C(5)	2043(2)	5535(2)	297(2)	31(1)
C(42)	1689(2)	-246(2)	-500(1)	26(1)
C(54)	2390(2)	6302(2)	3980(2)	31(1)
C(46)	2481(2)	1551(2)	-606(1)	26(1)
C(22)	4348(2)	-1698(2)	4421(2)	34(1)
C(56)	1241(2)	4689(2)	4360(1)	25(1)
C(17)	-1690(2)	2999(2)	2055(1)	23(1)
C(10)	4856(2)	1624(2)	820(2)	38(1)
C(14)	-5251(2)	2937(3)	2790(2)	40(1)
C(11)	-2929(2)	3004(2)	2316(1)	26(1)
C(25)	5704(2)	-3163(2)	3699(2)	42(1)
C(44)	2755(2)	721(2)	-1719(2)	32(1)
C(38)	215(2)	-2328(2)	2245(2)	30(1)
C(12)	-3708(2)	4058(2)	2131(2)	38(1)
C(40)	-1388(2)	1701(2)	4761(2)	29(1)
C(26)	4995(2)	-2157(2)	3187(2)	31(1)
C(24)	5728(3)	-3434(3)	4559(2)	48(1)
O(71)	8498(2)	-4775(2)	3135(2)	56(1)

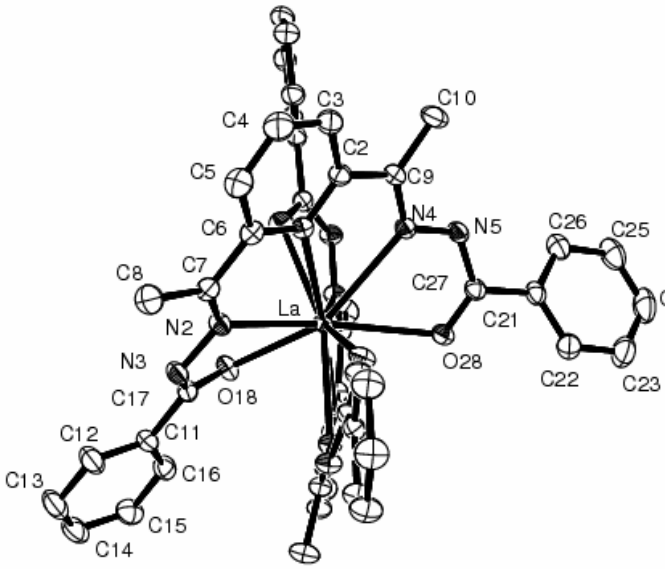

Abb. 5.5: Ellipsoiddarstellung von $[La(H_2L1^a)_2]^+$. *Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Aus Gründen der Übersicht wurde nur ein Ligandbeschriftet.*

5.6 2,6-Diformylpyridin-bis-benzoylhydrazon-2,6-diformylpyridin-benzoylhydrazon-benzoylhydrazonato-cer(III)-nitrat Ethanol/Wasser-Solvat $[Ce(H_2L1^a)(HL1^a)](NO_3)_2 \cdot 3H_2O \cdot EtOH$

Tabelle 5.11: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von $[Ce(H_2L1^a)(HL1^a)](NO_3)_2 \cdot 3H_2O \cdot EtOH$

Summenformel	$C_{48}H_{47}CeN_{12}O_{15}$	
M (g/mol)	1172.10	
Temperatur	150(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Triklin, P-1	
Elementarzelle	a = 11.601(4) Å	α= 99.512(7)°
	b = 12.989(4) Å	β= 98.668(6)°
	c = 17.907(6) Å	γ = 102.536(7)°
Volumen	2548(2) $Å^3$	
Berechnete Dichte	1.527 g/cm^3	
Linearer Absorptionskoeffizient	0.973 mm^{-1}	
F(000)	1194	
Kristallgröße	0.1 x 0.13 x 0.24 mm^3	
Theta-Bereich	1.64 - 26.00°	
Indizes	$-14 \le h \le 14$, $-16 \le k \le 15$, $0 \le l \le 22$	
Zahl der gemessenen Reflexe	9941	
Zahl der unabhängigen Reflexe	9941 [R(int) = 0.0000]	
Absorptionskorrektur	semiempirisch (SADABS)	
Zahl der verfeinerten Parameter	693	
Goof	1.048	
R_1 / wR_2 [$I>2\sigma(I)$]	R_1 = 0.0856, wR_2 = 0.2034	
R_1 / wR_2 (alle Reflexe)	R_1 = 0.1395, wR_2 = 0.2587	
Restelektronendichte	2.706 und -5.398 $e.Å^{-3}$	
Diffraktometer	CCD4, Bruker Smart	
Programm der Strukturlösung	SIR 92[98]	

Tabelle 5.12: Atomkoordinaten($x10^4$) und isotrope Temperaturparameter($Å^2x10^3$) von

$[Ce(H_2L1^a)(HL1^a)](NO_3)_2 \cdot 3H_2O \cdot EtOH$

	x	y	z	E(eq)
Ce	4235(1)	3951(1)	2466(1)	25(1)
O(18)	6361(5)	3909(5)	2381(4)	27(1)
O(48)	3304(5)	2945(5)	3339(3)	28(1)
O(58)	3979(5)	3639(5)	976(3)	27(1)
O(28)	3328(6)	5437(5)	3083(4)	34(2)
N(31)	5883(6)	5813(6)	3150(4)	23(2)
N(1)	2563(6)	2131(6)	1663(4)	23(2)
N(32)	5390(6)	4175(6)	3876(4)	26(2)
N(34)	4687(7)	5588(6)	1742(4)	27(2)
N(2)	4795(6)	2082(6)	2163(4)	24(2)
N(33)	5051(7)	3343(6)	4261(5)	31(2)
N(35)	4005(7)	5377(6)	991(4)	26(2)
O(62)	7758(6)	-339(6)	2194(4)	46(2)
N(3)	6004(6)	2134(6)	2388(5)	28(2)
N(5)	1853(7)	5050(7)	2033(5)	30(2)
O(63)	9674(7)	-154(6)	2432(5)	51(2)
C(11)	8051(7)	3248(7)	2779(5)	22(2)
N(4)	2022(7)	4034(6)	1908(4)	26(2)
C(57)	3678(8)	4355(7)	646(5)	24(2)
O(61)	8710(8)	50(6)	3371(5)	53(2)
C(51)	2954(8)	4051(8)	-146(5)	27(2)
C(32)	6115(8)	6640(7)	2797(5)	27(2)
C(27)	2610(8)	5757(7)	2642(5)	27(2)
C(21)	2543(9)	6872(8)	2757(5)	30(2)
C(39)	5360(8)	6535(7)	2012(5)	26(2)
C(9)	1183(8)	3253(8)	1498(5)	32(2)
C(14)	10507(8)	3548(8)	3275(5)	33(2)
C(47)	3945(8)	2759(7)	3913(5)	27(2)
C(6)	2807(8)	1173(8)	1558(5)	30(2)
N(61)	8743(8)	-167(6)	2661(5)	33(2)
C(7)	4090(8)	1159(7)	1807(5)	28(2)
C(52)	2255(8)	3005(8)	-411(6)	32(2)
C(46)	2172(8)	1401(7)	4068(5)	30(2)
C(37)	6274(8)	4982(7)	4245(5)	25(2)
C(41)	3411(8)	1862(7)	4282(5)	27(2)
C(2)	1411(8)	2167(8)	1389(6)	35(2)
C(24)	2538(11)	9034(9)	2946(6)	47(3)
C(16)	8755(8)	4260(8)	3124(6)	31(2)
C(15)	9978(8)	4404(8)	3379(6)	33(2)
C(33)	7050(9)	7566(7)	3111(6)	30(2)
C(12)	8576(8)	2377(8)	2660(5)	30(2)
C(53)	1585(9)	2678(9)	-1156(6)	38(2)
C(26)	1540(10)	7202(9)	2482(6)	45(3)
C(4)	772(9)	276(9)	988(6)	40(3)
C(13)	9815(9)	2541(8)	2920(6)	35(2)

	x	y	z	E(eq)
C(38)	6916(9)	5066(7)	5052(5)	33(2)
C(35)	7563(8)	6742(7)	4161(6)	31(2)
C(17)	6748(8)	3115(7)	2500(5)	23(2)
C(55)	2318(9)	4452(10)	-1392(6)	43(3)
C(5)	1934(9)	223(8)	1235(6)	35(2)
C(10)	-23(10)	3411(11)	1133(7)	55(3)
C(34)	7788(9)	7602(8)	3795(6)	39(2)
C(54)	1635(9)	3424(9)	-1641(6)	43(3)
C(42)	4075(9)	1472(8)	4829(6)	39(2)
C(36)	6588(8)	5882(8)	3844(6)	31(2)
C(23)	3587(10)	8739(9)	3232(6)	44(3)
C(25)	1538(11)	8272(9)	2574(7)	51(3)
C(56)	2985(9)	4776(8)	-636(6)	36(2)
C(45)	1640(9)	599(7)	4406(6)	34(2)
C(43)	3533(10)	674(9)	5159(7)	46(3)
C(22)	3574(9)	7679(9)	3159(6)	38(2)
C(8)	4497(10)	160(8)	1611(6)	41(3)
C(3)	513(9)	1243(9)	1049(6)	39(3)
C(40)	5432(9)	7432(8)	1617(6)	38(2)
C(44)	2298(10)	238(8)	4951(6)	41(3)
O(72)	2774(9)	6972(8)	707(8)	90(4)
O(71)	908(14)	5727(11)	724(7)	102(4)
O(73)	1246(13)	7591(11)	568(8)	126(5)
N(71)	1670(20)	6720(20)	694(9)	159(11)
O(81)	6415(6)	701(6)	3295(4)	41(2)
O(91)	7064(7)	2491(7)	4451(5)	54(2)
C(92)	7797(10)	2619(9)	5192(6)	39(2)
C(91)	9094(10)	2771(11)	5085(8)	61(3)
O(82)	4507(8)	1722(7)	214(5)	56(2)
O(83)	7543(8)	9800(8)	636(5)	65(2)
O(84)	3073(9)	8282(8)	-448(7)	88(3)

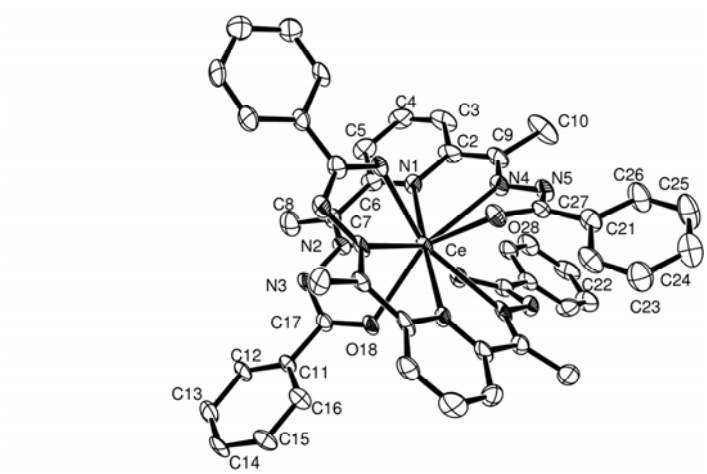

Abb. 5.6: Ellipsoiddarstellung von ***[Ce(H$_2$L1^a)(HL1^a)]$^{2+}$.*** *Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Aus Gründen der Übersicht wurde nur ein Ligand beschriftet.*

5.7 2,6-Diacetylpyridin-bis-benzoylhydrazonato-2,6-diacetylpyridin-pyridinbenzoylhydrazon-benzoylhydrazonato-neodym(III) Wasser-Solvat $[Nd(L1^a)(HL1^a)]\cdot 11.75H_2O$

Tabelle 5.13: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von $[Nd(L1^a)(HL1^a)]\cdot 11.75H_2O$

Summenformel	$C_{46}H_{39}N_{10}NdO_{15.75}$	
M (g/mol)	1128.11	
Temperatur	120(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Triklin, P-1	
Elementarzelle	a = 11.587(2) Å	α= 77.445(2)°
	b = 12.802(2) Å	β= 77.514(2)°
	c = 19.808(2) Å	γ = 83.653(2)°
Volumen	2793.7(6)Å^3	
Berechnete Dichte	1.341 g/cm^3	
Linearer Absorptionskoeffizient	0.999 mm^{-1}	
F(000)	1142	
Kristallgröße	0.30 x 0.17 x 0.15 mm^3	
Theta-Bereich	1.77 - 26.00°	
Indizes	$-13\leq h\leq 14$, $-15\leq k\leq 15$, $0\leq l\leq 25$	
Zahl der gemessenen Reflexe	10848	
Zahl der unabhängigen Reflexe	10848 [R(int) = 0.0000]	
Absorptionskorrektur	semiempirisch (SADABS)	
Zahl der verfeinerten Parameter	705	
Goof	1.090	
R_1 / wR_2 [$I>2\sigma(I)$]	R_1 = 0.0585, wR_2 = 0.1402	
R_1 / wR_2 (alle Reflexe)	R_1 = 0.0984, wR_2 = 0.1656	
Restelektronendichte	1.224 und -2.063 e.Å^{-3}	
Diffraktometer	CCD4, Bruker Smart	
Programm der Strukturlösung	SIR 92[98]	

Tabelle 5.14: Atomkoordinaten($x10^4$) und isotrope Temperaturparameter($Å^2x10^3$) von **$[Nd(L1^a)(HL1^a)]\cdot 11.75H_2O$**

	x	y	z	E(eq)
Nd	2546(1)	4998(1)	2435(1)	32(1)
O(58)	1106(4)	5711(4)	3361(2)	33(1)
O(28)	1293(4)	3448(4)	2812(2)	36(1)
O(18)	4644(4)	5108(4)	2489(2)	36(1)
O(48)	3215(4)	5792(4)	1153(2)	34(1)
N(4)	701(4)	4999(4)	1885(2)	32(1)
N(2)	3290(4)	6845(4)	2494(3)	32(1)
N(3)	4338(5)	6755(5)	2743(3)	34(1)
N(1)	1387(4)	6868(4)	1957(2)	32(1)
N(5)	342(4)	3987(4)	1904(3)	33(1)
N(34)	2776(5)	4384(5)	3742(3)	35(1)
N(31)	3675(5)	3093(4)	2841(3)	37(1)
N(32)	3406(5)	3752(4)	1534(3)	38(1)
N(33)	3300(5)	4180(5)	836(3)	38(1)
N(35)	2253(5)	5087(5)	4180(3)	38(1)
C(57)	1379(5)	5723(5)	3944(3)	31(1)
C(6)	1741(6)	7811(6)	1997(3)	37(2)
C(9)	35(5)	5821(6)	1660(3)	34(1)
C(17)	4979(5)	5833(6)	2717(3)	33(1)
C(7)	2826(6)	7790(6)	2288(3)	36(2)
C(51)	676(6)	6455(5)	4390(3)	35(2)
C(39)	3352(6)	3542(6)	4002(4)	43(2)
C(21)	272(6)	2130(6)	2539(3)	35(2)
C(27)	691(5)	3239(5)	2415(3)	30(1)
C(32)	3828(6)	2797(6)	3510(4)	48(2)
C(47)	3214(5)	5248(6)	689(3)	34(2)
C(53)	-751(7)	7954(6)	4500(4)	48(2)
C(11)	6139(5)	5697(6)	2940(3)	35(2)
C(41)	3145(5)	5807(6)	-45(3)	40(2)
C(37)	3892(6)	2800(6)	1668(4)	42(2)
C(23)	340(6)	309(6)	3173(4)	46(2)
C(2)	424(5)	6871(6)	1679(3)	36(2)
C(22)	766(6)	1330(6)	2998(3)	40(2)
C(36)	4029(6)	2414(6)	2398(4)	45(2)
C(26)	-611(6)	1908(6)	2232(4)	49(2)
C(54)	-768(7)	7761(7)	5206(4)	53(2)
C(15)	7740(6)	4495(7)	3316(3)	51(2)
C(16)	6630(5)	4661(6)	3124(3)	41(2)
C(52)	-41(6)	7299(6)	4089(3)	39(2)
C(14)	8335(6)	5376(8)	3315(3)	54(2)
C(10)	-1092(6)	5754(6)	1425(4)	43(2)
C(56)	669(7)	6275(6)	5107(3)	46(2)
C(45)	2624(8)	7399(8)	-836(4)	66(2)
C(55)	-53(7)	6921(7)	5510(4)	56(2)
C(13)	7848(6)	6386(8)	3140(4)	53(2)
C(43)	3538(7)	5907(8)	-1301(4)	55(2)
C(42)	3599(6)	5329(7)	-619(4)	50(2)

	x	y	z	E(eq)
C(8)	3323(7)	8801(6)	2293(4)	50(2)
C(5)	1153(7)	8784(7)	1760(4)	56(2)
C(3)	-201(7)	7809(6)	1431(4)	53(2)
C(38)	4361(7)	2113(7)	1131(5)	58(2)
C(4)	157(8)	8767(8)	1480(5)	68(2)
C(46)	2640(7)	6860(7)	-160(4)	50(2)
C(44)	3073(7)	6925(9)	-1397(4)	64(2)
C(40)	3498(8)	3245(7)	4765(4)	59(2)
C(24)	-560(8)	116(7)	2877(4)	58(2)
C(25)	-1050(8)	905(7)	2412(4)	60(2)
C(33)	4362(10)	1792(8)	3751(5)	79(3)
C(34)	4698(11)	1089(8)	3284(6)	92(4)
O(62)	4431(3)	7957(3)	3888(2)	25(1)
O(63)	43(4)	3836(4)	476(2)	38(1)
O(64)	3952(4)	5827(4)	4847(2)	42(1)
O(65)	2399(6)	2920(5)	123(3)	72(2)
O(66)	6462(6)	7476(5)	1176(3)	69(2)
O(67)	4325(6)	7744(5)	793(3)	70(2)
O(68)	6764(7)	8925(6)	3420(5)	35(2)
O(69)	2286(13)	795(9)	699(6)	73(4)
O(71)	4063(12)	-308(11)	-110(7)	79(4)
O(72)	-29(15)	1418(10)	341(6)	88(4)
O(73)	6580(20)	40(13)	4538(11)	88(7)
O(74)	8476(19)	49(14)	301(9)	76(6)
O(61)	6674(11)	9604(11)	1716(5)	22(2)
O(75)	8033(17)	888(14)	5043(11)	70(5)
O(76)	-3314(12)	-597(11)	1956(7)	32(3)
O(77)	-3108(18)	-262(14)	1482(8)	51(5)
O(81)	5810(18)	-443(17)	4634(10)	46(5)
O(78)	2720(30)	9575(19)	4544(12)	72(7)
O(79)	2380(20)	8520(20)	5638(14)	82(8)

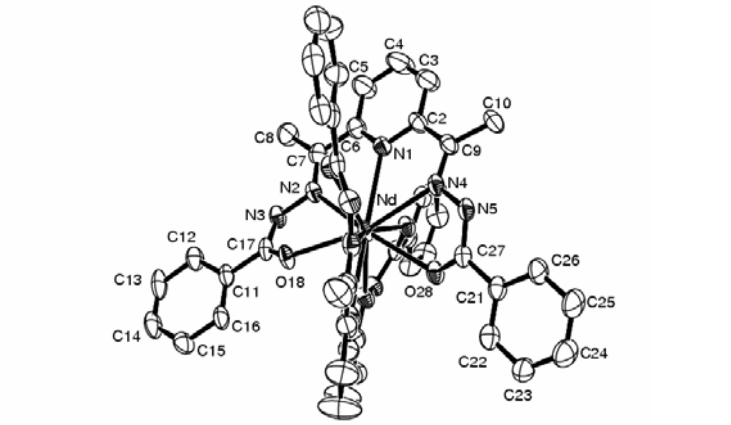

Abb. 5.7: Ellipsoiddarstellung von ***[Sm(H$_2$L1^a)$_2$]$^{2+}$.*** *Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50%der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Aus Gründen der Übersicht wurde nur ein Ligand beschriftet.*

