

## 5 Kristallstrukturuntersuchungen

### 5.1 Datensammlung und Verfeinerung

Die Messungen zu den Kristallstrukturanalysen der vorliegenden Arbeit wurden auf

- a) Vierkreisdiffraktometern vom Typ *STOE STADI IV*
- b) Flächendetektordiffraktometer vom Typ *STOE IPDS I, II* und *BRUKER KAPPA CCD*

durchgeführt. Als Strahlungsquelle dienten Röntgenröhren bzw. Drehanoden der Firma SIEMENS mit Ag- oder Mo-Anode (Ag- $K_{\alpha}$ -Strahlung,  $\lambda = 56.087$  pm; Mo- $K_{\alpha}$ -Strahlung,  $\lambda = 71.073$  pm) und nachgeschaltetem Graphitmonochromator. Die Kristalle wurden mit Hilfe eines Polarisationsmikroskopes unter Mineralöl ausgesucht und mit etwas Öl (Tieftemperaturmessung) oder mit Zweikomponentenklebstoff (Raumtemperaturmessung) an einem Glasfaden auf dem Goniometerkopf befestigt.

Die Strukturanalysen gliedern sich in folgende Schritte:

1. Bestimmung der Orientierungsmatrix und der Gitterkonstanten anhand der Orientierungsparameter.
  - a) von 25-30 Reflexen mit  $10^{\circ} < 2\mathbf{q} < 25^{\circ}$
  - b) von 500-1500 Reflexen im gesamten Meßbereich aus mehreren Aufnahmen.
2. Bestimmung der Reflexintensitäten.
  - a) in  $\mathbf{w}$ - oder  $2\mathbf{q}/\mathbf{w}$ -Abtastmodus
  - b) durch Anpassen der Integrationsbedingungen an das gemittelte Reflexprofil und anschließendes Auslesen aller Aufnahmen.
3. Datenreduktion und Korrekturen.
  - a) Skalierung der Rohdaten anhand dreier Standardreflexe; empirische Absorptionskorrektur; Lorentz- und Polarisationsfaktorkorrektur.

b) Lorentz- und Polarisationsfaktorkorrektur.

4. Strukturbestimmung mit den Programmen *SHELXS*<sup>103</sup> und *SHELXL*<sup>104</sup> auf verschiedenen Rechnersystemen (Unix: *SILICON GRAPHICS POWER-CHALLENGE*, *O<sub>2</sub> WORK-STATION*; Windows (95, 98, XP, NT, 2000): *PENTIUM I-IV* PCs).

Lösung der Kristallstruktur mit Hilfe von direkten Methoden und anschließenden Differenzfouriersynthesen; Optimierung der Atomparameter durch Verfeinerung nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate gegen  $F_o^2$  für die gesamte Matrix. Dabei wurde folgende Gewichtung verwendet:

$$\frac{1}{w} = \mathbf{s}^2 F_o^2 + (aP)^2 + bP \quad \text{mit} \quad P = \frac{\max(F_o^2, 0) + 2F_c^2}{3}$$

Als Koeffizienten  $a$  und  $b$  wurden die von *SHELXL* vorgeschlagenen Werte übernommen. Für die ermittelten Gütewerte gilt damit:

$$R_1 = \frac{\sum \|F_o| - |F_c|\|}{\sum |F_o|} ; wR_2 = \left[ \frac{\sum [w(F_o^2 - F_c^2)^2]}{\sum [w(F_o^2)^2]} \right]^{0.5}$$

5. Die Graphische Darstellung erfolgte mit dem Programm *DIAMOND*.<sup>105</sup>

Üblicherweise wurden die H-Atomlagen mit einer idealisierten Geometrie berechnet und Atome mit zu großen Schwingungsellipsoiden wurden isotrop verfeinert (zumeist diejenigen von nichtkoordinierenden Lösungsmitteln). Die Zuverlässigkeitswerte  $R_1$  und  $wR_2$  sind für beobachtete Reflexe ( $F_o > 4\mathbf{s}(F_o)$ ) angegeben.

## 5.2 Daten zu den Kristallstrukturanalysen

Die kristallographischen Daten der bereits publizierten Strukturen wurden an das *Cambridge Crystallographic Data Centre* als Zusatzpublikationen übermittelt. Kopien können bei Anfrage an CCDC, 12 Union Road, Cambridge CB21EZ, UK (fax: +(44)1223-336-033; email: deposit@ccdc.cam.ac.uk) unter Angabe der jeweiligen CCDC-Nummer kostenfrei erhalten werden. Für die unveröffentlichten Verbindungen wurden die Lageparameter, die Koeffizienten  $U_{eq}$  bzw.  $U_{iso}$  [ $10^4 \text{ pm}^2$ ] und die Koeffizienten des Schwingungstensors  $U_{ij}$  [ $10^4 \text{ pm}^2$ ] aufgelistet.

### 5.2.1 $[(\text{Me}_3\text{SiNPPPh}_2)_2\text{CH}]\text{Li}(\text{THF})$ (1)

CCDC-Nummer	151408
Summenformel	$\text{C}_{35}\text{H}_{50}\text{LiN}_2\text{OP}_2\text{Si}_2$
Molare Masse [ $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ]	639.83
Raumgruppe	$P\bar{1}$ (No. 2)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1108.9(12), 1126.4(6), 1589.1(8)
$\alpha, \beta, \gamma$ [°]	71.89(6), 88.77(10), 82.48(10)
Volumen [ $10^6 \text{ pm}^3$ ]	1870(2)
Röntgenographische Dichte [ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ]	1.136
Messgerät	Stoe IPDS I
Strahlungsquelle	Ag- $\text{K}\alpha$ ( $\lambda = 56.087 \text{ pm}$ )
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	keine
Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]	0.113
Gemessene Reflexe	19505
Unabhängige Reflexe	9071 [ $R_{\text{int}} = 0.0695$ ]
Beobachtete Reflexe [ $I > 2\sigma(I)$ ]	5765
Daten / Parameter	9071 / 371
$R_1; wR_2$	0.0783; 0.1918

5.2.2  $[(\text{Me}_3\text{SiNPPPh}_2)_2\text{CH}]\text{K}$  (2)

CCDC-Nummer	151409
Summenformel	$\text{C}_{31}\text{H}_{39}\text{KN}_2\text{P}_2\text{Si}_2$
Molare Masse [ $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ]	596.86
Raumgruppe	<i>Pbca</i> (No. 61)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1359.5(3), 1973.2(4), 2423.5(5)
Volumen [ $10^6 \text{ pm}^3$ ]	6501(2)
Röntgenographische Dichte [ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ]	1.220
Messgerät	Stoe Stadi IV
Strahlungsquelle	Mo- $\text{K}_\alpha$ ( $\lambda = 71.073 \text{ pm}$ )
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	keine
Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]	0.358
Gemessene Reflexe	9350
Unabhängige Reflexe	4258 [ $R_{\text{int}} = 0.0214$ ]
Beobachtete Reflexe [ $I > 2\sigma(I)$ ]	3806
Daten / Parameter	4258 / 349
$R_1$ ; $wR_2$	0.0374; 0.1088

5.2.3  $[(\text{Me}_3\text{SiNPPPh}_2)_2\text{CH}]\text{K}(\text{Diglyme})$  (3)

CCDC-Nummer	151410
Summenformel	$\text{C}_{37}\text{H}_{53}\text{KN}_2\text{O}_3\text{P}_2\text{Si}_2$
Molare Masse [ $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ]	731.03
Raumgruppe	<i>C2/c</i> (No. 15:b1)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1900.3(4), 1135.9(2), 1947.2(4)
$\beta$ [°]	95.81(3)
Volumen [ $10^6 \text{ pm}^3$ ]	4181.5(15)
Röntgenographische Dichte [ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ]	1.161
Messgerät	Stoe Stadi IV
Strahlungsquelle	Mo- $\text{K}_\alpha$ ( $\lambda = 71.073 \text{ pm}$ )
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	$\psi$ -Scan
Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]	0.295
Gemessene Reflexe	5257
Unabhängige Reflexe	4106 [ $R_{\text{int}} = 0.0513$ ]
Beobachtete Reflexe [ $I > 2\sigma(I)$ ]	3173
Daten / Parameter	4106 / 240
$R_1$ ; $wR_2$	0.0550; 0.1407

5.2.4  $[(\text{Me}_3\text{SiNPPPh}_2)_2\text{CH}]\text{YCl}_2]_2$  (4a)  $\times 2$  Toluol

CCDC-Nummer	164392
Summenformel	$\text{C}_{76}\text{H}_{94}\text{Cl}_4\text{N}_4\text{P}_4\text{Si}_4\text{Y}_2$
Molare Masse [ $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ]	1619.42
Raumgruppe	$P\bar{1}$ (No. 2)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1165.42(5), 1439.59(5), 1472.18(7)
$\alpha, \beta, \gamma$ [°]	63.758(3), 73.465(4), 74.811(4)
Volumen [ $10^6 \text{ pm}^3$ ]	2096.9(2)
Röntgenographische Dichte [ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ]	1.282
Messgerät	Stoe Stadi IV
Strahlungsquelle	Mo- $\text{K}_\alpha$ ( $\lambda = 71.073 \text{ pm}$ )
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	$\psi$ -Scan
Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]	1.679
Gemessene Reflexe	7429
Unabhängige Reflexe	7418 [ $R_{\text{int}} = 0.0217$ ]
Beobachtete Reflexe [ $I > 2\sigma(I)$ ]	6344
Daten / Parameter	7418 / 390
$R_1; wR_2$	0.0492; 0.1529

5.2.5  $[(\text{Me}_3\text{SiNPPPh}_2)_2\text{CH}]\text{SmCl}_2]_2$  (4b)  $\times 2$  Toluol

CCDC-Nummer	164393
Summenformel	$\text{C}_{76}\text{H}_{94}\text{Cl}_4\text{N}_4\text{P}_4\text{Si}_4\text{Sm}_2$
Molare Masse [ $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ]	871.15
Raumgruppe	$P\bar{1}$ (No. 2)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1157.9(8), 1437.1(8), 1475.1(13)
$\alpha, \beta, \gamma$ [°]	63.37(8), 73.36(9), 74.89(7)
Volumen [ $10^6 \text{ pm}^3$ ]	2077(3)
Röntgenographische Dichte [ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ]	1.393
Messgerät	Stoe IPDS II
Strahlungsquelle	Mo- $\text{K}_\alpha$ ( $\lambda = 71.073 \text{ pm}$ )
Meßtemperatur [K]	173(2)
Absorptionskorrektur	keine
Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]	1.705
Gemessene Reflexe	18290
Unabhängige Reflexe	7456 [ $R_{\text{int}} = 0.0689$ ]
Beobachtete Reflexe [ $I > 2\sigma(I)$ ]	6863
Daten / Parameter	7456 / 378
$R_1; wR_2$	0.0407; 0.1250