5.8 2,6-Diacetylpyridin-bis-benzoylhydrazon-2,6-diacetylpyridin-benzoylhydrazon-benzoylhydrazonato-samarium(III)-nitrat Ethanol/Wasser-Solvat $[Sm(H_2L1^a)(HL1^a)](NO_3)_2 \cdot 4H_2O \cdot EtOH$

Tabelle 5.15: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von $[Sm(H_2L1^a)(HL1^a)](NO_3)_2 \cdot 4H_2O \cdot EtOH$

Summenformel	$C_{48}H_{48}N_{12}O_{15}Sm$	
M (g/mol)	1183.33	
Temperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Triklin, P-1	
Elementarzelle	a = 11.561(4) Å	α= 98.011(7)°
	b = 12.975(5) Å	β= 99.917(7)°
	c = 17.957(6) Å	γ = 102.331(7)°
Volumen	2548(2) $Å^3$	
Berechnete Dichte	1.542 g/cm^3	
Linearer Absorptionskoeffizient	1.233 mm^{-1}	
F(000)	1204	
Kristallgröße	0.38 x 0.20 x 0.10 mm^3	
Theta-Bereich	1.17 - 30.496°	
Indizes	$-16 \le h \le 16$, $-18 \le k \le 18$, $-24 \le l \le 25$	
Zahl der gemessenen Reflexe	31434	
Zahl der unabhängigen Reflexe	15293 [R(int) = 0.0161]	
Absorptionskorrektur	semiempirisch (SADABS)	
Zahl der verfeinerten Parameter	685	
Goof	1.092	
R_1 / wR_2 [$I>2\sigma(I)$]	R_1 = 0.0260, wR_2 = 0.0666	
R_1 / wR_2 (alle Reflexe)	R_1 = 0.0328, wR_2 = 0.0705	
Restelektronendichte	0.806 und -0.823 $e.Å^{-3}$	
Diffraktometer	CCD4, Bruker Smart	
Programm der Strukturlösung	SIR 92[98]	

Tabelle 5.16: Atomkoordinaten($x10^4$) und isotrope Temperaturparameter($Å^2x10^3$) von **$[Sm(H_2L1^a)(HL1^a)](NO_3)_2 \cdot 4H_2O \cdot EtOH$**

	x	y	z	E(eq)
Sm	5828(1)	1021(1)	2527(1)	15(1)
O(48)	6631(1)	-459(1)	1876(1)	21(1)
O(58)	3751(1)	1053(1)	2637(1)	21(1)
O(28)	6764(1)	2020(1)	1694(1)	21(1)
O(18)	6067(1)	1358(1)	3992(1)	22(1)
C(23)	8490(2)	4357(2)	616(1)	31(1)
C(10)	3134(2)	-34(2)	-31(1)	28(1)
N(1)	4168(1)	-798(1)	1878(1)	18(1)
C(12)	7074(2)	253(2)	5650(1)	30(1)
N(4)	4651(2)	842(1)	1162(1)	20(1)
N(31)	7549(1)	2753(1)	3322(1)	19(1)
N(34)	5311(1)	2853(1)	2817(1)	19(1)
C(35)	9610(2)	3570(2)	3968(1)	26(1)
N(5)	4996(2)	1689(1)	780(1)	22(1)
C(13)	7707(2)	590(2)	6406(1)	35(1)
C(8)	4609(2)	-2408(2)	3454(1)	29(1)
N(33)	8109(1)	-188(1)	2933(1)	20(1)
N(35)	4089(1)	2820(1)	2598(1)	20(1)
O(74)	1386(2)	4945(2)	1656(1)	41(1)
N(32)	7971(1)	853(1)	3080(1)	19(1)
C(44)	7362(3)	-4120(2)	1966(2)	38(1)
N(2)	5442(2)	-571(1)	3265(1)	20(1)
O(73)	2347(2)	5333(1)	2836(1)	38(1)
N(3)	6125(2)	-361(1)	4011(1)	21(1)
O(83)	8827(2)	-2688(1)	4402(1)	41(1)
O(84)	7313(2)	-1973(2)	4299(1)	52(1)
O(72)	399(2)	5132(2)	2569(1)	46(1)
C(55)	258(2)	2429(2)	2136(1)	26(1)
C(16)	7793(2)	2040(2)	5407(1)	25(1)
C(34)	9373(2)	4574(2)	4020(1)	28(1)
C(26)	5991(2)	3572(2)	218(1)	33(1)
O(82)	9058(2)	-1068(1)	4171(1)	40(1)
C(7)	4728(2)	-1514(1)	3015(1)	20(1)
C(39)	6034(2)	3762(2)	3162(1)	21(1)
C(11)	7113(2)	980(2)	5148(1)	21(1)
C(38)	10055(2)	1352(2)	3839(1)	29(1)
C(4)	2290(2)	-2604(2)	1230(1)	29(1)
C(27)	6114(2)	2237(1)	1114(1)	19(1)
C(33)	8216(2)	4662(2)	3754(1)	26(1)
C(41)	7388(2)	-1963(2)	2166(1)	21(1)
N(71)	1359(2)	5140(1)	2353(1)	30(1)
C(15)	8429(2)	2361(2)	6162(1)	31(1)
C(9)	3782(2)	45(2)	782(1)	21(1)
C(14)	8376(2)	1640(2)	6658(1)	33(1)
C(51)	2028(2)	1724(2)	2251(1)	20(1)
C(37)	8881(2)	1579(2)	3500(1)	20(1)
C(3)	2504(2)	-1751(2)	853(1)	26(1)

	x	y	z	E(eq)
C(36)	8675(2)	2675(2)	3607(1)	20(1)
C(32)	7313(2)	3728(1)	3413(1)	20(1)
C(17)	6410(2)	683(2)	4348(1)	19(1)
C(21)	6670(2)	3137(2)	755(1)	21(1)
C(56)	1497(2)	2581(2)	2389(1)	23(1)
C(43)	8412(3)	-3368(2)	2327(2)	40(1)
C(2)	3473(2)	-860(2)	1187(1)	20(1)
C(5)	3044(2)	-2563(2)	1926(1)	27(1)
N(81)	8409(2)	-1913(2)	4287(1)	30(1)
C(52)	1309(2)	715(2)	1872(1)	24(1)
C(6)	3962(2)	-1636(1)	2241(1)	20(1)
C(47)	7342(2)	-823(2)	2301(1)	19(1)
C(54)	-455(2)	1432(2)	1753(1)	28(1)
C(22)	7918(2)	3546(2)	955(1)	25(1)
C(57)	3344(2)	1838(1)	2506(1)	19(1)
C(42)	8425(2)	-2290(2)	2436(1)	31(1)
C(53)	75(2)	575(2)	1624(1)	29(1)
C(46)	6338(2)	-2729(2)	1778(1)	27(1)
C(91)	2921(2)	2495(2)	535(1)	51(1)
C(24)	7810(2)	4774(2)	83(1)	34(1)
C(92)	2155(2)	2377(2)	-196(1)	35(1)
C(25)	6564(2)	4391(2)	-109(2)	39(1)
C(45)	6324(2)	-3809(2)	1692(1)	35(1)
C(93)	873(3)	2206(3)	-93(2)	59(1)
O(101)	3605(2)	4256(1)	1692(1)	33(1)
O(102)	5435(2)	3212(2)	4733(1)	52(1)
C(40)	5639(2)	4777(2)	3360(1)	30(1)
O(103)	2544(2)	5278(2)	4417(1)	59(1)
O(104)	6946(2)	-3322(2)	5472(2)	68(1)

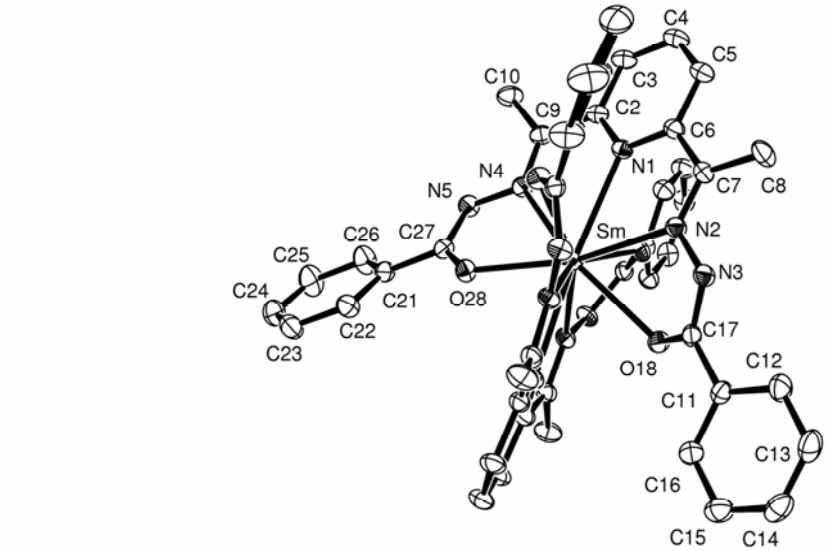

Abb. 5.8: Ellipsoiddarstellung von ***[Sm(H$_2$L1^a)$_2$]$^{2+}$.*** *Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Aus Gründen der Übersicht wurde nur ein Ligand beschriftet.*

5.9 Bis(2,6-diacetylpyridin-bis-benzoylhydrazon)europium(III)chlorid Ethanol/Wasser-Solvat $[Eu(H_2L1^a)_2]Cl_3 \cdot 2H_2O \cdot 3EtOH$

Tabelle 5.17: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von **$[Eu(H_2L1^a)_2]Cl_3 \cdot 2H_2O \cdot 3EtOH$**

Summenformel	$C_{52}H_{62}Cl_3EuN_{10}O_9$	
M (g/mol)	1229.43	
Temperatur	120(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Triklin, P-1	
Elementarzelle	a = 12.193(3) Å	α= 105.951(4)°
	b = 13.558(3) Å	β= 96.559(4)°
	c = 17.570(4) Å	γ = 93.956(4)°
Volumen	2759(1) $Å^3$	
Berechnete Dichte	1.480 g/cm^3	
Linearer Absorptionskoeffizient	1.345 mm^{-1}	
F(000)	1260	
Kristallgröße	0.29 x 0.25 x 0.23 mm^3	
Theta-Bereich	1.22 - 26.4°	
Indizes	$-15 \le h \le 15$, $-16 \le k \le 16$, $0 \le l \le 21$	
Zahl der gemessenen Reflexe	11147	
Zahl der unabhängigen Reflexe	11147 [R(int) = 0.0000]	
Absorptionskorrektur	semiempirisch (SADABS)	
Zahl der verfeinerten Parameter	685	
Goof	1.068	
R_1 / wR_2 [$I>2\sigma(I)$]	R_1 = 0.0445, wR_2 = 0.0998	
R_1 / wR_2 (alle Reflexe)	R_1 = 0.0663, wR_2 = 0.1110	
Restelektronendichte	1.936 und -2.056 $e.Å^{-3}$	
Diffraktometer	CCD4, Bruker Smart	
Programm der Strukturlösung	SIR 92[98]	

Tabelle 5.18: Atomkoordinaten($x10^4$) und isotrope Temperaturparameter($Å^2x10^3$) von **$Eu(H_2L1^a)_2]Cl_3 \cdot 2H_2O \cdot 3EtOH$**

	x	y	z	E(eq)
Eu	2324(1)	2449(1)	7599(1)	15(1)
N(1)	1157(3)	1597(3)	8483(2)	17(1)
N(31)	3510(3)	3287(3)	6732(2)	16(1)
O(18)	3323(2)	1368(2)	8308(2)	16(1)
C(27)	61(4)	3588(4)	7582(3)	19(1)
N(5)	690(3)	4365(3)	7451(2)	20(1)
O(58)	1757(3)	1789(2)	6144(2)	23(1)
O(48)	3832(3)	3798(2)	8332(2)	17(1)
C(55)	1271(4)	-795(4)	3665(3)	30(1)
C(54)	1937(4)	-197(5)	3335(3)	34(1)
C(10)	486(5)	-1083(4)	7051(3)	32(1)
C(17)	3667(4)	588(3)	7888(3)	16(1)
C(40)	1815(5)	5483(4)	6619(3)	30(1)
C(8)	1439(4)	3887(4)	10317(3)	29(1)
O(28)	408(3)	2724(2)	7527(2)	22(1)
C(53)	2502(4)	722(5)	3800(3)	34(1)
N(4)	1722(3)	4076(3)	7252(2)	18(1)
N(3)	2736(3)	4460(3)	9257(2)	18(1)
N(2)	3947(3)	1551(3)	7024(2)	17(1)
N(34)	1358(3)	592(3)	7008(2)	17(1)
N(32)	2122(3)	3494(3)	9010(2)	17(1)
C(7)	1544(4)	3234(4)	9497(3)	19(1)
C(11)	3580(4)	-406(3)	8085(3)	18(1)
N(33)	4110(3)	636(3)	7223(2)	18(1)
C(22)	-1597(4)	3054(4)	8102(3)	24(1)
C(14)	3240(4)	-2245(4)	8480(3)	28(1)
C(6)	4404(4)	2863(4)	6454(3)	19(1)
C(2)	3276(4)	4184(3)	6596(3)	19(1)
C(51)	1760(4)	449(4)	4950(3)	20(1)
C(24)	-3273(4)	3864(4)	8033(3)	25(1)
C(15)	2875(4)	-1360(4)	8930(3)	28(1)
C(36)	969(4)	2169(4)	9202(3)	19(1)
C(23)	-2684(4)	3124(4)	8242(3)	27(1)
N(35)	1482(3)	156(3)	6216(2)	19(1)
C(9)	876(4)	40(4)	7387(3)	21(1)
C(52)	2411(4)	1049(4)	4608(3)	29(1)
C(47)	3618(4)	4538(3)	8877(3)	17(1)
C(25)	-2755(4)	4558(4)	7704(3)	28(1)
C(26)	-1667(4)	4505(4)	7570(3)	24(1)
C(39)	2238(4)	4585(3)	6861(3)	20(1)
C(4)	4848(4)	4236(4)	5904(3)	31(1)
C(41)	4341(4)	5530(3)	9150(3)	17(1)
C(38)	5676(4)	1410(4)	6412(3)	24(1)
C(12)	3946(4)	-1302(4)	7634(3)	22(1)
C(32)	684(4)	618(3)	8204(3)	19(1)
C(21)	-1079(4)	3747(4)	7763(3)	20(1)
C(42)	5017(4)	5788(4)	8632(3)	22(1)

	x	y	z	E(eq)
C(37)	4652(4)	1884(3)	6638(3)	18(1)
C(57)	1670(4)	851(4)	5809(3)	20(1)
C(16)	3046(4)	-440(4)	8743(3)	24(1)
C(46)	5744(4)	6681(4)	8886(3)	28(1)
C(56)	1188(4)	-480(4)	4468(3)	24(1)
C(43)	4390(4)	6182(3)	9924(3)	22(1)
C(35)	280(4)	1788(4)	9660(3)	22(1)
C(34)	-226(4)	789(4)	9362(3)	23(1)
C(5)	5074(4)	3302(4)	6022(3)	25(1)
C(33)	-7(4)	182(4)	8633(3)	22(1)
C(3)	3953(4)	4695(4)	6205(3)	26(1)
C(13)	3785(4)	-2211(4)	7832(3)	27(1)
Cl(2)	5615(1)	1069(1)	4309(1)	28(1)
Cl(1)	1534(1)	2403(1)	1886(1)	42(1)
Cl(3)	8410(2)	3595(2)	280(1)	60(1)
O(73)	2498(3)	715(3)	564(3)	36(1)
C(45)	5795(4)	7319(4)	9660(3)	31(1)
C(44)	5114(4)	7076(4)	10175(3)	26(1)
C(72)	3464(5)	471(5)	970(5)	54(2)
C(71)	3264(6)	-340(7)	1347(5)	78(3)
O(91)	1983(3)	-1880(3)	5606(2)	37(1)
O(92)	4701(5)	6750(4)	5969(3)	49(1)
O(93)	545(4)	6398(3)	8145(4)	84(2)
C(91)	1758(6)	-2761(5)	4919(5)	65(2)
C(92)	616(7)	-3181(6)	4760(6)	82(3)
C(81)	1672(12)	4087(14)	4198(7)	176(8)
C(82)	2531(14)	4186(13)	4029(10)	55(5)
C(83)	2358(13)	3384(12)	4043(9)	63(5)
O(83)	3092(5)	3392(5)	3472(4)	72(2)

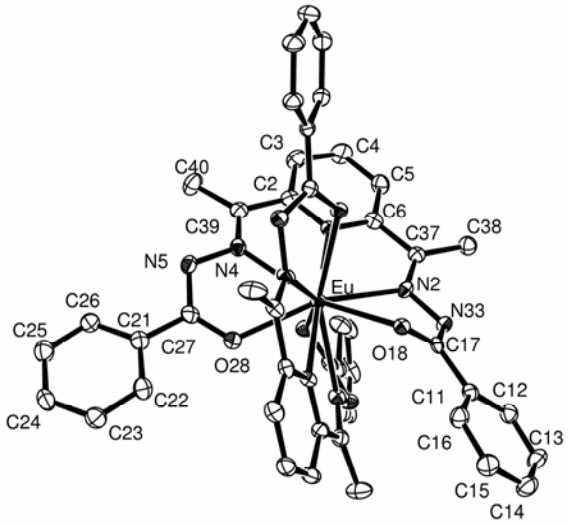

Abb. 5.9: Ellipsoiddarstellung von ***[Eu(H$_2$L1^a)$_2$]$^{3+}$.*** *Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Aus Gründen der Übersicht wurde nur ein Ligand beschriftet.*

5.10 Bis(2,6-diformylpyridin-bis-benzoylhydrazon)terbium(III)chlorid Ethanol-Solvat $Tb(H_2L1^b)_2]Cl_3 \cdot 1½EtOH$

Tabelle 5.19: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von **$Tb(H_2L1^b)_2]Cl_3 \cdot 1½EtOH$**

Summenformel	$C_{45}H_{43}Cl_3N_{10}O_{5.5}Tb$	
M (g/mol)	1077.16	
Temperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Monoklin, $P2_1/n$	
Elementarzelle	a = 12.943(2) Å	α= 90°
	b = 19.098(2) Å	β= 104.648(2)°
	c = 19.787(2) Å	γ = 90°
Volumen	4732(1) $Å^3$	
Berechnete Dichte	1.512 g/cm^3	
Linearer Absorptionskoeffizient	1.720 mm^{-1}	
F(000)	2172	
Kristallgröße	0.49 x 0.48 x 0.46 mm^3	
Theta-Bereich	1.94 – 28.01°	
Indizes	$-11 \le h \le 17$, $-25 \le k \le 25$, $-26 \le l \le 26$	
Zahl der gemessenen Reflexe	28057	
Zahl der unabhängigen Reflexe	10892 [R(int) = 0.0474]	
Absorptionskorrektur	semiempirisch (SADABS)	
Zahl der verfeinerten Parameter	603	
Goof	1.013	
R_1 / wR_2 [$I>2\sigma(I)$]	R_1 = 0.0485, wR_2 = 0.1139	
R_1 / wR_2 (alle Reflexe)	R_1 = 0.0752, wR_2 = 0.1214	
Restelektronendichte	2.614 und -1.320 $e.Å^{-3}$	
Diffraktometer	CCD4, Bruker Smart	
Programm der Strukturlösung	SIR 92[98]	