5.2.6  $\{[(\text{Me}_3\text{SiNPPh}_2)_2\text{CH}\}\text{DyCl}_2\}_2$  (**4c**)  $\times 2$  Toluol

CCDC-Nummer	164394
Summenformel	$\text{C}_{76}\text{H}_{94}\text{Dy}_2\text{Cl}_4\text{N}_4\text{P}_4\text{Si}_4$
Molare Masse [ $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ]	883.30
Raumgruppe	$P\bar{1}$ (No. 2)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1157.48(9), 1430.16(12), 1463.48(12)
$\alpha, \beta, \gamma$ [°]	63.715(9), 73.456(9), 74.816(9)
Volumen [ $10^6 \text{ pm}^3$ ]	2056.0(3)
Röntgenographische Dichte [ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ]	1.427
Messgerät	Stoe IPDS I
Strahlungsquelle	Ag- $\text{K}_\alpha$ ( $\lambda = 56.087 \text{ pm}$ )
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	keine
Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]	1.128
Gemessene Reflexe	19253
Unabhängige Reflexe	9021 [ $R_{\text{int}} = 0.0291$ ]
Beobachtete Reflexe [ $I > 2\sigma(I)$ ]	7885
Daten / Parameter	9021 / 378
$R_1; wR_2$	0.0357; 0.1003

5.2.7  $\{[(\text{Me}_3\text{SiNPPh}_2)_2\text{CH}\}\text{ErCl}_2\}_2$  (**4d**)  $\times 2$  Toluol

CCDC-Nummer	164395
Summenformel	$\text{C}_{76}\text{H}_{94}\text{Cl}_4\text{Er}_2\text{N}_4\text{P}_4\text{Si}_4$
Molare Masse [ $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ]	888.06
Raumgruppe	$P\bar{1}$ (No. 2)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1166.3(2), 1437.7(2), 1473.10(12)
$\alpha, \beta, \gamma$ [°]	63.84(4), 73.49(2), 74.750(15)
Volumen [ $10^6 \text{ pm}^3$ ]	2098.2(5)
Röntgenographische Dichte [ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ]	1.406
Messgerät	Stoe Stadi IV
Strahlungsquelle	Mo- $\text{K}_\alpha$ ( $\lambda = 71.073 \text{ pm}$ )
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	$\psi$ -Scan
Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]	2.288
Gemessene Reflexe	6817
Unabhängige Reflexe	6816 [ $R_{\text{int}} = 0.0478$ ]
Beobachtete Reflexe [ $I > 2\sigma(I)$ ]	5625
Daten / Parameter	6816 / 378
$R_1; wR_2$	0.0490; 0.1422

5.2.8  $\{[(\text{Me}_3\text{SiNPPh}_2)_2\text{CH}]\text{YbCl}_2\}_2$  (4e)  $\times 2$  Toluol

CCDC-Nummer	164396
Summenformel	$\text{C}_{76}\text{H}_{94}\text{Cl}_4\text{N}_4\text{P}_4\text{Si}_4\text{Yb}_2$
Molare Masse [ $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ]	893.84
Raumgruppe	$P\bar{1}$ (No. 2)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1165.4(3), 1434.0(2), 1468.7(2)
$\alpha, \beta, \gamma$ [°]	64.000(3), 73.45(2), 74.86(2)
Volumen [ $10^6 \text{ pm}^3$ ]	2088.2(7)
Röntgenographische Dichte [ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ]	1.422
Messgerät	Stoe Stadi IV
Strahlungsquelle	Mo- $\text{K}_\alpha$ ( $\lambda = 71.073 \text{ pm}$ )
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	$\psi$ -Scan
Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]	2.529
Gemessene Reflexe	8244
Unabhängige Reflexe	7373 [ $R_{\text{int}} = 0.0498$ ]
Beobachtete Reflexe [ $I > 2\sigma(I)$ ]	6451
Daten / Parameter	7373 / 378
$R_1; wR_2$	0.0374; 0.1081

5.2.9  $\{[(\text{Me}_3\text{SiNPPh}_2)_2\text{CH}]\text{LuCl}_2\}_2$  (4f)  $\times 2$  Toluol

CCDC-Nummer	164397
Summenformel	$\text{C}_{76}\text{H}_{94}\text{Cl}_4\text{Lu}_2\text{N}_4\text{P}_4\text{Si}_4$
Molare Masse [ $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ]	895.77
Raumgruppe	$P\bar{1}$ (No. 2)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	11642.6(2), 1433.34(1), 1467.89(1)
$\alpha, \beta, \gamma$ [°]	64.048(8), 73.538(10), 74.842(15)
Volumen [ $10^6 \text{ pm}^3$ ]	2085.27(4)
Röntgenographische Dichte [ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ]	1.427
Messgerät	Stoe Stadi IV
Strahlungsquelle	Mo- $\text{K}_\alpha$ ( $\lambda = 71.073 \text{ pm}$ )
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	$\psi$ -Scan
Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]	2.657
Gemessene Reflexe	7954
Unabhängige Reflexe	7407 [ $R_{\text{int}} = 0.0651$ ]
Beobachtete Reflexe [ $I > 2\sigma(I)$ ]	6500
Daten / Parameter	7407 / 378
$R_1; wR_2$	0.0376; 0.1103

5.2.10  $\{[(\text{Me}_3\text{SiNPPh}_2)_2\text{CH}]\text{Y}(\text{NPh}_2)_2\}$  (5a)  $\times$  Toluol

CCDC-Nummer	164398
Summenformel	$\text{C}_{62}\text{H}_{67}\text{N}_4\text{P}_2\text{Si}_2\text{Y}$
Molare Masse [ $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ]	1075.23
Raumgruppe	$P\bar{1}$ (No. 2)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1237.76(9), 1268.13(9), 2095.40(13)
$\alpha, \beta, \gamma$ [°]	90.128(8), 99.638(8), 117.207(7)
Volumen [ $10^6 \text{ pm}^3$ ]	2872.2(3)
Röntgenographische Dichte [ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ]	1.243
Messgerät	Stoe Stadi IV
Strahlungsquelle	Mo- $\text{K}_\alpha$ ( $\lambda = 71.073 \text{ pm}$ )
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	$\psi$ -Scan
Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]	1.154
Gemessene Reflexe	10766
Unabhängige Reflexe	10174 [ $R_{\text{int}} = 0.0684$ ]
Beobachtete Reflexe [ $I > 2\sigma(I)$ ]	8678
Daten / Parameter	10174 / 624
$R_1; wR_2$	0.0476; 0.1338

5.2.11  $\{[(\text{Me}_3\text{SiNPPh}_2)_2\text{CH}]\text{Y}(\text{C}_5\text{H}_5)_2\}$  (6a)

CCDC-Nummer	169514
Summenformel	$\text{C}_{41}\text{H}_{49}\text{N}_2\text{P}_2\text{Si}_2\text{Y}$
Molare Masse [ $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ]	776.85
Raumgruppe	$P\bar{1}$ (No. 2)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1031.67(7), 1187.31(8), 1760.02(11)
$\alpha, \beta, \gamma$ [°]	74.058(8), 77.750(8), 77.835(8)
Volumen [ $10^6 \text{ pm}^3$ ]	1998.9(2)
Röntgenographische Dichte [ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ]	1.291
Messgerät	Stoe IPDS I
Strahlungsquelle	Ag- $\text{K}_\alpha$ ( $\lambda = 56.087 \text{ pm}$ )
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	keine
Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]	0.889
Gemessene Reflexe	17618
Unabhängige Reflexe	8143 [ $R_{\text{int}} = 0.0470$ ]
Beobachtete Reflexe [ $I > 2\sigma(I)$ ]	6062
Daten / Parameter	8143 / 439
$R_1; wR_2$	0.0376; 0.0826



5.2.12  $\{[(\text{Me}_3\text{SiNPPh}_2)_2\text{CH}]\text{Sm}(\text{C}_5\text{H}_5)_2\}$  (6b)

CCDC-Nummer	169515
Summenformel	$\text{C}_{41}\text{H}_{49}\text{N}_2\text{P}_2\text{Si}_2\text{Sm}$
Molare Masse [ $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ]	838.29
Raumgruppe	$P\bar{1}$ (No. 2)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1030.92(8), 1178.52(11), 1761.91(15)
$\alpha, \beta, \gamma$ [°]	73.937(10), 77.129(10), 77.313(10)
Volumen [ $10^6 \text{ pm}^3$ ]	1976.7(3)
Röntgenographische Dichte [ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ]	1.408
Messgerät	Stoe IPDS I
Strahlungsquelle	Ag- $\text{K}_\alpha$ ( $\lambda = 56.087 \text{ pm}$ )
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	keine
Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]	0.887
Gemessene Reflexe	21099
Unabhängige Reflexe	9645 [ $R_{\text{int}} = 0.0249$ ]
Beobachtete Reflexe [ $I > 2\sigma(I)$ ]	8610
Daten / Parameter	9645 / 439
$R_1; wR_2$	0.0250; 0.0698

5.2.13  $\{[(\text{Me}_3\text{SiNPPh}_2)_2\text{CH}]\text{Er}(\text{C}_5\text{H}_5)_2\}$  (6c)

CCDC-Nummer	169516
Summenformel	$\text{C}_{41}\text{H}_{49}\text{ErN}_2\text{P}_2\text{Si}_2$
Molare Masse [ $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ]	855.20
Raumgruppe	$P\bar{1}$ (No. 2)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1031.59(8), 1185.13(11), 1754.22(15)
$\alpha, \beta, \gamma$ [°]	74.052(10), 78.014(10), 78.086(10)
Volumen [ $10^6 \text{ pm}^3$ ]	1991.5(3)
Röntgenographische Dichte [ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ]	1.426
Messgerät	Stoe IPDS I
Strahlungsquelle	Ag- $\text{K}_\alpha$ ( $\lambda = 56.087 \text{ pm}$ )
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	keine
Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]	2.278
Gemessene Reflexe	14828
Unabhängige Reflexe	7626 [ $R_{\text{int}} = 0.0644$ ]
Beobachtete Reflexe [ $I > 2\sigma(I)$ ]	7454
Daten / Parameter	7626 / 439
$R_1; wR_2$	0.0385; 0.1022