Tabelle 5.20: Atomkoordinaten($x10^4$) und isotrope Temperaturparameter($Å^2x10^3$) von **$Tb(H_2L1^b)_2]Cl_3 \cdot 1½EtOH$**

	x	y	z	E(eq)
Tb	985(1)	2268(1)	4105(1)	18(1)
O(28)	101(3)	3232(2)	4500(2)	26(1)
O(18)	523(2)	1811(2)	2931(2)	22(1)
O(58)	2639(3)	2803(2)	4128(2)	32(1)
O(48)	864(2)	1265(2)	4773(2)	27(1)
N(32)	-894(3)	1803(2)	4159(2)	22(1)
N(31)	-839(3)	2796(2)	3242(2)	19(1)
N(1)	2844(3)	1764(2)	5045(2)	20(1)
N(34)	1056(3)	3321(2)	3259(2)	19(1)
N(4)	1646(3)	2742(2)	5425(2)	21(1)
N(5)	1020(3)	3243(2)	5620(2)	23(1)
N(33)	-891(3)	1323(2)	4675(2)	27(1)
N(2)	2232(3)	1303(2)	3744(2)	23(1)
N(35)	2065(3)	3560(2)	3260(2)	23(1)
C(32)	-810(4)	3357(2)	2850(2)	21(1)
N(3)	1917(3)	1076(2)	3068(2)	26(1)
C(39)	255(4)	3634(3)	2856(3)	23(1)
C(41)	253(4)	657(2)	5636(3)	23(1)
C(17)	1021(4)	1378(3)	2669(2)	23(1)
C(51)	3988(4)	3432(3)	3775(3)	24(1)
C(37)	-1797(4)	1989(3)	3765(3)	27(1)
C(27)	225(3)	3478(2)	5091(2)	21(1)
C(11)	678(4)	1174(3)	1927(2)	23(1)
C(21)	-465(3)	4057(2)	5228(2)	20(1)
C(46)	1231(4)	334(3)	5880(3)	26(1)
C(25)	-1143(4)	4812(3)	5983(3)	28(1)
C(14)	-35(4)	837(3)	525(3)	33(1)
C(6)	3460(4)	1285(3)	4840(3)	24(1)
C(9)	2512(4)	2559(2)	5877(2)	22(1)
C(23)	-1714(4)	4969(3)	4737(3)	28(1)
C(36)	-1803(4)	2542(3)	3252(3)	23(1)
C(2)	3212(4)	2052(3)	5677(2)	21(1)
C(57)	2859(4)	3250(3)	3728(2)	21(1)
C(42)	-519(4)	597(3)	6016(3)	32(1)
C(35)	-2751(4)	2830(3)	2856(3)	27(1)
C(3)	4221(4)	1893(3)	6112(3)	29(1)
C(47)	96(4)	1091(2)	5009(3)	22(1)
C(33)	-1729(4)	3689(3)	2445(3)	28(1)
C(26)	-507(4)	4254(3)	5903(3)	26(1)
C(7)	3059(4)	1006(3)	4139(3)	30(1)
C(34)	-2715(4)	3395(3)	2448(3)	29(1)
C(22)	-1073(4)	4413(3)	4649(3)	24(1)
C(45)	1455(4)	-49(3)	6488(3)	31(1)
C(56)	4294(4)	4018(3)	3458(3)	32(1)
C(16)	-394(4)	1240(3)	1589(3)	24(1)
C(24)	-1740(4)	5171(3)	5408(3)	32(1)
C(12)	1392(4)	939(3)	1558(3)	34(1)

	x	y	z	E(eq)
C(52)	4764(4)	2987(3)	4178(3)	33(1)
C(15)	-746(4)	1065(3)	891(3)	29(1)
C(4)	4839(4)	1391(3)	5896(3)	34(1)
C(5)	4454(4)	1072(3)	5257(3)	31(1)
C(44)	692(5)	-103(3)	6867(3)	37(1)
C(43)	-277(5)	226(3)	6636(3)	42(2)
C(13)	1031(5)	765(3)	861(3)	38(1)
C(55)	5376(5)	4163(3)	3555(3)	42(2)
C(54)	6125(4)	3722(4)	3952(3)	44(2)
C(53)	5837(4)	3134(3)	4265(3)	43(2)
Cl(1)	7112(1)	1141(1)	2050(1)	37(1)
Cl(2)	2973(1)	-324(1)	2861(1)	35(1)
O(61)	9394(3)	5178(2)	2335(2)	49(1)
C(63)	10106(6)	6251(4)	1959(5)	71(2)
C(62)	9495(5)	5569(4)	1759(3)	49(2)
O(71)	3030(20)	2747(7)	1766(8)	174(10)
C(73)	3160(20)	2554(8)	624(9)	97(8)
C(72)	3540(30)	2484(11)	1346(15)	200(20)
Cl(3)	1941(2)	3832(2)	-36(1)	137(2)

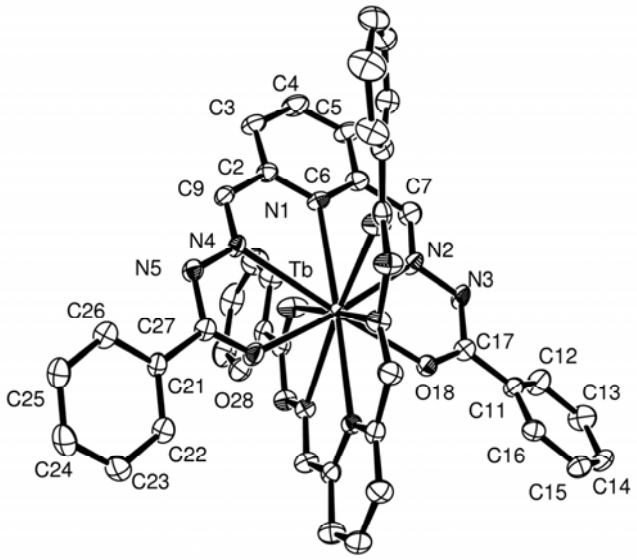

Abb. 5.10: Ellipsoiddarstellung von $[Tb(H_2L1^b)_2]^{3+}$*. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Aus Gründen der Übersicht wurde nur ein Ligand beschriftet.*

5.11 2,6-Diformylpyridin-bis-benzoylhydrazon-trinitrato-lanthan(III) Ethanol-Solvat $[La(H_2L1^b)(NO_3)_3]\cdot EtOH$

Tabelle 5.21: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von $[La(H_2L1^b)(NO_3)_3]\cdot EtOH$

Summenformel	$C_{23}H_{23}LaN_8O_{12}$	
M (g/mol)	742.40	
Temperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Monoklin, $P2_1/n$	
Elementarzelle	a = 8.711(2) Å	α= 90°
	b = 23.209(4) Å	β= 91.095(4)°
	c = 14.262(3) Å	γ = 90°
Volumen	2882.7(9) $Å^3$	
Berechnete Dichte	1.711 g/cm^3	
Linearer Absorptionskoeffizient	1.558 mm^{-1}	
F(000)	1480	
Kristallgröße	0.5 x 0.12 x 0.08 mm^3	
Theta-Bereich	1.68 – 30.55°	
Indizes	$-12\leq h\leq 12$, $-32\leq k\leq 33$, $-20\leq l\leq 20$	
Zahl der gemessenen Reflexe	35440	
Zahl der unabhängigen Reflexe	8782 [R(int) = 0.0311]	
Absorptionskorrektur	semiempirisch (SADABS)	
Zahl der verfeinerten Parameter	603	
Goof	1.013	
R_1 / wR_2 [$I>2\sigma(I)$]	R_1 = 0.0225, wR2 = 0.0516	
R_1 / wR_2 (alle Reflexe)	R_1 = 0.0316, wR_2 = 0.0556	
Restelektronendichte	0.811 und -0.762 $e.Å^{-3}$	
Diffraktometer	CCD4, Bruker Smart	
Programm der Strukturlösung	SHELXS-86[99]	

Tabelle 5.22: Atomkoordinaten($x10^4$) und isotrope Temperaturparameter($Å^2x10^3$) von **$[La(H_2L1^b)(NO_3)_3]\cdot EtOH$**

	x	y	z	E(eq)
La	2524(1)	1434(1)	571(1)	18(1)
C(14)	3042(3)	-1182(1)	3640(2)	41(1)
C(92)	-3283(3)	617(1)	3950(2)	41(1)
C(15)	4512(3)	-1067(1)	3336(2)	39(1)
O(91)	-2607(2)	1164(1)	3762(1)	34(1)
C(29)	-2106(3)	158(1)	4129(2)	56(1)
O(64)	550(2)	1449(1)	1988(1)	28(1)
O(28)	304(1)	2155(1)	403(1)	26(1)
O(62)	-119(1)	947(1)	767(1)	26(1)
N(5)	1492(2)	2752(1)	-593(1)	22(1)
O(18)	2617(2)	545(1)	1605(1)	32(1)
N(4)	2716(2)	2380(1)	-576(1)	20(1)
C(5)	7640(2)	1391(1)	-968(1)	24(1)
N(71)	4530(2)	2127(1)	1927(1)	28(1)
C(21)	-1114(2)	2970(1)	-135(1)	21(1)
N(81)	1814(2)	817(1)	-1312(1)	29(1)
N(3)	5018(2)	271(1)	1275(1)	21(1)
O(84)	2721(2)	595(1)	-695(1)	35(1)
C(7)	6289(2)	811(1)	207(1)	21(1)
N(2)	5058(2)	728(1)	663(1)	20(1)
N(1)	5106(2)	1655(1)	-477(1)	20(1)
O(73)	3509(2)	2367(1)	1417(1)	34(1)
C(26)	-1320(2)	3385(1)	-834(1)	25(1)
C(6)	6337(2)	1303(1)	-435(1)	20(1)
C(24)	-3793(2)	3616(1)	-212(2)	35(1)
N(61)	-424(2)	1133(1)	1572(1)	29(1)
C(22)	-2246(2)	2882(1)	527(1)	26(1)
C(12)	2066(2)	-390(1)	2731(1)	29(1)
C(11)	3537(2)	-278(1)	2409(1)	22(1)
C(2)	5162(2)	2102(1)	-1078(1)	21(1)
C(17)	3693(2)	207(1)	1742(1)	21(1)
C(9)	3842(2)	2493(1)	-1104(1)	23(1)
C(4)	7673(2)	1848(1)	-1588(1)	27(1)
O(72)	4518(2)	1584(1)	1938(1)	42(1)
C(13)	1827(3)	-844(1)	3342(2)	36(1)
C(23)	-3580(2)	3208(1)	490(2)	32(1)
C(27)	266(2)	2597(1)	-83(1)	20(1)
O(83)	1245(2)	1295(1)	-1113(1)	30(1)
C(3)	6410(2)	2210(1)	-1649(1)	26(1)
C(25)	-2673(2)	3705(1)	-870(2)	32(1)
C(16)	4768(2)	-616(1)	2717(1)	29(1)
O(74)	5465(2)	2407(1)	2381(1)	42(1)
O(63)	-1655(2)	1006(1)	1934(1)	61(1)
O(82)	1557(2)	572(1)	-2056(1)	50(1)

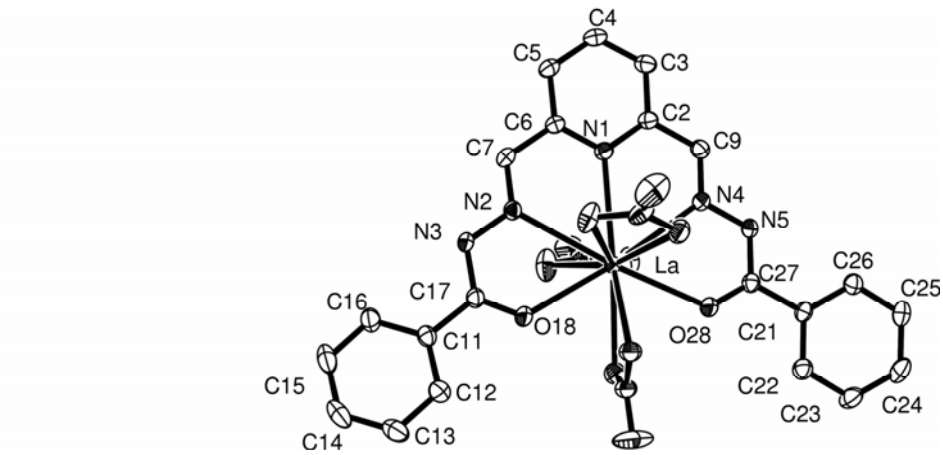

Abb. 5.11: Ellipsoiddarstellung von ***[La(H$_2$L1^b)(NO$_3$)$_3$]****. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Aus Gründen der Übersicht wurden die Nitratoliganden nicht beschriftet.*

5.12 Aqua-chloro-(2,6-diacetylpyridin-bis-benzoylhydrazonato)-ytterbium(III) Dimethylformamid-Solvat [Yb(HL1^a)(H_2O)Cl]·DMF

Tabelle 5.23: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von **[Yb(HL1^a)(H_2O)Cl]·DMF**

Summenformel	$C_{26}H_{26}ClN_6O_4Yb$	
M (g/mol)	695.02	
Temperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Monoklin, $P2_1/n$	
Elementarzelle	a = 8.565(2) Å	α= 90(4)°
	b = 20.862(2) Å	β= 99.75(4)°
	c = 15.339(2) Å	γ = 90(4)°
Volumen	2701.2 (4) $Å^3$	
Berechnete Dichte	1.709 g/cm^3	
Linearer Absorptionskoeffizient	3.604 mm^{-1}	
F(000)	1372	
Kristallgröße	0.3 x 0.3 x 0.1 mm^3	
Theta-Bereich	2.87 – 29.23°	
Indizes	-11≤h≤9, -24≤k≤28, -21≤l≤21	
Zahl der gemessenen Reflexe	16907	
Zahl der unabhängigen Reflexe	7094 [R(int) = 0.1022]	
Absorptionskorrektur	Integration	
Zahl der verfeinerten Parameter	343	
Goof	0.961	
R_1 / wR_2 [I>2σ(I)]	R_1 = 0.0588, wR2 = 0.1019	
R_1 / wR_2 (alle Reflexe)	R_1 = 0.1227, wR_2 = 0.1187	
Restelektronendichte	1.107 und -2.564 $e.Å^{-3}$	
Diffraktometer	IPDS, Stoe	
Programm der Strukturlösung	SIR 92[98]	

Tabelle 5.24: Atomkoordinaten($x10^4$) und isotrope Temperaturparameter($Å^2x10^3$) von **$[Yb(HL1^a)(H_2O)Cl]\cdot DMF$**

	x	y	z	E(eq)
Yb	9274(1)	3821(1)	8357(1)	20(1)
Cl	6999(3)	3010(1)	8158(1)	40(1)
O(32)	11325(7)	4501(3)	8690(3)	28(1)
O(18)	9554(7)	3910(3)	6938(3)	23(1)
O(28)	7690(7)	4672(3)	8346(3)	27(1)
N(1)	10587(9)	3168(3)	9544(4)	24(1)
N(2)	11178(9)	3099(3)	7942(4)	26(2)
N(3)	11541(9)	3134(4)	7095(4)	28(2)
N(4)	8808(8)	4140(3)	9803(4)	20(1)
N(5)	7976(8)	4696(3)	9871(4)	22(1)
C(2)	10265(10)	3240(4)	10377(5)	26(2)
C(3)	10887(11)	2812(5)	11046(5)	32(2)
C(4)	11809(12)	2306(4)	10857(5)	33(2)
C(5)	12161(13)	2243(4)	10022(6)	35(2)
C(6)	11555(10)	2685(4)	9371(5)	24(2)
C(7)	11956(11)	2676(4)	8469(5)	27(2)
C(8)	13147(13)	2230(5)	8228(6)	41(2)
C(9)	9310(9)	3802(5)	10516(4)	24(1)
C(11)	10927(10)	3692(4)	5728(4)	24(2)
C(12)	12090(12)	3354(5)	5384(6)	37(2)
C(13)	12336(12)	3461(6)	4528(6)	44(3)
C(14)	11425(12)	3901(6)	3995(5)	42(3)
C(15)	10254(13)	4239(5)	4316(6)	38(2)
C(16)	10007(12)	4134(4)	5174(5)	30(2)
C(17)	10642(12)	3585(4)	6654(5)	23(2)
C(21)	6515(10)	5535(4)	9005(5)	26(2)
C(22)	6311(11)	5889(4)	8219(6)	31(2)
C(23)	5523(12)	6468(5)	8156(7)	42(2)
C(10)	8981(12)	3972(5)	11408(5)	34(2)
C(24)	4876(14)	6704(5)	8859(7)	45(3)
C(25)	5027(11)	6349(5)	9626(7)	39(2)
C(26)	5820(10)	5771(4)	9703(5)	26(2)
C(27)	7429(10)	4931(4)	9058(4)	22(2)
N(41)	4524(10)	4710(4)	6577(4)	34(2)
O(45)	2711(9)	4940(4)	7437(4)	46(2)
C(42)	5743(13)	4289(7)	6369(6)	54(3)
C(43)	4132(14)	5268(6)	6010(6)	50(3)
C(44)	3799(11)	4605(5)	7247(5)	35(2)

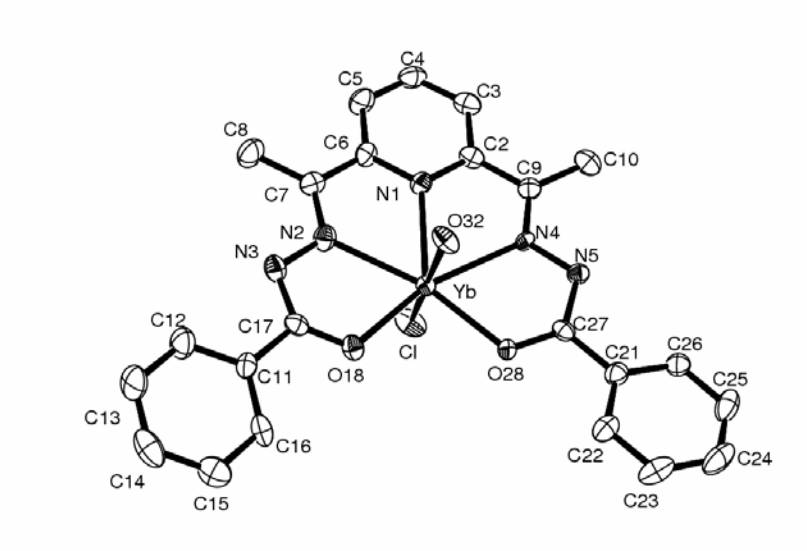

Abb. 5.12: Ellipsoiddarstellung von ***[Tb(HL1^a)Cl(H$_2$O)] DMF****. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit.*

5.13 Aqua-chloro-(2,6-diformylpyridin-benzoylhydrazon-benzoyl-hydrazonato)-ethanol-ytterbium(III)-chlorid Ethanol-Solvat $[Yb(HL1^b)(H_2O)Cl(EtOH)]Cl\cdot EtOH$

Tabelle 5.25: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von $[Yb(HL1^b)(H_2O)Cl(EtOH)]Cl\cdot EtOH$

Summenformel	$C_{25}H_{18}Cl_2N_5O_5Yb$	
M (g/mol)	722.47	
Temperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Monoklin, $P2_1/c$	
Elementarzelle	a = 15.021(2) Å	α= 90°
	b = 13.990(2) Å	β= 110.770(6)°
	c = 14.178(2) Å	γ = 90°
Volumen	2785.8(4) $Å^3$	
Berechnete Dichte	1.723 Mg/m^3	
Linearer Absorptionskoeffizient	3.593 mm^{-1}	
F(000)	1428	
Kristallgröße	0.4 x 0.3 x 0.1 mm^3	
Theta-Bereich	2.86 – 29.20°	
Indizes	$-20\leq h\leq 17$, $-16\leq k\leq 19$, $-15\leq l\leq 19$	
Zahl der gemessenen Reflexe	14303	
Zahl der unabhängigen Reflexe	7321 [R(int) = 0.1042]	
Absorptionskorrektur	Integration	
Zahl der verfeinerten Parameter	371	
Goof	0.996	
R_1 / wR_2 [$I>2\sigma(I)$]	R_1 = 0.0671, wR2 = 0.1163	
R_1 / wR_2 (alle Reflexe)	R_1 = 0.1298, wR_2 = 0.1340	
Restelektronendichte	1.334 und -2.382 $e.Å^{-3}$	
Diffraktometer	IPDS, Stoe	
Programm der Strukturlösung	SIR 92[98]	

Tabelle 5.26: Atomkoordinaten($x10^4$) und isotrope Temperaturparameter($Å^2x10^3$) von **$Yb(HL1^b)(H_2O)Cl(EtOH)]Cl\cdot EtOH$**

	x	y	z	E(eq)
Yb	3162(1)	-4288(1)	3008(1)	17(1)
Cl(1)	3341(2)	-4593(2)	1261(2)	26(1)
O(18)	3096(4)	-5881(4)	3117(5)	24(2)
O(28)	1609(4)	-3943(4)	1896(5)	22(1)
O(31)	2034(5)	-4608(5)	3777(5)	27(2)
O(32)	3623(4)	-3566(4)	4575(5)	24(1)
N(1)	4583(5)	-3257(5)	3258(6)	19(2)
N(2)	4700(5)	-5082(5)	3716(6)	21(2)
N(3)	4729(5)	-6060(5)	3875(6)	18(2)
N(4)	2868(5)	-2615(5)	2358(6)	20(2)
N(5)	1955(5)	-2393(5)	1746(6)	21(2)
C(2)	4486(6)	-2321(6)	3078(7)	20(2)
C(3)	5255(6)	-1699(6)	3379(7)	19(2)
C(4)	6176(6)	-2058(6)	3862(7)	23(2)
C(5)	6268(7)	-3042(6)	4013(7)	25(2)
C(6)	5472(6)	-3622(6)	3723(7)	20(2)
C(7)	5504(6)	-4640(6)	3907(7)	18(2)
C(9)	3526(6)	-1992(6)	2520(7)	22(2)
C(11)	3719(6)	-7446(6)	3615(7)	20(2)
C(12)	4475(7)	-8075(6)	3844(8)	26(2)
C(13)	4337(9)	-9059(7)	3938(9)	37(3)
C(14)	3428(8)	-9402(6)	3787(8)	36(3)
C(15)	2673(8)	-8768(7)	3535(8)	36(3)
C(16)	2802(7)	-7788(7)	3450(7)	25(2)
C(17)	3834(5)	-6407(5)	3522(6)	16(2)
C(21)	380(6)	-2995(6)	760(7)	21(2)
C(22)	-202(7)	-3798(7)	427(8)	33(3)
C(23)	-1067(8)	-3751(8)	-357(9)	37(3)
C(24)	-1389(7)	-2856(8)	-789(8)	33(2)
C(25)	-848(8)	-2043(8)	-426(10)	41(3)
C(26)	45(7)	-2103(7)	351(8)	29(2)
C(27)	1347(6)	-3140(6)	1505(7)	22(2)
C(31)	328(8)	-4647(12)	3334(12)	58(4)
C(32)	1202(7)	-5204(8)	3399(8)	34(2)
O(51)	2796(7)	-1893(6)	4512(7)	57(3)
C(51)	1290(11)	-1188(12)	3680(13)	66(4)
C(52)	1808(9)	-2045(9)	4158(10)	44(3)
Cl(2)	2054(2)	-366(2)	936(2)	29(1)

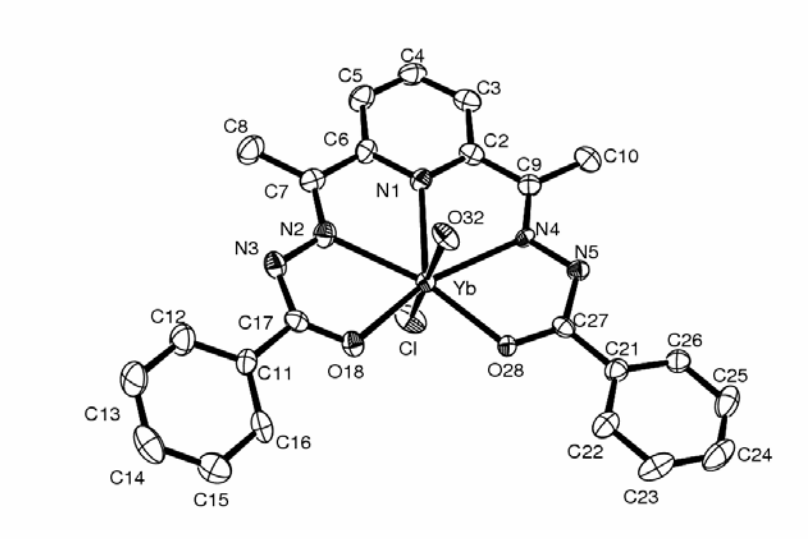

Abb. 5.13: Ellipsoiddarstellung von ***Yb(HL1^{b})(H$_2$O)Cl(EtOH)]$^{+}$****. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit.*

5.14 Bis(bis(2,6-diacetylpyridin-benzoylhydrazonato-4-phenylsemi-carbazon)cer(III)-sulfat Ethanol-Solvat $[Ce(HL3^a)_2]_2(SO_4)\cdot 7EtOH$

Tabelle 5.27: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von **$[Ce(HL3^a)_2]_2(SO_4)\cdot 7EtOH$**

Summenformel	$C_{110}H_{138}Ce_2N_{24}O_{21}S$	
M (g/mol)	2444.74	
Temperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Monoklin, $P2_1/n$	
Elementarzelle	a = 23.169(5) Å	α= 90°
	b = 20.064(5) Å	β= 93.067(5)°
	c = 25.288(5) Å	γ = 90°
Volumen	11739(5) $Å^3$	
Berechnete Dichte	1.383 g/cm^3	
Linearer Absorptionskoeffizient	0.860 mm^{-1}	
F(000)	5064	
Kristallgröße	0.64 x 0.1 x 0.05 mm^3	
Theta-Bereich	1.16 – 27.18°	
Indizes	$-27\leq h\leq 27$, $-23\leq k\leq 23$, $-25\leq l\leq 29$	
Zahl der gemessenen Reflexe	94435	
Zahl der unabhängigen Reflexe	20010 [R(int) = 0.0421]	
Absorptionskorrektur	semiempirisch (SADABS)	
Zahl der verfeinerten Parameter	1475	
Goof	0.979	
R_1 / wR_2 [$I>2\sigma(I)$]	R_1 = 0.0287, wR2 = 0.0674	
R_1 / wR_2 (alle Reflexe)	R_1 = 0.0522, wR_2 = 0.0807	
Restelektronendichte	1.214 und -0.560 $e.Å^{-3}$	
Diffraktometer	CCD4, Bruker Smart	
Programm der Strukturlösung	SIR 97[98]	

Tabelle 5.28: Atomkoordinaten($x10^4$) und isotrope Temperaturparameter($Å^2x10^3$) von **$[Ce(HL3^a)_2]_2(SO_4)\cdot 7EtOH$**

	x	y	z	E(eq)
Ce(1)	5997(1)	9794(1)	2200(1)	22(1)
O(18)	6057(1)	8965(1)	1454(1)	33(1)
O(28)	6773(1)	10505(1)	2537(1)	35(1)
O(48)	5370(1)	10704(1)	1772(1)	31(1)
O(58)	5715(1)	8995(1)	2851(1)	40(1)
N(1)	4913(1)	9955(1)	2612(1)	25(1)
N(2)	5023(1)	9139(1)	1788(1)	25(1)
N(3)	5101(1)	8757(1)	1351(1)	29(1)
N(4)	5807(1)	10739(1)	2934(1)	25(1)
N(5)	6247(1)	11202(1)	3052(1)	26(1)
N(6)	5723(1)	8277(1)	789(1)	30(1)
N(31)	7081(1)	9638(1)	1773(1)	27(1)
N(32)	6321(1)	10486(1)	1305(1)	28(1)
N(33)	5922(1)	10926(1)	1083(1)	32(1)
N(34)	6752(1)	8876(1)	2581(1)	29(1)
N(35)	6583(1)	8446(1)	2975(1)	33(1)
N(36)	5057(1)	11456(1)	1142(1)	27(1)
C(2)	4478(1)	9532(2)	2480(1)	28(1)
C(3)	3988(1)	9482(2)	2775(2)	41(1)
C(4)	3948(2)	9878(2)	3212(2)	51(1)
C(5)	4380(2)	10324(2)	3342(2)	44(1)
C(6)	4860(1)	10350(2)	3040(1)	28(1)
C(7)	5338(1)	10817(2)	3175(1)	27(1)
C(8)	5245(2)	11344(2)	3586(2)	47(1)
C(9)	4534(1)	9110(2)	2006(1)	29(1)
C(10)	4036(2)	8672(2)	1825(2)	47(1)
C(11)	6256(1)	8103(2)	578(1)	27(1)
C(12)	6728(1)	8532(2)	587(1)	31(1)
C(13)	7229(2)	8333(2)	365(1)	38(1)
C(14)	7269(2)	7720(2)	123(2)	44(1)
C(15)	6805(2)	7299(2)	120(2)	48(1)
C(16)	6300(2)	7484(2)	344(1)	40(1)
C(17)	5654(1)	8686(2)	1208(1)	26(1)
C(21)	7232(1)	11465(2)	2903(1)	27(1)
C(22)	7286(2)	11906(2)	3325(1)	38(1)
C(23)	7775(2)	12305(2)	3397(2)	47(1)
C(24)	8202(2)	12273(2)	3047(2)	49(1)
C(25)	8156(2)	11841(2)	2625(2)	46(1)
C(26)	7673(1)	11435(2)	2555(1)	37(1)
C(27)	6721(1)	11021(2)	2822(1)	25(1)
Ce(2)	7714(1)	9999(1)	5930(1)	22(1)
O(78)	8545(1)	9240(1)	6158(1)	33(1)
O(88)	7312(1)	10848(1)	6466(1)	36(1)
O(108)	8322(1)	10383(1)	5181(1)	37(1)
O(118)	6866(1)	9299(1)	5872(1)	37(1)
N(61)	7224(1)	9855(1)	4918(1)	25(1)
N(62)	7946(1)	8915(1)	5305(1)	24(1)

	x	y	z	E(eq)
N(63)	8311(1)	8450(1)	5546(1)	27(1)
N(64)	7060(1)	10966(1)	5485(1)	32(1)
N(65)	6949(1)	11524(1)	5791(1)	36(1)
N(66)	9057(1)	8274(1)	6167(1)	30(1)
N(91)	8230(1)	10234(1)	6957(1)	28(1)
N(92)	8731(1)	10742(1)	6122(1)	31(1)
N(93)	9022(1)	10899(2)	5684(1)	36(1)
N(94)	7394(1)	9338(1)	6779(1)	32(1)
N(95)	6998(1)	8816(1)	6692(1)	37(1)
N(96)	9101(1)	10819(1)	4791(1)	37(1)
C(32)	7245(1)	9994(2)	1356(1)	31(1)
C(33)	7784(2)	9909(2)	1143(2)	46(1)
C(34)	8156(2)	9448(2)	1368(2)	57(1)
C(35)	8001(2)	9095(2)	1797(2)	52(1)
C(36)	7461(1)	9205(2)	1999(1)	32(1)
C(37)	7281(1)	8815(2)	2456(1)	32(1)
C(38)	7716(2)	8367(2)	2744(2)	48(1)
C(39)	6826(1)	10476(2)	1115(1)	35(1)
C(40)	7000(2)	10928(2)	680(2)	76(2)
C(41)	4553(1)	11696(2)	1372(1)	29(1)
C(42)	4446(2)	11616(2)	1902(1)	40(1)
C(43)	3956(2)	11895(2)	2098(2)	53(1)
C(44)	3571(2)	12249(2)	1781(2)	53(1)
C(45)	3671(2)	12323(2)	1253(2)	51(1)
C(46)	4159(2)	12050(2)	1047(2)	41(1)
C(47)	5437(1)	11009(2)	1358(1)	26(1)
C(51)	5772(2)	8048(2)	3422(1)	37(1)
C(52)	6092(2)	7544(2)	3664(1)	48(1)
C(53)	5832(2)	7080(2)	3985(2)	60(1)
C(54)	5253(2)	7125(2)	4064(2)	67(1)
C(55)	4931(2)	7621(2)	3827(2)	68(1)
C(56)	5189(2)	8083(2)	3505(2)	54(1)
C(57)	6036(1)	8541(2)	3056(1)	31(1)
C(62)	7287(1)	9290(2)	4638(1)	28(1)
C(63)	7060(2)	9222(2)	4122(1)	41(1)
C(64)	6780(2)	9752(2)	3881(2)	50(1)
C(65)	6707(2)	10330(2)	4163(1)	46(1)
C(66)	6929(1)	10365(2)	4684(1)	32(1)
C(67)	6833(2)	10963(2)	5009(1)	34(1)
C(68)	6470(2)	11515(2)	4776(2)	49(1)
C(69)	7628(1)	8745(2)	4894(1)	26(1)
C(70)	7587(2)	8058(2)	4663(1)	39(1)
C(71)	9387(1)	8357(2)	6653(1)	29(1)
C(72)	9850(2)	7928(2)	6747(1)	41(1)
C(73)	10163(2)	7940(2)	7224(2)	51(1)
C(74)	10033(2)	8387(2)	7610(2)	48(1)
C(75)	9582(2)	8819(2)	7514(1)	43(1)
C(76)	9257(2)	8813(2)	7040(1)	36(1)

	x	y	z	E(eq)
C(77)	8638(1)	8684(2)	5970(1)	25(1)
C(81)	7017(1)	11935(2)	6681(1)	35(1)
C(82)	7238(2)	11853(2)	7196(2)	42(1)
C(83)	7171(2)	12340(2)	7577(2)	53(1)
C(84)	6873(2)	12908(2)	7440(2)	72(1)
C(85)	6651(2)	12998(2)	6934(2)	78(2)
C(86)	6725(2)	12521(2)	6548(2)	56(1)
C(87)	7101(1)	11396(2)	6288(1)	28(1)
C(92)	8652(1)	10687(2)	7042(1)	32(1)
C(93)	8790(2)	10947(2)	7539(2)	50(1)
C(94)	8480(2)	10745(2)	7960(2)	60(1)
C(95)	8047(2)	10284(2)	7876(2)	49(1)
C(96)	7932(2)	10033(2)	7370(1)	34(1)
C(97)	7480(2)	9525(2)	7264(1)	36(1)
C(98)	7148(2)	9261(2)	7708(2)	62(1)
C(99)	8972(1)	10884(2)	6578(1)	33(1)
C(100)	9555(2)	11212(2)	6656(2)	51(1)
C(101)	8968(2)	10646(2)	4253(1)	40(1)
C(102)	9434(2)	10629(2)	3927(2)	54(1)
C(103)	9337(2)	10464(2)	3397(2)	68(1)
C(104)	8792(2)	10315(2)	3196(2)	65(1)
C(105)	8335(2)	10339(2)	3522(2)	58(1)
C(106)	8419(2)	10506(2)	4051(2)	49(1)
C(107)	8783(1)	10679(2)	5208(1)	31(1)
C(111)	6373(1)	8285(2)	6044(2)	36(1)
C(112)	6101(2)	8300(2)	5547(2)	52(1)
C(113)	5707(2)	7801(2)	5393(2)	69(1)
C(114)	5594(2)	7293(2)	5739(2)	68(1)
C(115)	5866(2)	7278(2)	6230(2)	58(1)
C(116)	6255(2)	7771(2)	6383(2)	43(1)
C(117)	6780(1)	8838(2)	6207(1)	30(1)
O(121)	8962(1)	7596(1)	2047(1)	64(1)
C(122)	9349(3)	7662(3)	2485(2)	98(2)
C(123)	9112(2)	7466(3)	2981(2)	102(2)
O(131)	8944(1)	5430(1)	5741(1)	51(1)
C(132)	9365(2)	4921(2)	5696(2)	49(1)
C(133)	9329(2)	4578(2)	5170(2)	55(1)
O(141)	9208(1)	8357(1)	1197(1)	58(1)
C(142)	8987(2)	8057(2)	721(2)	69(1)
C(143)	9057(2)	8518(3)	271(2)	84(2)
O(151)	9930(1)	8573(1)	4646(1)	51(1)
C(152)	9410(2)	8955(2)	4628(2)	64(1)
C(153)	9012(2)	8775(2)	4169(2)	78(2)
O(161)	6382(2)	5450(2)	4777(2)	115(2)
C(162)	5840(3)	5605(3)	4957(2)	93(2)
C(163)	5717(2)	5285(3)	5453(2)	101(2)
C(173)	7663(3)	6790(4)	5937(3)	142(3)
C(172)	7247(3)	6555(4)	5612(3)	132(3)

	x	y	z	E(eq)
O(171)	7194(5)	5876(6)	5425(4)	94(4)
O(172)	7076(5)	5891(6)	5737(4)	91(4)
C(183)	7215(2)	4131(2)	5803(2)	79(2)
C(182)	7837(2)	4342(2)	5829(2)	77(2)
O(181)	7893(1)	5017(1)	6000(1)	64(1)
O(191)	67(2)	9051(2)	1724(2)	112(2)
C(192)	-272(3)	9602(3)	1954(2)	89(2)
C(193)	-339(4)	10092(3)	1527(3)	142(3)
O(201)	5173(16)	9357(17)	4839(12)	440(20)
C(202)	4743(17)	9530(30)	4627(12)	530(50)
C(203)	4262(4)	9947(5)	4561(4)	69(3)
O(211)	5418(6)	10008(8)	4387(5)	191(6)
C(212)	5250(6)	9391(5)	4321(5)	85(4)
C(213)	4584(6)	9275(6)	4406(5)	90(4)
S	9296(1)	7027(1)	5102(1)	25(1)
O(2)	9457(1)	7096(1)	5669(1)	41(1)
O(3)	9193(1)	6319(1)	4973(1)	35(1)
O(4)	8785(1)	7421(1)	4971(1)	41(1)
O(5)	9781(1)	7252(1)	4796(1)	50(1)

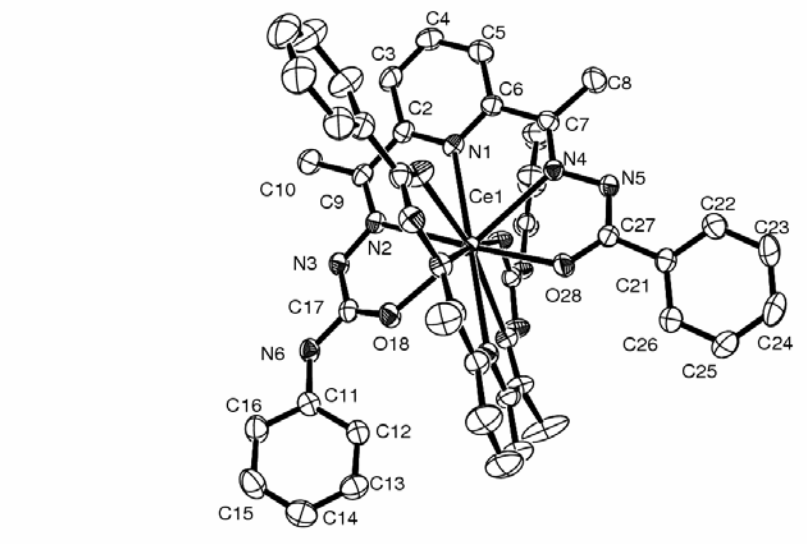

Abb. 5.14: Ellipsoiddarstellung von ***[Ce(HL3^a)$_2$]$^+$****. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Aus Gründen der Übersicht wurde nur ein Ligand beschriftet.*

5.15 Bis(2,6-diacetylpyridin-benzoylhydrazonato-4-phenylsemicarbazon)-europium(III)-chlorid Aceton/iso-Propanol/Wasser-Solvat $[Eu(HL3^{a})_2]Cl\ H_2O{\cdot}½Acetn{\cdot}2^{i}PrOH$

Tabelle 5.29: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von $[Eu(HL3^{a})_2]Cl{\cdot}H_2O{\cdot}½Acetn{\cdot}2^{i}PrOH$

Summenformel	$C_{50.5}H_{55}ClEuN_{12}O_{6.5}$	
M (g/mol)	1121.47	
Temperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Monoklin, $P2_1/c$	
Elementarzelle	a = 11.446(3) Å	α= 90°
	b = 31.751(7) Å	β= 102.778(6)°
	c = 15.632(4) Å	γ = 90°
Volumen	5541(2) $Å^3$	
Berechnete Dichte	1.344 g/cm^3	
Linearer Absorptionskoeffizient	1.237 mm^{-1}	
F(000)	2296	
Kristallgröße	0.68 x 0.08 x 0.01 mm^3	
Theta-Bereich	1.85 – 26.00°	
Indizes	-14≤h≤14, -35≤k≤39, -18≤l≤19	
Zahl der gemessenen Reflexe	48520	
Zahl der unabhängigen Reflexe	10795 [R(int) = 0.1312]	
Absorptionskorrektur	semiempirisch (SADABS)	
Zahl der verfeinerten Parameter	650	
Goof	0.989	
R_1 / wR_2 [I>2σ(I)]	R_1 = 0.0591, wR2 = 0.1156	
R_1 / wR_2 (alle Reflexe)	R_1 = 0.1127, wR_2 = 0.1348	
Restelektronendichte	1.555 und -1.868 $e.Å^{-3}$	
Diffraktometer	CCD4, Bruker Smart	
Programm der Strukturlösung	SIR 92[98]	