5.2.14  $[(\text{Me}_3\text{SiNPPPh}_2)_2\text{CH}]\text{Sm}(\text{C}_8\text{H}_8)$  (7)

Summenformel	$\text{C}_{39}\text{H}_{47}\text{N}_2\text{P}_2\text{Si}_2\text{Sm}$
Molare Masse [ $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ]	812.26
Raumgruppe	$P2_1/n$ (No. 14:b2)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1230.50(8), 1962.30(13), 1565.00(10)
$\beta$ [°]	99.364(8)
Volumen [ $10^6 \text{ pm}^3$ ]	3728.5(4)
Röntgenographische Dichte [ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ]	1.447
Messgerät	Stoe IPDS I
Strahlungsquelle	Ag- $\text{K}\alpha$ ( $\lambda = 56.087 \text{ pm}$ )
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	keine
Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]	0.938
Gemessene Reflexe	24303
Unabhängige Reflexe	7714 [ $R_{\text{int}} = 0.1285$ ]
Beobachtete Reflexe [ $I > 2\sigma(I)$ ]	5976
Daten / Parameter	7714 / 421
$R_1; wR_2$	0.0585; 0.1811

Atom	x	y	z	$U_{\text{eq/iso}}$
Sm	0.05718(2)	0.248290(9)	0.517649(14)	0.02024(13)
Si1	0.23247(11)	0.09143(6)	0.58751(8)	0.0273(3)
Si2	0.26895(10)	0.36673(6)	0.63386(8)	0.0266(3)
P1	0.23822(9)	0.17538(5)	0.42902(7)	0.0189(2)
P2	0.23609(9)	0.33103(5)	0.43813(7)	0.0191(2)
N1	0.1886(3)	0.1546(2)	0.5131(2)	0.0224(8)
N2	0.2154(3)	0.3324(2)	0.5364(2)	0.0225(8)
C1	-0.1096(5)	0.1801(3)	0.4318(4)	0.0435(14)
C2	-0.0989(5)	0.1551(3)	0.5176(5)	0.0435(14)
C3	-0.0859(4)	0.1865(3)	0.6003(4)	0.0374(12)
C4	-0.0839(6)	0.2534(2)	0.6298(4)	0.0348(14)
C5	-0.0907(4)	0.3176(3)	0.5904(4)	0.0347(12)
C6	-0.1024(5)	0.3419(3)	0.5053(4)	0.0369(12)
C7	-0.1109(4)	0.3109(3)	0.4233(3)	0.0381(12)
C8	-0.1122(5)	0.2441(3)	0.3950(4)	0.0424(15)
C9	0.1871(5)	0.2548(2)	0.3926(3)	0.0203(10)
C10	0.1997(3)	0.1194(2)	0.3375(3)	0.0238(9)
C11	0.1439(4)	0.0594(2)	0.3477(3)	0.0330(10)
C12	0.1169(5)	0.0159(3)	0.2782(4)	0.0429(13)
C13	0.1426(4)	0.0317(3)	0.1986(3)	0.0393(12)
C14	0.1956(4)	0.0920(2)	0.1878(3)	0.0337(11)
C15	0.2241(4)	0.1357(2)	0.2570(3)	0.0285(10)
C16	0.3869(4)	0.1745(2)	0.4527(3)	0.0255(9)
C17	0.4346(4)	0.2079(2)	0.5274(3)	0.0341(11)
C18	0.5474(4)	0.2130(3)	0.5499(4)	0.0480(14)

Atom	x	y	z	$U_{eq/iso}$
C19	0.6141(5)	0.1839(3)	0.4972(5)	0.055(2)
C20	0.5684(5)	0.1500(3)	0.4237(4)	0.0465(14)
C21	0.4555(4)	0.1446(2)	0.4010(3)	0.0361(11)
C22	0.2860(6)	0.1302(3)	0.6938(3)	0.054(2)
C23	0.1155(5)	0.0356(3)	0.6034(4)	0.0529(15)
C24	0.3391(5)	0.0341(3)	0.5561(4)	0.0511(15)
C25	0.1588(4)	0.3960(2)	0.3716(3)	0.0247(9)
C26	0.1010(4)	0.4443(2)	0.4103(3)	0.0342(10)
C27	0.0409(4)	0.4937(3)	0.3590(4)	0.0425(13)
C28	0.0380(5)	0.4944(3)	0.2718(4)	0.0498(15)
C29	0.0979(5)	0.4471(3)	0.2349(4)	0.0480(14)
C30	0.1576(4)	0.3979(3)	0.2836(3)	0.0352(11)
C31	0.3770(3)	0.3498(2)	0.4236(3)	0.0221(9)
C32	0.4401(3)	0.3980(2)	0.4737(3)	0.0237(9)
C33	0.5476(4)	0.4108(2)	0.4619(3)	0.0309(10)
C34	0.5914(4)	0.3761(3)	0.3994(3)	0.0336(11)
C35	0.5285(4)	0.3299(3)	0.3479(3)	0.0375(12)
C36	0.4211(4)	0.3167(2)	0.3593(3)	0.0307(10)
C37	0.2676(5)	0.4626(3)	0.6351(4)	0.0469(14)
C38	0.1815(4)	0.3373(3)	0.7117(3)	0.0443(13)
C39	0.4107(4)	0.3377(3)	0.6765(3)	0.0341(10)

Atom	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{23}$	$U_{13}$	$U_{12}$
Sm	0.0188(2)	0.0211(2)	0.0231(2)	-0.00093(7)	0.01045(14)	0.00054(7)
Si1	0.0351(7)	0.0197(6)	0.0272(6)	0.0029(5)	0.0051(5)	0.0010(5)
Si2	0.0304(7)	0.0289(6)	0.0230(6)	-0.0071(5)	0.0113(5)	-0.0061(5)
P1	0.0200(6)	0.0158(5)	0.0228(5)	-0.0032(4)	0.0092(5)	0.0004(4)
P2	0.0233(6)	0.0156(5)	0.0206(5)	-0.0007(4)	0.0105(5)	-0.0024(4)
N1	0.024(2)	0.018(2)	0.027(2)	0.0007(14)	0.011(2)	0.0007(14)
N2	0.028(2)	0.019(2)	0.022(2)	-0.0026(14)	0.011(2)	-0.0022(15)
C1	0.037(3)	0.048(3)	0.046(3)	-0.022(3)	0.009(3)	-0.014(2)
C2	0.030(3)	0.027(3)	0.075(4)	-0.004(3)	0.015(3)	-0.007(2)
C3	0.029(3)	0.035(3)	0.051(3)	0.005(2)	0.016(3)	-0.002(2)
C4	0.028(3)	0.049(4)	0.031(3)	0.006(2)	0.017(3)	0.006(2)
C5	0.033(3)	0.037(3)	0.038(3)	-0.004(2)	0.018(2)	0.008(2)
C6	0.034(3)	0.033(3)	0.046(3)	0.006(2)	0.012(2)	0.012(2)
C7	0.037(3)	0.044(3)	0.032(3)	0.007(2)	0.002(2)	0.015(2)
C8	0.035(3)	0.059(4)	0.031(3)	-0.006(2)	0.000(3)	0.006(2)
C9	0.023(3)	0.017(2)	0.023(2)	-0.0032(14)	0.011(2)	-0.0012(14)
C10	0.023(2)	0.022(2)	0.027(2)	-0.005(2)	0.007(2)	-0.002(2)
C11	0.044(3)	0.023(2)	0.034(2)	-0.003(2)	0.011(2)	-0.006(2)
C12	0.052(3)	0.025(2)	0.051(3)	-0.007(2)	0.007(3)	-0.011(2)
C13	0.045(3)	0.033(3)	0.039(3)	-0.020(2)	0.005(2)	-0.006(2)
C14	0.029(2)	0.043(3)	0.030(2)	-0.013(2)	0.009(2)	-0.001(2)
C15	0.031(2)	0.030(2)	0.028(2)	-0.007(2)	0.012(2)	-0.006(2)
C16	0.024(2)	0.018(2)	0.037(2)	-0.002(2)	0.012(2)	0.003(2)
C17	0.031(3)	0.031(2)	0.042(3)	-0.001(2)	0.013(2)	0.002(2)
C18	0.030(3)	0.057(4)	0.056(4)	-0.012(3)	0.004(3)	-0.002(2)
C19	0.023(3)	0.062(4)	0.082(5)	0.010(3)	0.015(3)	0.010(3)

Atom	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
C20	0.034(3)	0.051(3)	0.059(4)	0.001(3)	0.019(3)	0.011(2)
C21	0.036(3)	0.034(3)	0.042(3)	-0.001(2)	0.017(2)	0.010(2)
C22	0.090(5)	0.036(3)	0.032(3)	0.001(2)	0.001(3)	-0.012(3)
C23	0.056(4)	0.043(3)	0.059(4)	0.027(3)	0.008(3)	-0.008(3)
C24	0.062(4)	0.037(3)	0.056(3)	0.014(3)	0.013(3)	0.026(3)
C25	0.025(2)	0.019(2)	0.030(2)	0.006(2)	0.007(2)	-0.001(2)
C26	0.037(3)	0.023(2)	0.043(3)	0.001(2)	0.009(2)	0.004(2)
C27	0.040(3)	0.027(2)	0.058(4)	0.001(2)	0.000(3)	0.008(2)
C28	0.043(3)	0.030(3)	0.072(4)	0.018(3)	-0.003(3)	0.003(2)
C29	0.055(4)	0.051(3)	0.036(3)	0.018(2)	0.002(3)	-0.005(3)
C30	0.042(3)	0.033(2)	0.031(3)	0.004(2)	0.006(2)	0.006(2)
C31	0.025(2)	0.022(2)	0.021(2)	0.005(2)	0.010(2)	-0.004(2)
C32	0.031(2)	0.021(2)	0.018(2)	0.002(2)	0.004(2)	-0.004(2)
C33	0.030(2)	0.028(2)	0.036(3)	0.001(2)	0.008(2)	-0.011(2)
C34	0.024(2)	0.038(3)	0.040(3)	0.002(2)	0.009(2)	-0.007(2)
C35	0.030(2)	0.045(3)	0.043(3)	-0.011(2)	0.022(2)	-0.006(2)
C36	0.031(2)	0.030(2)	0.035(2)	-0.007(2)	0.015(2)	-0.010(2)
C37	0.054(3)	0.033(3)	0.056(3)	-0.021(2)	0.016(3)	-0.004(2)
C38	0.034(3)	0.076(4)	0.023(2)	-0.006(2)	0.006(2)	-0.013(3)
C39	0.032(2)	0.044(3)	0.026(2)	-0.001(2)	0.005(2)	-0.008(2)