Tabelle 5.30: Atomkoordinaten($x10^4$) und isotrope Temperaturparameter($Å^2x10^3$) von **$[Eu(HL3^a)_2]Cl·H_2O·½Acetn·2^iPrOH$**

	x	y	z	E(eq)
Eu	8773(1)	1576(1)	546(1)	17(1)
O(48)	8026(4)	1369(2)	-1037(3)	26(1)
O(18)	10270(4)	1039(1)	445(3)	26(1)
N(31)	8866(4)	920(2)	1657(3)	21(1)
O(28)	7521(3)	1606(2)	1559(3)	23(1)
O(58)	9575(4)	2235(1)	1110(3)	27(1)
N(4)	6725(4)	1936(2)	93(3)	21(1)
N(2)	10490(4)	1765(2)	-249(3)	22(1)
N(32)	7356(4)	926(2)	147(3)	21(1)
C(5)	7240(7)	2730(2)	-1453(5)	38(2)
N(33)	6598(4)	964(2)	-658(3)	26(1)
C(43)	6168(9)	1379(4)	-4358(6)	71(3)
C(4)	8195(7)	2873(3)	-1759(5)	46(2)
N(1)	8468(4)	2200(2)	-620(3)	22(1)
C(42)	5941(7)	1233(3)	-3595(5)	49(2)
C(33)	8862(6)	293(3)	2901(5)	42(2)
N(34)	10309(4)	1586(2)	2010(3)	23(1)
N(5)	5844(4)	1808(2)	530(4)	26(1)
C(40)	6260(6)	290(2)	392(5)	40(2)
C(12)	13405(8)	397(3)	1518(6)	54(2)
C(32)	8065(6)	282(2)	2114(5)	33(2)
C(10)	11663(6)	2260(3)	-902(5)	44(2)
C(22)	6155(6)	1211(2)	2556(4)	31(2)
C(44)	6982(9)	1701(4)	-4353(6)	67(3)
C(35)	9645(5)	935(2)	2460(4)	23(2)
N(36)	6264(5)	1238(2)	-2037(3)	29(1)
C(45)	7558(8)	1875(3)	-3586(6)	57(2)
C(9)	10562(6)	2110(2)	-661(4)	24(2)
C(23)	5505(6)	1075(3)	3152(5)	39(2)
N(35)	11084(4)	1929(2)	2146(3)	23(1)
N(6)	12234(5)	876(2)	494(4)	35(2)
C(31)	8079(5)	600(2)	1499(4)	21(1)
C(38)	7217(6)	617(2)	646(4)	24(2)
C(15)	11503(12)	-130(3)	1433(9)	89(4)
C(14)	12572(14)	-230(4)	1986(8)	83(4)

	x	y	z	E(eq)
C(21)	5646(5)	1487(2)	1901(4)	26(2)
C(24)	4356(7)	1205(3)	3094(5)	50(2)
C(26)	4461(5)	1624(3)	1832(5)	34(2)
C(47)	7019(5)	1202(2)	-1245(4)	23(2)
N(3)	11478(5)	1513(2)	-11(4)	29(1)
C(27)	6384(5)	1648(2)	1284(4)	22(2)
C(2)	9405(6)	2340(2)	-935(4)	28(2)
C(51)	11417(6)	2607(2)	1534(4)	29(2)
C(36)	10446(5)	1309(2)	2632(4)	22(2)
C(17)	11267(5)	1138(2)	312(4)	26(2)
C(7)	6431(5)	2232(2)	-479(4)	28(2)
C(16)	11356(8)	231(3)	926(7)	61(3)
C(6)	7412(5)	2392(2)	-876(4)	25(2)
C(41)	6534(6)	1404(2)	-2802(5)	31(2)
C(34)	9646(6)	627(2)	3089(5)	34(2)
C(8)	5212(6)	2428(3)	-703(5)	43(2)
C(37)	11299(6)	1348(3)	3499(4)	39(2)
C(3)	9289(7)	2681(2)	-1504(5)	37(2)
C(57)	10632(5)	2237(2)	1594(4)	23(2)
C(25)	3845(6)	1488(3)	2449(5)	41(2)
C(46)	7331(6)	1730(3)	-2807(5)	39(2)
C(13)	13500(12)	31(4)	2016(7)	83(4)
C(11)	12309(7)	498(3)	968(5)	41(2)
Cl	3993(2)	701(1)	-1744(1)	39(1)
O(64)	1552(5)	4256(2)	1802(4)	44(2)
O(74)	11767(8)	545(3)	5103(6)	34(2)
C(62)	516(9)	4173(4)	2135(7)	76(3)
C(63)	-532(8)	4149(4)	1404(8)	89(4)
C(71)	12787(11)	135(5)	4215(9)	31(3)
C(72)	12614(12)	234(5)	5143(10)	40(4)
C(61)	662(9)	3851(5)	2779(8)	118(6)
C(73)	13600(12)	180(5)	5827(10)	42(4)
O(81)	3745(4)	1404(2)	-333(3)	40(1)
C(52)	10980(7)	2941(2)	989(5)	40(2)
C(56)	12624(6)	2606(3)	1985(5)	45(2)
C(53)	11741(8)	3265(3)	885(5)	53(2)
C(54)	12924(9)	3266(3)	1316(7)	72(3)

	x	y	z	E(eq)
C(55)	13352(8)	2938(3)	1864(7)	74(3)

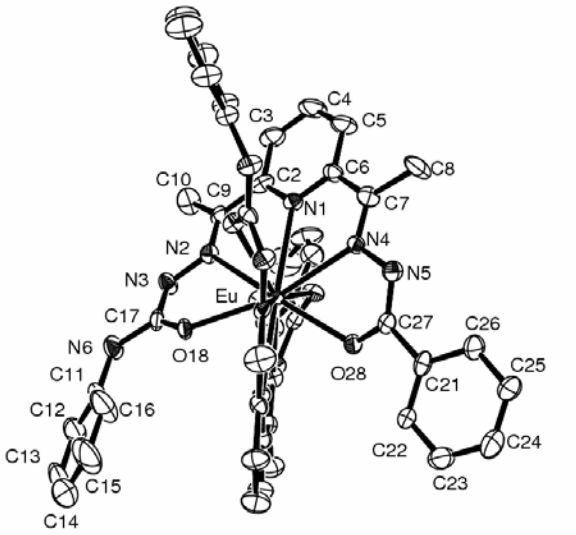

Abb. 5.15: Ellipsoiddarstellung von ***[Eu(HL3^a)$_2$]$^+$****. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Aus Gründen der Übersicht wurde nur ein Ligand beschriftet.*

5.16 Bis(2,6-diacetylpyridin-4-phenylsemicarbazon-4-phenylthiosemicarbazonato)samarium(III)-nitrat Wasser-Solvat $[Sm(HL4^b)_2]NO_3 \cdot H_2O$

Tabelle 5.31: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von $[Sm(HL4^b)_2]NO_3 \cdot H_2O$

Summenformel	$C_{42}H_{36}N_{15}O_6S_2Sm$	
M (g/mol)	1061.33	
Temperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Trigonal, R-3	
Elementarzelle	a = 49.76(5) Å	α= 90°
	b = 49.76(5) Å	β= 90°
	c = 13.85(3) Å	γ = 120°
Volumen	29706(80) $Å^3$	
Berechnete Dichte	1.068 g/cm^3	
Linearer Absorptionskoeffizient	0.997 mm^{-1}	
F(000)	9630	
Kristallgröße	0.5 x 0.1 x 0.08 mm^3	
Theta-Bereich	1.42 – 24.87°	
Indizes	$-58 \le h \le 28$, $0 \le k \le 58$, $0 \le l \le 16$	
Zahl der gemessenen Reflexe	11364	
Zahl der unabhängigen Reflexe	11364 [R(int) = 0.0000]	
Absorptionskorrektur	keine	
Zahl der verfeinerten Parameter	586	
Goof	0.975	
R_1 / wR_2 [$I>2\sigma(I)$]	R_1 = 0.0669, wR2 = 0.1558	
R_1 / wR_2 (alle Reflexe)	R_1 = 0.1261, wR_2 = 0.1894	
Restelektronendichte	1.285 und -0.604 $e.Å^{-3}$	
Diffraktometer	CCD4, Bruker Smart	
Programm der Strukturlösung	SHELXS-86[99]	

Tabelle 5.32: Atomkoordinaten($x10^4$) und isotrope Temperaturparameter($Å^2x10^3$) von **$[Sm(HL4^b)_2]NO_3 \cdot H_2O$**

	x	y	z	E(eq)
Sm	3192(1)	1045(1)	9026(1)	39(1)
N(1)	3511(2)	794(2)	9794(4)	46(2)
N(2)	3251(2)	1025(1)	10942(4)	40(2)
N(3)	3109(2)	1152(2)	11477(4)	43(2)
N(4)	3427(2)	782(2)	7830(4)	42(2)
N(5)	3399(2)	748(2)	6823(4)	45(2)
N(6)	2906(2)	1476(2)	11478(4)	43(2)
N(7)	3118(2)	736(2)	5478(4)	45(2)
N(31)	2852(2)	1305(2)	8442(4)	56(2)
N(32)	3470(3)	1597(2)	8139(5)	72(3)
N(33)	3792(3)	1740(2)	8044(7)	99(4)
N(34)	2606(2)	803(2)	9613(5)	49(2)
N(35)	2473(2)	571(2)	10322(5)	58(2)
N(36)	4249(3)	1774(3)	8585(10)	127(5)
N(37)	2505(2)	163(2)	11032(5)	58(2)
O(18)	3155(1)	1428(1)	10123(3)	47(1)
O(48)	3777(2)	1380(2)	9074(5)	76(2)
S(28)	2943(1)	900(1)	7074(1)	44(1)
S(58)	2821(1)	371(1)	9415(2)	57(1)
C(2)	3657(2)	689(2)	9214(6)	51(2)
C(3)	3845(2)	576(2)	9579(6)	66(3)
C(4)	3877(2)	561(2)	10577(7)	73(3)
C(5)	3719(2)	659(2)	11179(6)	54(2)
C(6)	3542(2)	776(2)	10769(5)	44(2)
C(7)	3382(2)	890(2)	11376(5)	46(2)
C(9)	3607(2)	692(2)	8183(5)	51(2)
C(11)	2804(2)	1677(2)	11121(5)	48(2)
C(12)	2585(2)	1705(2)	11695(7)	66(3)
C(13)	2474(3)	1893(3)	11394(8)	85(3)
C(14)	2565(3)	2053(3)	10536(8)	86(4)
C(15)	2784(3)	2034(2)	9986(7)	66(3)
C(16)	2905(2)	1843(2)	10272(5)	53(2)
C(17)	3058(2)	1363(2)	10981(5)	42(2)
C(21)	3206(2)	580(2)	4811(5)	40(2)
C(22)	3034(2)	482(2)	3941(5)	44(2)
C(23)	3098(2)	315(2)	3260(5)	49(2)
C(24)	3325(2)	241(2)	3424(6)	56(2)
C(25)	3490(2)	333(2)	4286(5)	56(2)
C(26)	3435(2)	498(2)	4964(5)	50(2)
C(27)	3180(2)	788(2)	6462(5)	39(2)
C(32)	2557(3)	1180(2)	8676(6)	60(3)
C(33)	2367(3)	1301(3)	8375(8)	92(4)
C(34)	2523(5)	1577(4)	7797(9)	119(6)
C(35)	2842(4)	1710(3)	7603(9)	100(5)
C(36)	2988(3)	1572(2)	7932(5)	67(3)
C(37)	3326(4)	1721(2)	7792(6)	83(4)
C(39)	2437(2)	916(2)	9339(4)	61(2)

	x	y	z	E(eq)
C(41)	4439(2)	1692(2)	9043(4)	159(7)
C(42)	4370(2)	1400(2)	9373(4)	144(6)
C(43)	4593(2)	1364(2)	9867(4)	195(8)
C(44)	4885(2)	1619(2)	10030(4)	288(15)
C(45)	4954(2)	1911(2)	9699(4)	370(30)
C(46)	4731(2)	1947(2)	9206(4)	294(15)
C(47)	3928(3)	1602(4)	8638(10)	95(4)
C(51)	2364(2)	141(2)	11939(6)	53(2)
C(52)	2270(2)	-134(2)	12453(7)	65(3)
C(53)	2147(2)	-163(2)	13390(8)	76(3)
C(54)	2115(3)	66(3)	13800(7)	90(4)
C(55)	2197(3)	332(3)	13269(8)	83(3)
C(56)	2328(2)	375(2)	12360(7)	67(3)
C(57)	2592(2)	386(2)	10304(6)	50(2)
N(61)	2778(2)	1068(2)	3808(5)	50(2)
O(62)	2687(2)	951(2)	4637(4)	61(2)
O(63)	3028(2)	1104(2)	3495(4)	60(2)
O(64)	2623(2)	1151(2)	3311(4)	66(2)
O(71)	1808(14)	872(11)	1150(60)	510(60)
O(72)	2199(5)	1011(5)	5899(17)	204(14)

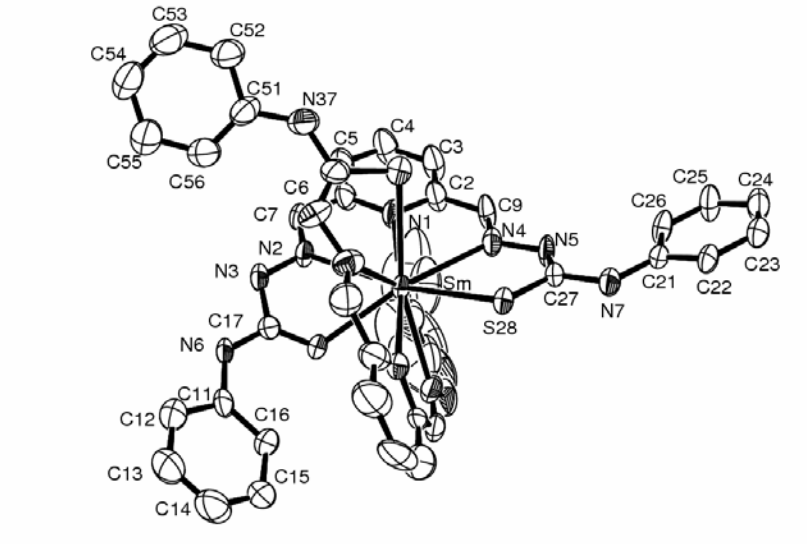

Abb. 5.16: Ellipsoiddarstellung von ***[Sm(HL4^b)$_2$]$^+$****. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Aus Gründen der Übersicht wurde nur ein Ligand beschriftet . vollständig beschriftet.*

5.17 Bis(2,6-diacetylpyridin-4-phenylsemicarbazon-4-phenylthiosemicarbazon)europium(III)-chlorid Ethanol/Wasser-Solvat $[Eu(H_2L4^b)_2]Cl_3 \cdot ½EtOH \cdot ½H_2O$

Tabelle 5.33: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von $[Eu(H_2L4^b)_2]Cl_3 \cdot ½EtOH \cdot ½H_2O$

Summenformel	$C_{44}H_{38}Cl_3EuN_{14}O_3S_2$	
M (g/mol)	1133.31	
Temperatur	153(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Orthorhombisch, Fddd	
Elementarzelle	a = 19.171(6) Å	α= 90°
	b = 33.58(1)Å	β= 90°
	c = 34.27(1) Å	γ = 90°
Volumen	22060(11) $Å^3$	
Berechnete Dichte	1.365 g/cm^3	
Linearer Absorptionskoeffizient	1.407 mm^{-1}	
F(000)	9120	
Kristallgröße	0.35 x 0.25x 0.18 mm^3	
Theta-Bereich	1.36 – 27.56°	
Indizes	$-24 \le h \le 24$, $-39 \le k \le 43$, $-40 \le l \le 44$	
Zahl der gemessenen Reflexe	54010	
Zahl der unabhängigen Reflexe	6364 [R(int) = 0.0356]	
Absorptionskorrektur	keine	
Zahl der verfeinerten Parameter	350	
Goof	1.103	
R_1 / wR_2 [I>2σ(I)]	R_1 = 0.0625, wR2 = 0.1905	
R_1 / wR_2 (alle Reflexe)	R_1 = 0.0844, wR_2 = 0.2180	
Restelektronendichte	1.127 und -1.401 $e.Å^{-3}$	
Diffraktometer	CCD4, Bruker Smart	
Programm der Strukturlösung	SIR 92[98]	

Tabelle 5.34: Atomkoordinaten(x10^4) und isotrope Temperaturparameter(Å^{2}x10^3) von **$[Eu(H_2L4^b)_2]Cl_3 \cdot ½EtOH \cdot ½H_2O$**

	x	y	z	E(eq)
Eu	3750	427(1)	3750	48(1)
S(18)	2928(1)	941(1)	4253(1)	76(1)
N(4)	4499(3)	-78(2)	3292(2)	64(1)
O(28)	3172(3)	-14(1)	3294(1)	64(1)
N(5)	4133(3)	-308(2)	3050(2)	69(2)
C(27)	3428(4)	-274(2)	3074(2)	63(2)
N(2)	4487(3)	942(2)	4212(2)	53(1)
N(1)	5193(3)	402(2)	3770(2)	63(2)
N(3)	4178(3)	1240(2)	4420(2)	64(1)
C(17)	3477(4)	1271(2)	4455(2)	63(2)
N(6)	3286(3)	1585(2)	4666(2)	74(2)
N(7)	3053(4)	-518(2)	2864(2)	74(2)
C(7)	5148(4)	922(2)	4246(2)	72(2)
C(6)	5544(4)	633(3)	4029(3)	82(2)
C(26)	2024(7)	-911(5)	2850(4)	144(6)
C(9)	5165(4)	-110(3)	3297(3)	85(2)
C(21)	2329(5)	-543(3)	2852(2)	89(3)
C(2)	5554(4)	135(3)	3564(3)	92(3)
C(5)	6262(4)	612(4)	4089(4)	126(5)
C(22)	1907(5)	-200(5)	2836(3)	116(4)
C(3)	6279(5)	83(5)	3608(4)	132(6)
C(4)	6616(6)	311(5)	3892(5)	145(5)
Cl(1)	4724(1)	1995(1)	4860(1)	81(1)
C(23)	1205(6)	-226(8)	2815(3)	154(7)
C(24)	911(8)	-596(10)	2803(4)	211(14)
C(25)	1324(11)	-975(10)	2851(7)	235(16)
C(11)	2607(4)	1706(3)	4793(3)	83(2)
C(12)	2541(11)	1783(9)	5186(6)	109(8)
C(13)	1887(17)	1921(14)	5310(8)	169(16)
C(32)	2550(12)	2087(7)	4965(10)	125(9)
C(33)	1942(13)	2258(8)	5085(11)	141(12)
C(14)	1337(8)	1996(7)	5085(7)	172(8)
C(15)	1454(12)	1867(12)	4693(11)	129(16)
C(16)	2090(8)	1706(7)	4530(7)	104(9)
C(35)	1331(13)	1753(12)	4854(15)	146(17)
C(36)	1949(11)	1553(10)	4729(12)	182(19)
O(61)	3750	2121(8)	3750	109(8)
C(62)	4241(12)	2542(9)	4105(8)	119(8)
C(61)	3790(20)	2434(15)	3894(9)	210(20)
Cl(2)	3750	8750	2486(1)	80(1)
O(71)	3750	-1250	3750	263(19)