### 5.2.15 $[(\text{Me}_3\text{SiNPPH}_2)_2\text{CH}]\text{Y}(\text{C}_5\text{Me}_5\text{Cl}) \times 1/2 \text{ Toluol}$

Summenformel	$\text{C}_{44.5}\text{H}_{58}\text{ClN}_2\text{P}_2\text{Si}_2\text{Y}$
Molare Masse [ $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ]	863.41
Raumgruppe	$P2_1/c$ (No. 14:b1)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	2086.49(10), 1561.24(8), 1463.17(9)
$\beta$ [°]	105.547(6)
Volumen [ $10^6 \text{ pm}^3$ ]	4591.9(4)
Röntgenographische Dichte [ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ]	1.249
Messgerät	Stoe IPDS I
Strahlungsquelle	Ag- $\text{K}_\alpha$ ( $\lambda = 56.087 \text{ pm}$ )
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	keine
Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]	0.806
Gemessene Reflexe	38476
Unabhängige Reflexe	14482 [ $R_{\text{int}} = 0.1137$ ]
Beobachtete Reflexe [ $I > 2\sigma(I)$ ]	8434
Daten / Parameter	14482 / 448
$R_1; wR_2$	0.0745; 0.1856

---

Atom	x	y	z	U <sub>eq/iso</sub>
Y	0.31214(2)	1.07286(2)	-0.36699(3)	0.02412(9)
Cl1	0.27898(7)	1.18166(8)	-0.50390(10)	0.0492(3)
Si1	0.25483(9)	0.95569(10)	-0.59849(11)	0.0470(4)
Si2	0.17018(7)	1.18736(8)	-0.32243(10)	0.0337(3)
P1	0.26480(5)	0.88537(6)	-0.40108(8)	0.0238(2)
P2	0.21429(5)	1.00120(6)	-0.26091(8)	0.0223(2)
N1	0.2733(2)	0.9569(2)	-0.4755(3)	0.0293(8)
N2	0.2158(2)	1.0928(2)	-0.3098(3)	0.0247(7)
C1	0.2724(2)	0.9347(2)	-0.2925(3)	0.0237(8)
C2	0.3301(2)	0.8050(3)	-0.3772(4)	0.0324(10)
C3	0.3452(3)	0.7559(3)	-0.2952(4)	0.0435(12)
C4	0.3949(3)	0.6932(4)	-0.2802(5)	0.061(2)
C5	0.4289(3)	0.6800(4)	-0.3465(6)	0.067(2)
C6	0.4155(3)	0.7276(4)	-0.4268(6)	0.072(2)
C7	0.3661(3)	0.7910(3)	-0.4429(5)	0.0511(15)
C8	0.1883(2)	0.8248(3)	-0.4459(3)	0.0297(9)
C9	0.1841(3)	0.7378(3)	-0.4282(5)	0.059(2)
C10	0.1244(4)	0.6946(4)	-0.4650(7)	0.088(3)
C11	0.0697(3)	0.7359(4)	-0.5168(6)	0.072(2)
C12	0.0731(3)	0.8212(5)	-0.5340(5)	0.068(2)
C13	0.1319(3)	0.8657(4)	-0.4979(4)	0.0486(13)
C14	0.2420(2)	1.0057(3)	-0.1322(3)	0.0288(9)
C15	0.2470(3)	1.0834(3)	-0.0868(4)	0.0440(12)
C16	0.2687(4)	1.0894(4)	0.0108(4)	0.066(2)
C17	0.2873(4)	1.0179(5)	0.0637(4)	0.071(2)
C18	0.2842(3)	0.9391(4)	0.0204(4)	0.059(2)
C19	0.2615(3)	0.9327(3)	-0.0773(4)	0.0433(11)
C20	0.1316(2)	0.9541(3)	-0.2880(3)	0.0269(8)
C21	0.1229(3)	0.8747(4)	-0.2510(5)	0.061(2)
C22	0.0604(3)	0.8366(5)	-0.2720(5)	0.073(2)
C23	0.0060(3)	0.8774(4)	-0.3299(5)	0.058(2)
C24	0.0145(3)	0.9536(4)	-0.3685(6)	0.068(2)
C25	0.0773(3)	0.9913(4)	-0.3479(5)	0.055(2)
C26	0.4152(3)	1.1762(3)	-0.2987(5)	0.053(2)
C27	0.4369(2)	1.1183(4)	-0.3553(4)	0.0448(13)
C28	0.4423(2)	1.0378(3)	-0.3123(4)	0.0399(11)
C29	0.4233(2)	1.0449(4)	-0.2282(4)	0.0418(12)
C30	0.4060(2)	1.1311(4)	-0.2184(4)	0.053(2)
C31	0.4116(4)	1.2727(5)	-0.3155(6)	0.084(2)
C32	0.4588(4)	1.1397(5)	-0.4449(6)	0.082(2)
C33	0.4724(4)	0.9590(5)	-0.3455(6)	0.075(2)
C34	0.4320(4)	0.9759(5)	-0.1530(6)	0.081(2)
C35	0.3919(4)	1.1723(6)	-0.1329(7)	0.092(3)
C36	0.1805(3)	1.0227(5)	-0.6531(5)	0.073(2)
C37	0.3290(4)	0.9981(5)	-0.6324(5)	0.067(2)
C38	0.2357(4)	0.8452(5)	-0.6521(5)	0.080(2)
C39	0.2300(3)	1.2782(3)	-0.2897(4)	0.0492(14)
C40	0.1117(3)	1.1971(4)	-0.2452(5)	0.065(2)
C41	0.1213(3)	1.2015(4)	-0.4481(4)	0.0490(14)
C42	0.0823(9)	0.4519(11)	-0.5234(15)	0.191(7)
C43	0.0280(10)	0.4831(13)	-0.521(2)	0.095(5)