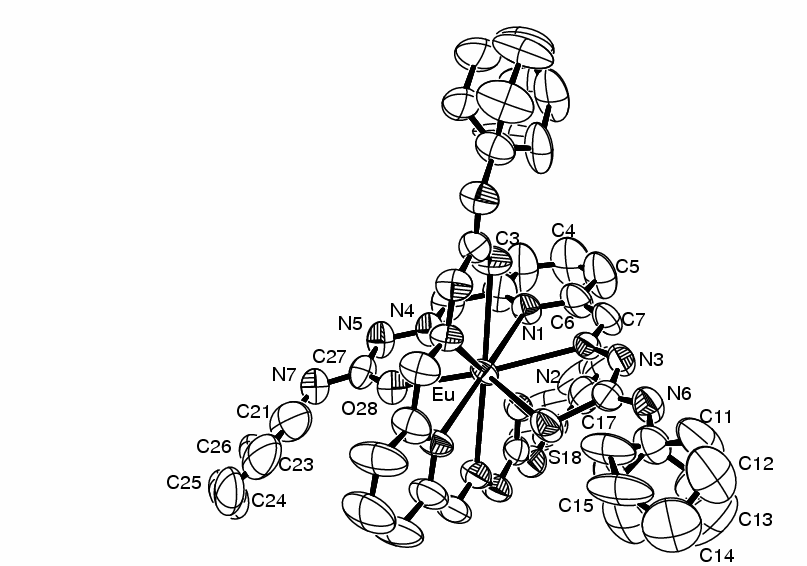

Abb. 5.17: Ellipsoiddarstellung von $[Eu(H_2L4^b)_2]^{3+}$*. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Symmetrieoperation für zweiten Liganden: -x+3/4,y,-z+3/4.*

5.18 Tris-[2-formyl-benzoylhydrazonato)phenyl]phosphan-indium(III) Methanol-Solvat [In(L1P)]·MeOH

Tabelle 5.35: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von **[In(L1P)]·MeOH**

Summenformel	$C_{43}H_{34}InN_6O_4P$	
M (g/mol)	844.55	
Temperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Monoklin, $P2_1/n$	
Elementarzelle	a = 11.123(3) Å	α= 90°
	b = 22.826(7) Å	β= 103.849(6)°
	c = 15.460(5) Å	γ = 90°
Volumen	3811(2) $Å^3$	
Berechnete Dichte	1.472 g/cm^3	
Linearer Absorptionskoeffizient	0.714 mm^{-1}	
F(000)	1720	
Kristallgröße	0.90 x 0.23 x 0.10 mm^3	
Theta-Bereich	1.62 – 30.498°	
Indizes	$-15\leq h\leq 15$, $-32\leq k\leq 29$, $-22\leq l\leq 22$	
Zahl der gemessenen Reflexe	46875	
Zahl der unabhängigen Reflexe	11658 [R(int) = 0.0267]	
Absorptionskorrektur	semiempirisch (SADABS)	
Zahl der verfeinerten Parameter	498	
Goof	1.076	
R_1 / wR_2 [$I>2\sigma(I)$]	R_1 = 0.0323, wR2 = 0.0763	
R_1 / wR_2 (alle Reflexe)	R_1 = 0.0469, wR_2 = 0.0864	
Restelektronendichte	1.204 und -0.765 $e.Å^{-3}$	
Diffraktometer	CCD4, Bruker Smart	
Programm der Strukturlösung	SIR 92[98]	

Tabelle 5.36: Atomkoordinaten($x10^4$) und isotrope Temperaturparameter($Å^2x10^3$) von **[In(L1P)]·MeOH**

	x	y	z	E(eq)
In	5510(1)	1642(1)	7695(1)	21(1)
P	5327(1)	2745(1)	7436(1)	23(1)
O(19)	7124(1)	1095(1)	8089(1)	24(1)
O(39)	4739(1)	1239(1)	8675(1)	29(1)
O(59)	4732(1)	1009(1)	6699(1)	31(1)
N(18)	6941(2)	1867(1)	6808(1)	28(1)
N(19)	7965(2)	1497(1)	6983(1)	32(1)
N(38)	6283(2)	2105(1)	9152(1)	25(1)
N(39)	6037(2)	1757(1)	9828(1)	29(1)
N(58)	3326(2)	1857(1)	7016(1)	26(1)
N(59)	2743(2)	1390(1)	6513(1)	29(1)
C(11)	5133(2)	2906(1)	6263(1)	27(1)
C(12)	4236(2)	3297(1)	5819(2)	29(1)
C(13)	4147(2)	3440(1)	4932(2)	37(1)
C(14)	4959(3)	3204(1)	4487(2)	50(1)
C(15)	5862(3)	2815(1)	4919(2)	54(1)
C(16)	5947(2)	2649(1)	5802(2)	38(1)
C(17)	6913(3)	2220(1)	6162(2)	49(1)
C(18)	7953(2)	1132(1)	7636(1)	22(1)
C(21)	9029(2)	724(1)	7868(1)	23(1)
C(22)	9006(2)	260(1)	8438(2)	32(1)
C(23)	10003(2)	-121(1)	8671(2)	41(1)
C(24)	11030(2)	-42(1)	8324(2)	40(1)
C(25)	11063(2)	421(1)	7754(2)	37(1)
C(26)	10072(2)	803(1)	7523(1)	29(1)
C(31)	6702(2)	3144(1)	7994(1)	26(1)
C(32)	7138(2)	3604(1)	7561(2)	40(1)
C(33)	8162(3)	3928(1)	7984(2)	49(1)
C(34)	8763(2)	3799(1)	8849(2)	43(1)
C(35)	8354(2)	3342(1)	9292(2)	32(1)
C(36)	7327(2)	3004(1)	8876(1)	24(1)
C(37)	6968(2)	2550(1)	9436(1)	26(1)
C(38)	5244(2)	1335(1)	9501(1)	26(1)
C(41)	4900(2)	938(1)	10166(1)	28(1)
C(42)	5627(2)	896(1)	11035(2)	34(1)
C(43)	5331(3)	492(1)	11620(2)	39(1)
C(44)	4302(3)	137(1)	11351(2)	41(1)
C(45)	3571(3)	186(1)	10498(2)	43(1)
C(46)	3867(2)	581(1)	9900(2)	37(1)
C(51)	4046(2)	3082(1)	7785(1)	26(1)
C(52)	4200(2)	3631(1)	8198(2)	37(1)
C(53)	3244(3)	3893(1)	8490(2)	42(1)
C(54)	2119(2)	3610(1)	8366(2)	40(1)
C(55)	1934(2)	3074(1)	7936(2)	33(1)
C(56)	2891(2)	2794(1)	7649(1)	27(1)
C(57)	2560(2)	2238(1)	7193(1)	29(1)
C(58)	3555(2)	1003(1)	6378(1)	25(1)

C(61)	3033(2)	522(1)	5751(1)	25(1)
C(62)	1802(2)	535(1)	5267(2)	34(1)
C(63)	1359(2)	111(1)	4626(2)	36(1)
C(64)	2122(2)	-333(1)	4470(1)	31(1)
C(65)	3339(2)	-351(1)	4956(1)	31(1)
C(66)	3796(2)	73(1)	5595(1)	27(1)
O(71)	4804(2)	2520(1)	10918(2)	59(1)
C(72)	4620(3)	3005(1)	10329(2)	57(1)

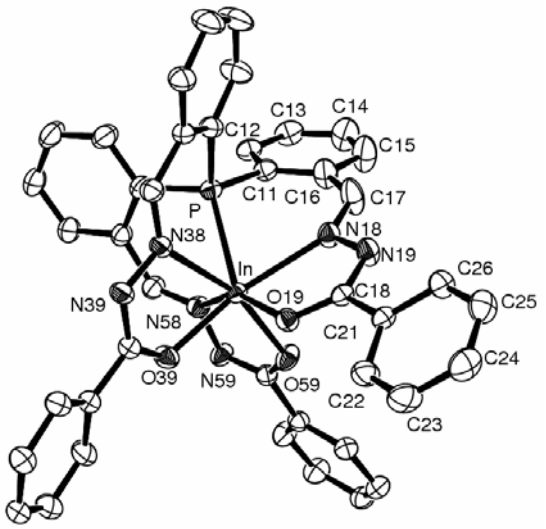

*Abb. 5.18: Ellipsoiddarstellung von **[In(L1P)]**. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Aus Gründen der Übersicht wurde auf die Beschriftung der Kohlenstoffatome in 2 Ligand-Armen verzichtet.*

5.19 Tris-[2-(formyl-benzoylhydrazon)phenyl]phosphan-cobalt(III)-chlorid Ethanol-Solvat $[Co(H_3L1P)]Cl_3 \cdot 2EtOH$

Tabelle 5.37: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von **$[Co(H_3L1P)]Cl_3 \cdot 2EtOH$**

Summenformel	$C_{46}H_{45}Cl_3CoN_6O_5P$	
M (g/mol)	958.13	
Temperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Monoklin, C2/c	
Elementarzelle	a = 24.23(2) Å	α= 90°
	b = 10.963(3) Å	β= 93.52(5)°
	c = 35.10(2) Å	γ = 90°
Volumen	9308(8) $Å^3$	
Berechnete Dichte	1.367 g/cm^3	
Linearer Absorptionskoeffizient	0.714 mm^{-1}	
F(000)	3968	
Kristallgröße	0.1 x 0.1 x 0.1 mm^3	
Theta-Bereich	2.11 – 26.87°	
Indizes	$-30 \le h \le 30$, $-13 \le k \le 12$, $-44 \le l \le 42$	
Zahl der gemessenen Reflexe	23298	
Zahl der unabhängigen Reflexe	9576 [R(int) = 0.0676]	
Absorptionskorrektur	keine	
Zahl der verfeinerten Parameter	564	
Goof	0.994	
R_1 / wR_2 [$I>2\sigma(I)$]	R_1 = 0.0647, wR2 = 0.1666	
R_1 / wR_2 (alle Reflexe)	R_1 = 0.0969, wR_2 = 0.1907	
Restelektronendichte	0.714 und -1.000 $e.Å^{-3}$	
Diffraktometer	IPDS, Stoe	
Programm der Strukturlösung	SIR 92[98]	

Tabelle 5.38: Atomkoordinaten($x10^4$) und isotrope Temperaturparameter($Å^2x10^3$) von **$[Co(H_3L1P)]Cl_3 \cdot 2EtOH$**

	x	y	z	E(eq)
Co	1294(1)	459(1)	6382(1)	39(1)
P	780(1)	363(1)	5803(1)	40(1)
O(59)	1788(1)	-855(2)	6669(1)	44(1)
N(58)	766(1)	-1313(2)	6431(1)	42(1)
O(39)	1927(1)	1709(2)	6530(1)	46(1)
C(56)	-116(1)	-837(3)	6104(1)	43(1)
C(31)	986(1)	-903(3)	5511(1)	42(1)
N(59)	1061(1)	-2121(3)	6669(1)	45(1)
C(58)	1583(1)	-1820(3)	6780(1)	40(1)
C(53)	-911(2)	594(4)	5705(1)	57(1)
C(36)	1550(1)	-1159(3)	5479(1)	44(1)
C(41)	2899(1)	1969(3)	6610(1)	45(1)
N(18)	802(1)	2317(3)	6349(1)	42(1)
C(52)	-356(2)	822(4)	5671(1)	50(1)
O(19)	955(1)	749(2)	6904(1)	45(1)
C(38)	2394(1)	1448(3)	6421(1)	43(1)
C(44)	3816(2)	2925(4)	7019(1)	54(1)
C(37)	2010(1)	-490(3)	5670(1)	47(1)
C(33)	753(2)	-2677(3)	5119(1)	51(1)
C(32)	594(2)	-1675(3)	5332(1)	47(1)
C(65)	2021(2)	-4399(4)	7445(1)	58(1)
C(66)	1687(2)	-3669(4)	7207(1)	53(1)
N(39)	2446(1)	690(3)	6124(1)	47(1)
C(61)	1907(1)	-2650(3)	7036(1)	43(1)
C(51)	50(1)	112(3)	5861(1)	41(1)
C(21)	738(1)	2097(3)	7395(1)	41(1)
C(18)	809(1)	1793(3)	6992(1)	41(1)
N(38)	1965(1)	170(3)	5966(1)	44(1)
C(34)	1303(2)	-2897(3)	5076(1)	52(1)
C(35)	1694(2)	-2144(3)	5251(1)	52(1)
C(62)	2461(2)	-2381(4)	7110(1)	55(1)
C(14)	781(2)	3828(4)	5059(1)	57(1)
C(11)	805(1)	1727(3)	5511(1)	43(1)
C(13)	873(2)	2699(4)	4896(1)	55(1)
C(22)	746(2)	3275(3)	7537(1)	50(1)
N(19)	726(1)	2659(3)	6722(1)	43(1)
C(55)	-681(1)	-1080(4)	6116(1)	52(1)
C(45)	3317(2)	3546(4)	7010(1)	57(1)
C(15)	716(2)	3913(4)	5446(1)	55(1)
C(17)	689(2)	3107(3)	6089(1)	48(1)
C(54)	-1073(2)	-367(4)	5925(1)	59(1)
C(42)	3407(1)	1371(3)	6620(1)	48(1)
C(43)	3860(2)	1846(4)	6825(1)	52(1)
C(12)	881(1)	1659(3)	5123(1)	47(1)
C(63)	2795(2)	-3118(4)	7354(1)	61(1)
C(16)	741(1)	2890(3)	5681(1)	45(1)
C(24)	703(2)	2528(4)	8172(1)	67(1)

	x	y	z	E(eq)
C(26)	706(2)	1136(4)	7651(1)	51(1)
C(25)	684(2)	1345(4)	8036(1)	63(1)
C(23)	733(2)	3474(4)	7922(1)	63(1)
C(46)	2857(2)	3065(3)	6809(1)	51(1)
C(57)	259(1)	-1586(3)	6344(1)	46(1)
C(64)	2569(2)	-4129(4)	7521(1)	55(1)
O(96)	2845(2)	-3096(6)	5790(1)	143(2)
C(95)	2649(7)	-3257(14)	6157(2)	226(8)
C(94)	2225(10)	-4170(13)	6168(4)	306(15)
O(101)	2295(3)	-115(6)	4785(2)	168(3)
C(102)	2727(3)	655(8)	4752(3)	135(3)
C(100)	2568(4)	1767(8)	4523(3)	170(4)
Cl(1)	347(1)	-4542(1)	6758(1)	53(1)
Cl(2)	3487(1)	-582(3)	5812(1)	166(1)
Cl(3)	5000	2037(6)	7500	239(2)
Cl(4)	-305(2)	5655(5)	5920(1)	152(2)

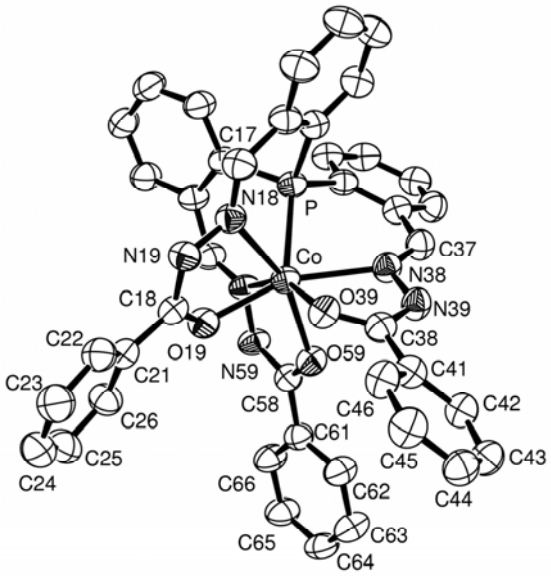

Abb. 5.19: Ellipsoiddarstellung von ***[Co(H$_3$L1P)]$^{3+}$****. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Aus Gründen der Übersicht wurde auf die Beschriftung einiger Kohlenstoffatome verzichtet.*

5.20 Bis-[2-(formyl-benzoylhydrazonato)phenyl]-[2-(formylbenzoyl-hydrazon)phenyl]phosphan-nickel(II) Chloroform-Solvat [Ni(HL1P)]·2CHCl$_3$

Tabelle 5.39: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von **[Ni(HL1P)]·2CHCl$_3$**

Summenformel	$C_{44}H_{33}Cl_6N_6NiO_3P$	
M (g/mol)	996.14	
Temperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Monoklin, $P2_1/c$	
Elementarzelle	a = 13.036(3) Å	α= 90°
	b = 19.126(2) Å	β= 109.90(2)°
	c = 18.934(7) Å	γ = 90°
Volumen	4439(2) Å^3	
Berechnete Dichte	1.491 g/cm^3	
Linearer Absorptionskoeffizient	0.882 mm^{-1}	
F(000)	2032	
Kristallgröße	0.25 x 0.14 x 0.1 mm^3	
Theta-Bereich	2.13 – 26.87°	
Indizes	-12≤h≤16, -24≤k≤21, -23≤l≤23	
Zahl der gemessenen Reflexe	22402	
Zahl der unabhängigen Reflexe	9285 [R(int) = 0.1349]	
Absorptionskorrektur	keine	
Zahl der verfeinerten Parameter	550	
Goof	1.042	
R_1 / wR_2 [I>2σ(I)]	R_1 = 0.0932, wR2 = 0.1765	
R_1 / wR_2 (alle Reflexe)	R_1 = 0.1730, wR_2 = 0.2105	
Restelektronendichte	0.562 und -0.664 e.Å^{-3}	
Diffraktometer	IPDS, Stoe	
Programm der Strukturlösung	SHELXS-97[99]	

Tabelle 5.40: Atomkoordinaten($x10^4$) und isotrope Temperaturparameter($Å^2x10^3$) von **$[Ni(HL1P)]\cdot 2CHCl_3$**

	x	y	z	E(eq)
Ni	8543(1)	766(1)	690(1)	29(1)
P	8367(2)	1694(1)	69(1)	30(1)
C(11)	8644(5)	1629(4)	-800(3)	31(1)
C(12)	8656(6)	2221(4)	-1212(4)	39(2)
C(13)	8840(7)	2177(4)	-1895(4)	43(2)
C(14)	8990(6)	1530(4)	-2167(4)	43(2)
C(15)	8987(6)	932(4)	-1766(3)	42(2)
C(16)	8818(5)	958(4)	-1065(3)	32(2)
C(17)	8832(6)	293(4)	-700(3)	33(2)
N(8)	8715(5)	180(3)	-42(3)	30(1)
N(9)	8653(5)	-543(3)	117(3)	31(1)
C(18)	8392(6)	-594(4)	743(3)	32(2)
O(19)	8247(4)	-81(2)	1105(2)	35(1)
C(21)	8278(5)	-1315(3)	1017(3)	30(2)
C(22)	8426(6)	-1917(4)	667(4)	38(2)
C(23)	8329(7)	-2564(4)	958(4)	44(2)
C(24)	8032(7)	-2619(4)	1601(4)	42(2)
C(25)	7846(6)	-2022(4)	1945(4)	39(2)
C(26)	7973(6)	-1362(4)	1663(3)	36(2)
C(31)	6920(6)	1839(4)	-163(4)	36(2)
C(32)	6229(6)	1981(4)	-888(4)	44(2)
C(33)	5095(6)	2073(4)	-1025(4)	44(2)
C(34)	4704(7)	2042(4)	-450(4)	49(2)
C(35)	5404(6)	1902(4)	284(4)	43(2)
C(36)	6506(6)	1795(4)	429(3)	33(2)
C(37)	7205(6)	1662(4)	1203(3)	35(2)
N(38)	8081(5)	1307(3)	1374(3)	31(1)
N(39)	8665(5)	1227(3)	2137(3)	31(1)
C(38)	9646(6)	935(3)	2268(3)	33(2)
O(39)	10081(4)	778(3)	1783(2)	36(1)
C(41)	10252(6)	783(4)	3083(3)	37(2)
C(42)	11335(7)	603(3)	3329(4)	43(2)
C(43)	11875(8)	498(4)	4098(4)	55(2)
C(44)	11359(8)	557(4)	4609(4)	53(2)
C(45)	10266(8)	724(4)	4362(4)	56(2)
C(46)	9707(7)	848(4)	3607(3)	47(2)
C(51)	9018(6)	2495(3)	521(3)	32(2)
C(52)	8356(7)	3079(4)	495(4)	41(2)
C(53)	8803(7)	3707(4)	814(4)	43(2)
C(54)	9923(8)	3763(4)	1156(4)	47(2)
C(55)	10593(6)	3204(4)	1196(4)	38(2)
C(56)	10147(6)	2550(4)	898(3)	33(2)
C(57)	10882(6)	1956(4)	965(3)	34(2)
N(58)	11889(5)	1989(3)	1381(3)	37(1)
N(59)	12524(5)	1424(3)	1340(3)	36(1)
C(58)	13578(6)	1390(4)	1802(4)	39(2)
O(59)	13932(5)	1790(3)	2345(3)	50(2)

	x	y	z	E(eq)
C(61)	14291(6)	871(4)	1611(4)	39(2)
C(62)	13918(7)	380(4)	1040(5)	49(2)
C(63)	14608(7)	-69(5)	871(5)	57(2)
C(64)	15698(8)	-32(5)	1240(5)	55(2)
C(65)	16100(7)	441(5)	1828(5)	55(2)
C(66)	15393(6)	888(4)	2013(4)	46(2)
C(71)	14235(10)	3243(5)	1746(5)	71(3)
Cl(71)	13875(4)	3985(1)	2132(2)	105(1)
Cl(72)	13535(3)	3173(2)	785(1)	86(1)
Cl(73)	15652(3)	3231(2)	1935(2)	100(1)
C(81)	14757(10)	5934(5)	1075(5)	72(3)
Cl(81)	14855(4)	6112(2)	207(2)	129(2)
Cl(82)	13389(3)	5782(2)	993(2)	108(1)
Cl(83)	15556(3)	5196(2)	1492(2)	93(1)

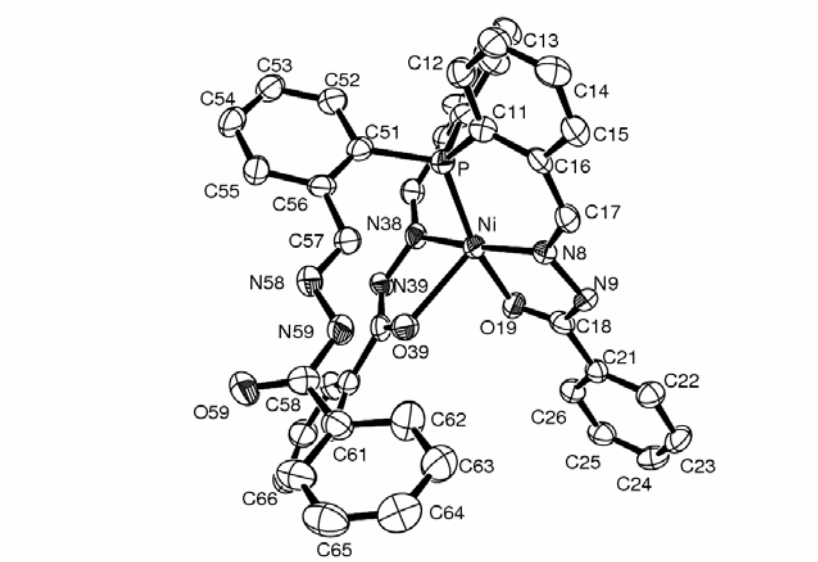

*Abb. 5.20: Ellipsoiddarstellung von **[Ni(HL1P)]**. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Aus Gründen der Übersicht wurde auf die Beschriftung einiger Kohlenstoffatome verzichtet.*

5.21 Bis-[2-(formyl-benzoylhydrazonato)phenyl]-[2-(formyl-benzoyl-hydrazon)phenyl]phosphan-kupfer(II) Chloroform-Solvat $[Cu(HL1P)]\cdot 2CHCl_3$

Tabelle 5.41: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von **$[Cu(HL1P)]\cdot 2CHCl_3$**

Summenformel	$C_{44}H_{33}Cl_6CuN_6O_3P$	
M (g/mol)	1000.97	
Temperatur	200(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Monoklin, $P2_1/c$	
Elementarzelle	a = 11.702(2) Å	α= 90°
	b = 17.108(2) Å	β= 91.596(9)°
	c = 22.090(3) Å	γ = 90°
Volumen	4420.8(8) $Å^3$	
Berechnete Dichte	1.491 g/cm^3	
Linearer Absorptionskoeffizient	0.941 mm^{-1}	
F(000)	2036	
Kristallgröße	0.3 x 0.1 x 0.02 mm^3	
Theta-Bereich	2.50 – 26.81°	
Indizes	$-14\leq h\leq 14$, $-21\leq k\leq 21$, $-27\leq l\leq 23$	
Zahl der gemessenen Reflexe	25169	
Zahl der unabhängigen Reflexe	9267 [R(int) = 0.1279]	
Absorptionskorrektur	keine	
Zahl der verfeinerten Parameter	586	
Goof	0.858	
R_1 / wR_2 [$I>2\sigma(I)$]	R_1 = 0.0636, wR2 = 0.1323	
R_1 / wR_2 (alle Reflexe)	R_1 = 0.1482, wR_2 = 0.1693	
Restelektronendichte	0.562 und -0.664 $e.Å^{-3}$	
Diffraktometer	IPDS, Stoe	
Programm der Strukturlösung	SHELXS-97[99]	

Tabelle 5.42: Atomkoordinaten($x10^4$) und isotrope Temperaturparameter($Å^2x10^3$) von **$[Cu(HL1P)]\cdot 2CHCl_3$**

	x	y	z	E(eq)
Cu	9379(1)	221(1)	3656(1)	38(1)
P	11109(1)	532(1)	3338(1)	36(1)
C(11)	11077(4)	-28(3)	2643(2)	43(1)
C(12)	11982(5)	-510(3)	2483(3)	56(1)
C(13)	11954(6)	-904(4)	1933(3)	78(2)
C(14)	11065(7)	-810(4)	1536(3)	84(2)
C(15)	10153(5)	-315(4)	1672(3)	71(2)
C(16)	10133(4)	62(3)	2235(2)	48(1)
C(17)	9145(4)	553(4)	2348(2)	52(1)
N(8)	8789(3)	690(3)	2884(2)	46(1)
N(9)	7881(3)	1206(3)	2950(2)	52(1)
C(18)	7819(4)	1433(3)	3524(2)	47(1)
O(19)	8478(3)	1214(2)	3965(1)	47(1)
C(21)	6940(4)	2040(4)	3640(3)	56(2)
C(22)	5989(5)	2153(5)	3259(3)	80(2)
C(23)	5218(7)	2744(6)	3365(6)	117(4)
C(24)	5408(8)	3243(6)	3852(6)	122(5)
C(25)	6352(7)	3151(4)	4230(4)	97(3)
C(26)	7107(5)	2537(4)	4131(3)	66(2)
C(31)	12261(4)	178(3)	3818(2)	40(1)
C(32)	13392(4)	376(3)	3695(2)	53(1)
C(33)	14302(4)	83(4)	4036(3)	68(2)
C(34)	14107(5)	-415(4)	4503(3)	71(2)
C(35)	12992(4)	-607(4)	4657(3)	57(1)
C(36)	12060(4)	-327(3)	4321(2)	41(1)
C(37)	10961(4)	-616(3)	4524(2)	39(1)
N(38)	9954(3)	-489(2)	4291(2)	38(1)
N(39)	9076(3)	-943(3)	4543(2)	45(1)
C(38)	8136(4)	-879(3)	4197(2)	46(1)
O(39)	8031(3)	-442(2)	3730(2)	54(1)
C(41)	7143(4)	-1375(3)	4343(2)	51(1)
C(42)	6363(4)	-1574(4)	3890(2)	56(1)
C(43)	5446(5)	-2060(4)	3994(3)	72(2)
C(44)	5296(6)	-2344(6)	4570(4)	103(3)
C(45)	6028(6)	-2121(6)	5027(4)	117(3)
C(46)	6964(5)	-1639(5)	4924(3)	88(2)
C(51)	11497(4)	1507(3)	3097(2)	36(1)
C(52)	11968(4)	1629(3)	2531(2)	49(1)
C(53)	12235(4)	2357(3)	2325(2)	54(1)
C(54)	12041(5)	3007(3)	2685(3)	59(2)
C(55)	11594(5)	2903(3)	3250(2)	51(1)
C(56)	11306(4)	2167(3)	3466(2)	43(1)
C(57)	10813(4)	2082(3)	4062(2)	46(1)
N(58)	10494(5)	2676(3)	4356(2)	70(2)
N(59)	10106(4)	2517(3)	4926(2)	66(1)
C(58)	9426(6)	3056(4)	5196(3)	71(2)
O(59)	9104(5)	3659(3)	4945(2)	105(2)

	x	y	z	E(eq)
C(61)	9030(6)	2834(4)	5800(3)	63(2)
C(62)	7945(5)	3056(4)	5956(3)	69(2)
C(63)	7524(6)	2841(5)	6508(3)	77(2)
C(64)	8181(6)	2430(4)	6919(3)	78(2)
C(65)	9271(6)	2212(4)	6779(3)	74(2)
C(66)	9681(6)	2417(4)	6219(3)	70(2)
C(71)	5905(5)	357(4)	2099(3)	73(2)
Cl(71)	6579(2)	-9(2)	1459(1)	107(1)
Cl(72)	4739(2)	938(2)	1902(1)	127(1)
Cl(73)	5453(2)	-422(1)	2545(1)	104(1)
C(81)	2254(10)	400(7)	370(5)	51(3)
Cl(81)	1793(4)	805(3)	-320(2)	94(1)
Cl(82)	2183(5)	1282(4)	898(3)	76(2)
Cl(83)	3687(3)	191(3)	356(3)	104(1)
C(91)	2507(13)	989(9)	148(6)	76(4)
Cl(91)	1919(9)	1004(5)	940(4)	118(4)
Cl(92)	1708(3)	145(3)	-36(2)	89(1)
Cl(93)	3940(4)	800(4)	82(3)	126(2)

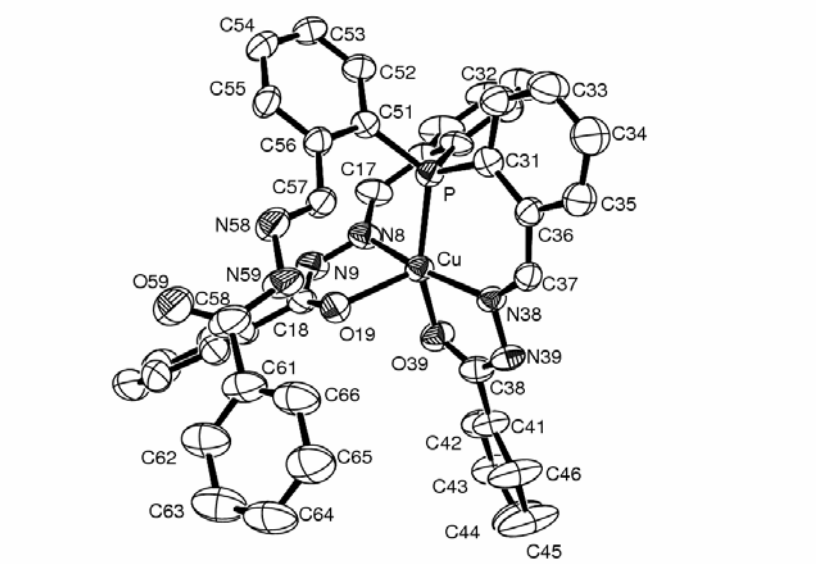

*Abb. 5.21: Ellipsoiddarstellung von **[Cu(HL1P)]**. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Aus Gründen der Übersicht wurde auf die Beschriftung einiger Kohlenstoffatome verzichtet.*

5.22 2-Formylphenyl(benzoylhydrazonato)-κ^3C,N,O-2,3 Dihydro-3-ethoxy-1-(2-formylphenylbenzoylhydrazonato)-benzazaphosphol-κ^3P,N,O-2-benzamid-cobalt(III) [Co(L1P*OET)]

Tabelle 5.43: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von **[Co(L1P*OET)]**

Summenformel	$C_{44}H_{36}CoN_6O_4P$	
M (g/mol)	802.69	
Temperatur	293(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Monoklin, $P2_1/n$	
Elementarzelle	a = 10.671(2) Å	α= 90°
	b = 21.150(2) Å	β= 97.122(8)°
	c = 17.171(2) Å	γ = 90°
Volumen	3845.5(6) $Å^3$	
Berechnete Dichte	1.386 g/cm^3	
Linearer Absorptionskoeffizient	0.540 mm^{-1}	
F(000)	2036	
Kristallgröße	0.66 x 0.12 x 0.10 mm^3	
Theta-Bereich	1.53 – 26.80°	
Indizes	$-12\leq h\leq 13$, $-24\leq k\leq 26$, $-21\leq l\leq 21$	
Zahl der gemessenen Reflexe	19629	
Zahl der unabhängigen Reflexe	8118 [R(int) = 0.1204]	
Absorptionskorrektur	keine	
Zahl der verfeinerten Parameter	506	
Goof	0.784	
R_1 / wR_2 [$I>2\sigma(I)$]	R_1 = 0.0474, wR2 = 0.1058	
R_1 / wR_2 (alle Reflexe)	R_1 = 0.1375, wR_2 = 0.1478	
Restelektronendichte	0.562 und -0.664 $e.Å^{-3}$	
Diffraktometer	IPDS, Stoe	
Programm der Strukturlösung	SIR 92[98]	

Tabelle 5.44: Atomkoordinaten($x10^4$) und isotrope Temperaturparameter($Å^2x10^3$) von **[Co(L1P*OET)]**

	x	y	z	E(eq)
Co	3237(1)	1833(1)	4649(1)	33(1)
P	4926(1)	2370(1)	4608(1)	36(1)
C(11)	6218(4)	2110(2)	5321(2)	40(1)
C(12)	7425(5)	2314(3)	5261(3)	56(2)
C(13)	8396(5)	2212(3)	5855(3)	68(2)
C(14)	8154(5)	1922(3)	6539(3)	66(2)
C(15)	6970(5)	1712(3)	6609(3)	55(2)
C(16)	5961(4)	1794(2)	6007(2)	41(1)
C(17)	4764(4)	1529(2)	6147(2)	42(1)
N(18)	3722(4)	1505(2)	5673(2)	35(1)
N(19)	2759(4)	1163(2)	5969(2)	38(1)
C(18)	1765(5)	1116(2)	5430(2)	36(1)
O(19)	1746(3)	1339(2)	4727(2)	39(1)
C(21)	649(5)	793(2)	5646(2)	40(1)
C(22)	648(5)	477(2)	6357(3)	50(1)
C(23)	-418(6)	184(3)	6551(3)	66(2)
C(24)	-1524(6)	205(3)	6050(3)	63(2)
C(25)	-1549(6)	510(3)	5342(3)	67(2)
C(26)	-472(5)	802(3)	5140(3)	53(1)
C(31)	5573(4)	2559(2)	3718(2)	41(1)
C(32)	5942(5)	2164(3)	3156(3)	58(1)
C(33)	6423(6)	2417(4)	2515(3)	68(2)
C(34)	6528(6)	3050(4)	2439(3)	73(2)
C(35)	6177(6)	3451(3)	3001(4)	75(2)
C(36)	5695(5)	3203(3)	3643(3)	54(1)
C(37)	5330(7)	3585(3)	4309(4)	71(2)
O(72)	4796(9)	4170(3)	4184(4)	158(3)
C(72)	2922(12)	4776(5)	3837(8)	205(6)
C(71)	3717(10)	4068(6)	3726(6)	163(5)
N(38)	4774(4)	3149(2)	4781(2)	46(1)
N(39)	4267(4)	3351(2)	5451(2)	47(1)
C(38)	5024(5)	3498(3)	6129(3)	53(1)
O(39)	6163(4)	3483(2)	6195(2)	75(1)
C(41)	4273(5)	3686(3)	6769(3)	57(2)
C(42)	4546(6)	3377(3)	7495(3)	70(2)
C(43)	3888(7)	3555(4)	8114(4)	83(2)
C(44)	3015(7)	4033(4)	8003(5)	94(2)
C(45)	2707(7)	4314(4)	7295(5)	91(2)
C(46)	3344(6)	4144(3)	6668(4)	74(2)
C(51)	4009(4)	1186(2)	4079(2)	36(1)
C(52)	4836(5)	700(2)	4325(3)	44(1)
C(53)	5176(5)	251(3)	3789(3)	55(1)
C(54)	4690(6)	282(3)	3011(3)	60(2)
C(55)	3886(5)	761(3)	2745(3)	57(2)
C(56)	3553(5)	1220(2)	3269(2)	43(1)
C(57)	2728(5)	1748(3)	3060(3)	47(1)
N(58)	2531(4)	2097(2)	3653(2)	39(1)

N(59)	1690(4)	2588(2)	3598(2)	45(1)
C(58)	1573(4)	2795(2)	4312(3)	42(1)
O(59)	2218(3)	2577(2)	4943(2)	41(1)
C(61)	662(5)	3318(2)	4381(3)	53(1)
C(62)	-22(6)	3577(3)	3729(4)	85(2)
C(63)	-873(8)	4069(4)	3820(6)	111(3)
C(64)	-1045(9)	4295(4)	4540(7)	122(3)
C(65)	-370(8)	4033(4)	5184(5)	113(3)
C(66)	485(6)	3543(3)	5112(4)	79(2)

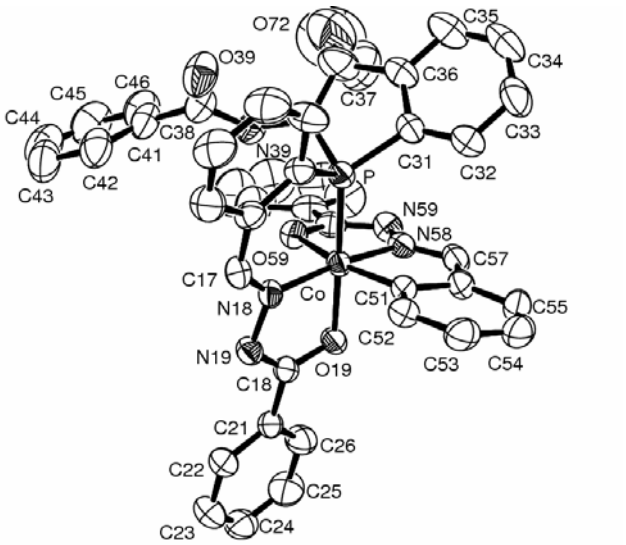

*Abb. 5.22: Ellipsoiddarstellung von [Co(L1P*OET)]. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Aus Gründen der Übersicht wurde auf die Beschriftung einiger Kohlenstoffatome verzichtet.*

5.23 2-Formylphenyl(benzoylhydrazonato)-κ^3C,N,O-2,3 Dihydro-3-methoxy-1-(2-formylphenylbenzoylhydrazonato)-benzazaphosphol-κ^3P,N,O-2-benzamid-cobalt(III) [Co(L1P*OMe)]

Tabelle 5.45: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von **[Co(L1P*OMe)]**

Summenformel	$C_{43}H_{33}CoN_6O_4P$	
M (g/mol)	787.65	
Temperatur	200(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Triklin, P-1	
Elementarzelle	a = 11.343(2) Å	α= 67.990(6)°
	b = 13.055(2) Å	β= 89.618(7)°
	c = 13.903(2) Å	γ = 75.977(7)°
Volumen	1843.7(3) $Å^3$	
Berechnete Dichte	1.419 g/cm^3	
Linearer Absorptionskoeffizient	0.562 mm^{-1}	
F(000)	814	
Kristallgröße	0.87 x 0.29 x 0.16 mm^3	
Theta-Bereich	2.19 – 29.25°	
Indizes	$-15\leq h\leq 11$, $-17\leq k\leq 17$, $-19\leq l\leq 16$	
Zahl der gemessenen Reflexe	19660	
Zahl der unabhängigen Reflexe	9858 [R(int) = 0.0929]	
Absorptionskorrektur	keine	
Zahl der verfeinerten Parameter	496	
Goof	0.929	
R_1 / wR_2 [I>2σ(I)]	R_1 = 0.0510, wR2 = 0.1255	
R_1 / wR_2 (alle Reflexe)	R_1 = 0.0848, wR_2 = 0.1452	
Restelektronendichte	0.593 und -1.358 $e.Å^{-3}$	
Diffraktometer	IPDS, Stoe	
Programm der Strukturlösung	SIR 92[98]	

Tabelle 5.46: Atomkoordinaten($x10^4$) und isotrope Temperaturparameter($Å^2x10^3$) von **[Co(L1P*OMe)]**

	x	y	z	E(eq)
Co	8735(1)	2903(1)	7321(1)	24(1)
P	7832(1)	3626(1)	8362(1)	28(1)
C(11)	8740(3)	3128(2)	9598(2)	36(1)
C(12)	8459(4)	3721(3)	10255(3)	60(1)
C(13)	9068(4)	3322(4)	11232(3)	76(1)
C(14)	9952(4)	2303(4)	11586(3)	61(1)
C(15)	10240(3)	1699(3)	10962(2)	46(1)
C(16)	9665(3)	2098(2)	9954(2)	36(1)
C(17)	10112(2)	1405(2)	9358(2)	33(1)
N(18)	9829(2)	1657(2)	8380(2)	28(1)
N(19)	10485(2)	839(2)	8021(2)	33(1)
C(18)	10333(2)	1237(2)	7002(2)	29(1)
O(19)	9649(2)	2227(1)	6424(1)	29(1)
C(21)	11016(2)	492(2)	6481(2)	32(1)
C(22)	11770(3)	-575(3)	7072(3)	48(1)
C(23)	12383(3)	-1278(3)	6588(3)	60(1)
C(24)	12247(3)	-924(3)	5525(3)	56(1)
C(25)	11510(3)	135(3)	4938(3)	48(1)
C(26)	10893(3)	843(2)	5413(2)	38(1)
C(31)	7146(2)	5125(2)	8072(2)	35(1)
C(32)	7692(3)	6029(2)	7782(3)	42(1)
C(33)	7016(3)	7086(3)	7735(3)	56(1)
C(34)	5823(3)	7239(3)	7999(3)	57(1)
C(35)	5285(3)	6340(3)	8311(3)	48(1)
C(36)	5946(3)	5280(2)	8344(2)	40(1)
C(37)	5444(3)	4238(2)	8691(2)	39(1)
O(72)	4365(2)	4381(2)	8117(2)	42(1)
C(71)	4439(3)	4803(3)	6998(3)	58(1)
N(38)	6465(2)	3346(2)	8629(2)	31(1)
N(39)	6398(2)	2207(2)	8991(2)	34(1)
C(38)	6428(2)	1585(2)	10033(2)	34(1)
O(39)	6375(2)	2020(2)	10676(2)	47(1)
C(41)	6497(2)	348(2)	10317(2)	36(1)
C(42)	6624(3)	-169(2)	9602(3)	47(1)
C(43)	6671(3)	-1325(3)	9925(3)	57(1)
C(44)	6609(3)	-1962(3)	10948(3)	58(1)
C(45)	6493(3)	-1455(3)	11670(3)	61(1)
C(46)	6442(3)	-311(3)	11353(3)	50(1)
C(51)	9646(2)	4033(2)	7071(2)	29(1)
C(52)	10677(2)	4010(2)	7615(2)	35(1)
C(53)	11239(2)	4911(2)	7223(3)	39(1)
C(54)	10766(3)	5838(2)	6304(3)	41(1)
C(55)	9730(3)	5883(2)	5745(2)	36(1)
C(56)	9170(2)	4982(2)	6134(2)	30(1)
C(57)	8118(2)	4902(2)	5618(2)	30(1)
N(58)	7765(2)	3990(2)	6133(2)	26(1)
N(59)	6834(2)	3702(2)	5742(2)	30(1)

	x	y	z	E(eq)
C(58)	6783(2)	2675(2)	6381(2)	27(1)
O(59)	7491(2)	2062(1)	7231(1)	28(1)
C(61)	5846(2)	2189(2)	6096(2)	30(1)
C(62)	4864(3)	2874(3)	5370(3)	41(1)
C(63)	4036(3)	2386(3)	5081(3)	52(1)
C(64)	4181(3)	1220(3)	5529(3)	53(1)
C(65)	5158(3)	536(3)	6253(3)	50(1)
C(66)	5979(3)	1011(2)	6543(2)	39(1)

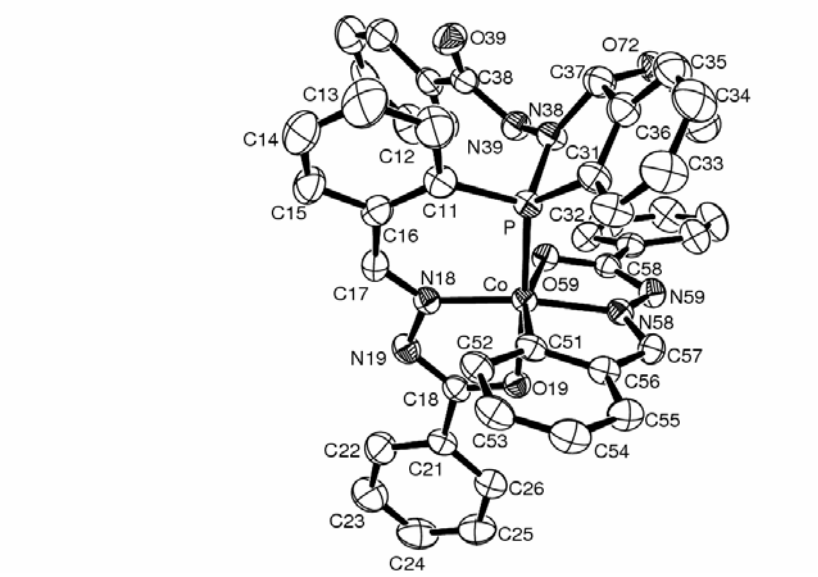

*Abb. 5.23: Ellipsoiddarstellung von [Co(L1P*OMe)]. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Aus Gründen der Übersicht wurde auf die Beschriftung einiger Kohlenstoffatome verzichtet.*

5.23 Tris-[2-(formyl-benzoylhydrazon)phenyl]phosphan-nickel(II)-nitrat Ethanol/Wasser-Solvat $[Ni(H_3L2P)](NO_3)_2 \cdot 1½EtOH \cdot H_2O$

Tabelle 5.47: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von **$[Ni(H_3L2P)](NO_3)_2 \cdot 1½EtOH \cdot H_2O$**

Summenformel	$C_{45}H_{45}N_{11}NiO_{11.5}P$	
M (g/mol)	1013.60	
Temperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Triklin, P-1	
Elementarzelle	a = 13.914(6) Å	α= 65.375(9)°
	b = 14.234(7) Å	β= 64.647(9)°
	c = 15.395(7) Å	γ = 63.534(9)°
Volumen	2369(2) $Å^3$	
Berechnete Dichte	1.421 g/cm^3	
Linearer Absorptionskoeffizient	0.516 mm^{-1}	
F(000)	1054	
Kristallgröße	0.32 x 0.14 x 0.12 mm^3	
Theta-Bereich	1.66 – 30.59°	
Indizes	$-19 \le h \le 19$, $-18 \le k \le 20$, $-21 \le l \le 22$	
Zahl der gemessenen Reflexe	29439	
Zahl der unabhängigen Reflexe	14289 [R(int) = 0.0445]	
Absorptionskorrektur	keine	
Zahl der verfeinerten Parameter	644	
Goof	1.015	
R_1 / wR_2 [$I>2\sigma(I)$]	R_1 = 0.0661, wR2 = 0.1799	
R_1 / wR_2 (alle Reflexe)	R_1 = 0.1341, wR_2 = 0.2185	
Restelektronendichte	1.486 und -0.651 $e.Å^{-3}$	
Diffraktometer	IPDS, Stoe	
Programm der Strukturlösung	SIR 92[98]	

Tabelle 5.48: Atomkoordinaten($x10^4$) und isotrope Temperaturparameter($Å^2x10^3$) von

$[Ni(H_3L2P)](NO_3)_2 \cdot 1½EtOH \cdot H_2O$

	x	y	z	E(eq)
Ni	8499(1)	3303(1)	4739(1)	23(1)
P(1)	7508(1)	3078(1)	6430(1)	22(1)
O(18)	9917(2)	3004(2)	3523(2)	30(1)
O(38)	7674(2)	3499(2)	3805(2)	26(1)
O(68)	8276(2)	4963(2)	4197(2)	28(1)
N(1)	9781(2)	3171(2)	5181(2)	25(1)
N(2)	10835(2)	2713(3)	4568(2)	31(1)
N(3)	11805(2)	2102(2)	3170(2)	30(1)
N(21)	8497(2)	1715(2)	5073(2)	28(1)
N(22)	8295(3)	1643(2)	4312(2)	32(1)
N(23)	7618(3)	2522(3)	2978(2)	37(1)
N(51)	6243(2)	4975(2)	5528(2)	25(1)
N(52)	6395(2)	5851(2)	4728(2)	28(1)
N(53)	7520(3)	6740(3)	3390(2)	35(1)
C(1)	7714(3)	3977(3)	6847(2)	25(1)
C(2)	6852(3)	4522(3)	7528(3)	29(1)
C(3)	7021(3)	5180(3)	7866(3)	34(1)
C(4)	8062(4)	5293(3)	7536(3)	35(1)
C(5)	8937(3)	4761(3)	6851(3)	32(1)
C(6)	8779(3)	4104(3)	6493(2)	26(1)
C(7)	9787(3)	3573(3)	5781(3)	29(1)
C(11)	11989(3)	1958(3)	2251(3)	29(1)
C(12)	12888(3)	1081(3)	1952(3)	38(1)
C(13)	13089(4)	904(3)	1067(3)	45(1)
C(14)	12396(4)	1575(3)	474(3)	43(1)
C(15)	11518(4)	2454(3)	755(3)	39(1)
C(16)	11309(3)	2653(3)	1635(3)	34(1)
C(17)	10811(3)	2610(3)	3739(3)	27(1)
C(21)	8354(3)	1740(3)	7066(2)	27(1)
C(22)	8535(3)	1603(3)	7939(3)	33(1)
C(23)	9160(4)	595(3)	8429(3)	40(1)
C(24)	9594(3)	-294(3)	8072(3)	39(1)
C(25)	9404(3)	-179(3)	7212(3)	34(1)
C(26)	8803(3)	835(3)	6695(3)	27(1)
C(27)	8647(3)	857(3)	5809(3)	30(1)
C(37)	7835(3)	2616(3)	3700(3)	29(1)
C(41)	7404(3)	3379(3)	2114(3)	37(1)
C(42)	6647(5)	3437(6)	1728(4)	72(2)
C(43)	6445(6)	4258(7)	880(5)	97(3)
C(44)	6993(6)	5036(6)	422(4)	84(2)
C(45)	7778(5)	4948(4)	792(3)	64(2)
C(46)	7994(4)	4114(4)	1632(3)	45(1)
C(51)	6073(3)	3060(3)	7091(2)	23(1)
C(52)	5874(3)	2126(3)	7830(3)	32(1)
C(53)	4788(3)	2065(3)	8325(3)	37(1)
C(54)	3885(3)	2944(3)	8090(3)	38(1)
C(55)	4060(3)	3883(3)	7344(3)	30(1)

C(56)	5133(3)	3949(3)	6840(2)	24(1)
C(57)	5257(3)	4935(3)	6026(2)	26(1)
C(61)	8424(3)	6841(3)	2503(3)	38(1)
C(62)	8598(5)	7845(4)	2035(3)	58(1)
C(63)	9485(6)	7959(6)	1120(4)	79(2)
C(64)	10154(5)	7095(6)	728(4)	73(2)
C(65)	9976(4)	6122(5)	1192(3)	64(2)
C(66)	9101(4)	5985(4)	2075(3)	48(1)
C(67)	7445(3)	5797(3)	4112(3)	27(1)
N(71)	7969(3)	-447(3)	3918(3)	44(1)
O(71)	8343(3)	-369(2)	4450(2)	56(1)
O(72)	7623(3)	373(3)	3230(3)	58(1)
O(73)	7941(3)	-1366(3)	4035(3)	69(1)
N(81)	5534(3)	1568(3)	5932(3)	36(1)
O(81)	5647(2)	2484(2)	5444(2)	42(1)
O(83)	4580(3)	1467(3)	6341(3)	57(1)
O(82)	6369(3)	749(2)	6020(3)	56(1)
O(93)	5145(6)	-2534(5)	8668(5)	56(2)
C(93)	4495(11)	-1985(10)	9422(7)	64(3)
C(94)	3676(12)	-890(12)	9112(11)	93(4)
O(91)	5774(8)	-2440(5)	6093(6)	174(4)
C(91)	5478(6)	-1275(5)	6021(5)	82(2)
C(92)	6059(4)	-1224(3)	6531(5)	60(2)
O(98)	1583(15)	-726(13)	9050(10)	169(6)
O(99)	4258(13)	-348(12)	7165(11)	147(5)

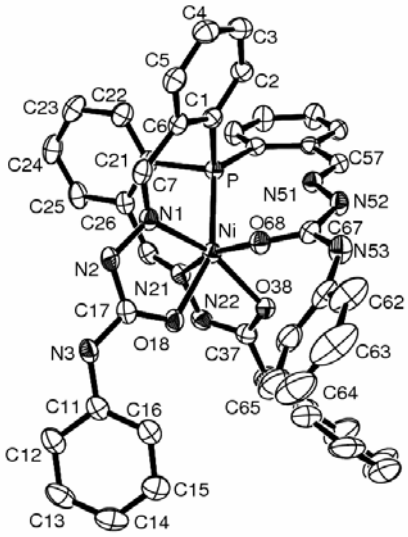

Abb. 5.24: Ellipsoiddarstellung von ***[Ni(H$_3$L2P)]$^{2+}$****. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Aus Gründen der Übersicht wurde auf die Beschriftung einiger Kohlenstoffatome verzichtet.*

5.25 Tris-[2-(formyl-aminothiophenol)phenyl]phosphan-indium(III) [In(L3P)]

Tabelle 5.49: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von **[In(L3P)]**

Summenformel	$C_{39}H_{27}InN_3PS_3$	
M (g/mol)	779.61	
Temperatur	293(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Monoklin, $P2_1/n$	
Elementarzelle	a = 11.127 (2) Å	α= 90°
	b = 18.826(3) Å	β= 98.34(2)°
	c = 16.071(2) Å	γ = 90°
Volumen	3331.1(7) $Å^3$	
Berechnete Dichte	1.555 g/cm^3	
Linearer Absorptionskoeffizient	0.980 mm^{-1}	
F(000)	1576	
Kristallgröße	0.3 x 0.08 x 0.01 mm^3	
Theta-Bereich	3.01 – 25.00°	
Indizes	$-1 \le h \le 13$, $0 \le k \le 22$, $-19 \le l \le 19$	
Zahl der gemessenen Reflexe	7014	
Zahl der unabhängigen Reflexe	5826 [R(int) = 0.1349]	
Absorptionskorrektur	keine	
Zahl der verfeinerten Parameter	424	
Goof	0.950	
R_1 / wR_2 [$I>2\sigma(I)$]	R_1 = 0.0653, wR2 = 0.1411	
R_1 / wR_2 (alle Reflexe)	R_1 = 0.2068, wR_2 = 0.2029	
Restelektronendichte	0.756 und -1.481 $e.Å^{-3}$	
Diffraktometer	CCD, Bruker	
Programm der Strukturlösung	SIR 92[98]	

Tabelle 5.50: Atomkoordinaten($x10^4$) und isotrope Temperaturparameter($Å^2x10^3$) von **[In(L3P)]**

	x	y	z	E(eq)
In	8286(1)	2214(1)	5618(1)	40(1)
P	10248(3)	2244(2)	6673(2)	39(1)
C(1)	10055(10)	2801(6)	7577(6)	41(3)
C(2)	11030(11)	3262(6)	7880(7)	50(3)
C(3)	10987(13)	3663(7)	8583(8)	63(4)
C(4)	9996(16)	3622(8)	9010(8)	75(5)
C(5)	9052(13)	3171(7)	8733(7)	65(4)
C(6)	9087(11)	2767(7)	7986(7)	48(3)
C(7)	8032(10)	2292(6)	7775(7)	50(3)
N(1)	7646(9)	2022(4)	7069(5)	43(2)
C(11)	6574(11)	1576(6)	6994(8)	48(3)
C(16)	5692(11)	1640(6)	7514(8)	55(3)
C(15)	4718(13)	1178(8)	7418(9)	68(4)
C(14)	4635(14)	671(7)	6793(10)	72(4)
C(13)	5482(14)	631(7)	6266(9)	71(4)
C(12)	6496(11)	1082(6)	6338(7)	48(3)
S(11)	7564(3)	972(2)	5664(2)	54(1)
C(21)	10884(10)	1421(5)	7139(6)	44(3)
C(22)	11222(11)	1388(6)	8023(7)	51(3)
C(23)	11647(12)	752(6)	8397(7)	55(3)
C(24)	11709(12)	151(7)	7928(8)	65(4)
C(25)	11351(11)	170(6)	7073(7)	54(3)
C(26)	10976(11)	796(6)	6659(7)	47(3)
C(27)	10757(11)	782(6)	5758(7)	47(3)
N(21)	10535(8)	1333(5)	5295(5)	43(2)
C(31)	10518(10)	1286(6)	4416(6)	41(3)
C(36)	11294(12)	830(6)	4072(8)	60(4)
C(35)	11303(14)	813(8)	3219(9)	73(4)
C(34)	10551(15)	1263(8)	2698(8)	73(4)
C(33)	9802(13)	1708(7)	3027(7)	60(4)
C(32)	9763(11)	1749(6)	3892(7)	48(3)
S(31)	8867(3)	2435(2)	4209(2)	56(1)
C(41)	11433(10)	2666(6)	6180(6)	42(3)
C(42)	12531(11)	2343(6)	6173(7)	49(3)
C(43)	13405(11)	2627(7)	5744(7)	56(3)
C(44)	13158(12)	3232(7)	5296(8)	61(4)
C(45)	12090(13)	3582(7)	5310(8)	61(4)
C(46)	11215(11)	3314(6)	5724(7)	49(3)
C(47)	10090(12)	3729(6)	5729(7)	51(3)
N(41)	9122(9)	3535(5)	5972(5)	40(2)
C(51)	8211(11)	4041(6)	6006(6)	42(3)
C(56)	8473(13)	4714(6)	6346(7)	57(3)
C(55)	7578(15)	5210(7)	6406(8)	65(4)
C(54)	6402(13)	5044(7)	6094(7)	58(4)
C(53)	6118(11)	4382(6)	5780(7)	45(3)
C(52)	6974(11)	3864(6)	5722(6)	41(3)
S(51)	6509(3)	3021(2)	5322(2)	52(1)

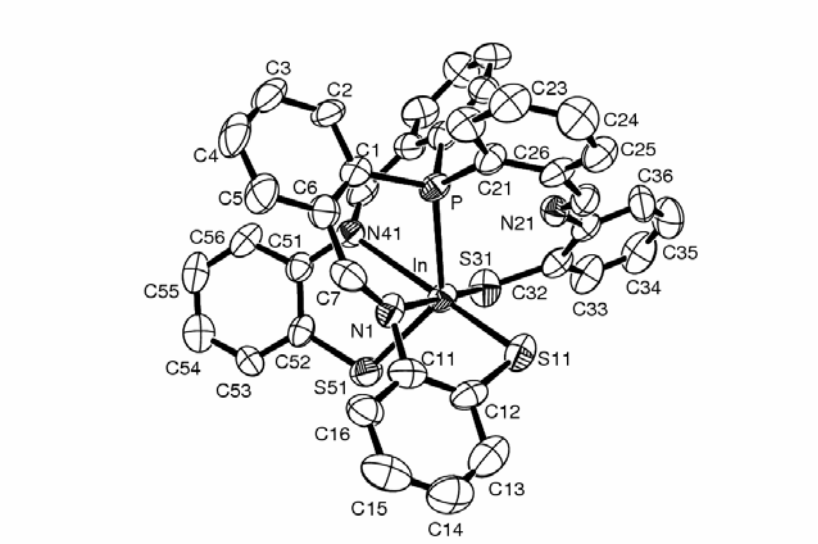

*Abb. 5.25: Ellipsoiddarstellung von **[In(L3P)]**. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Aus Gründen der Übersicht wurde auf die Beschriftung einiger Kohlenstoffatome verzichtet.*