---

Atom	x	y	z	U <sub>eq/iso</sub>
C44	-0.0304(7)	0.5167(8)	-0.5818(10)	0.131(4)
C45	-0.0818(12)	0.5427(15)	-0.566(2)	0.116(7)
C46	0.0232(13)	0.484(2)	-0.599(2)	0.128(8)

Atom	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
Y	0.0236(2)	0.02024(14)	0.0291(2)	0.00086(15)	0.00809(13)	-0.00283(14)
Cl1	0.0609(8)	0.0396(6)	0.0457(8)	0.0118(6)	0.0119(6)	-0.0027(6)
P1	0.0232(5)	0.0183(4)	0.0302(6)	-0.0025(4)	0.0078(4)	0.0012(4)
P2	0.0229(5)	0.0201(4)	0.0245(5)	0.0009(4)	0.0072(4)	0.0016(4)
Si1	0.0620(10)	0.0506(8)	0.0310(8)	-0.0041(6)	0.0169(7)	-0.0063(7)
Si2	0.0365(7)	0.0249(6)	0.0409(8)	0.0031(5)	0.0123(6)	0.0102(5)
N1	0.038(2)	0.025(2)	0.028(2)	-0.0032(14)	0.012(2)	-0.0031(15)
N2	0.028(2)	0.0195(15)	0.028(2)	0.0027(13)	0.0101(14)	0.0019(12)
C1	0.021(2)	0.020(2)	0.029(2)	0.000(2)	0.0058(15)	0.0001(14)
C2	0.023(2)	0.018(2)	0.056(3)	-0.005(2)	0.012(2)	-0.0008(15)
C3	0.041(3)	0.031(2)	0.054(3)	-0.001(2)	0.003(2)	0.006(2)
C4	0.049(3)	0.044(3)	0.073(5)	0.006(3)	-0.013(3)	0.013(3)
C5	0.034(3)	0.040(3)	0.119(7)	-0.008(4)	0.008(3)	0.012(2)
C6	0.053(4)	0.053(4)	0.127(7)	-0.004(4)	0.053(4)	0.016(3)
C7	0.046(3)	0.035(3)	0.083(5)	0.002(3)	0.035(3)	0.009(2)
C8	0.027(2)	0.027(2)	0.035(2)	-0.008(2)	0.008(2)	-0.001(2)
C9	0.045(3)	0.037(3)	0.090(5)	-0.006(3)	0.008(3)	-0.011(2)
C10	0.068(5)	0.040(3)	0.154(9)	-0.016(4)	0.025(5)	-0.024(3)
C11	0.039(3)	0.064(4)	0.104(6)	-0.039(4)	0.002(3)	-0.017(3)
C12	0.036(3)	0.083(5)	0.075(5)	-0.003(4)	-0.001(3)	0.001(3)
C13	0.035(3)	0.051(3)	0.056(4)	0.004(3)	0.006(2)	-0.002(2)
C14	0.033(2)	0.028(2)	0.026(2)	0.001(2)	0.010(2)	-0.002(2)
C15	0.064(3)	0.035(2)	0.033(3)	0.000(2)	0.012(2)	0.000(2)
C16	0.113(6)	0.052(4)	0.032(3)	-0.011(3)	0.016(3)	-0.008(4)
C17	0.099(5)	0.081(5)	0.027(3)	0.001(3)	0.006(3)	-0.005(4)
C18	0.080(4)	0.059(4)	0.032(3)	0.017(3)	0.004(3)	-0.001(3)
C19	0.056(3)	0.035(2)	0.037(3)	0.005(2)	0.009(2)	0.001(2)
C20	0.025(2)	0.029(2)	0.028(2)	-0.001(2)	0.009(2)	-0.0043(15)
C21	0.040(3)	0.065(4)	0.069(4)	0.028(3)	-0.001(3)	-0.020(3)
C22	0.061(4)	0.078(5)	0.074(5)	0.027(4)	0.009(4)	-0.035(4)
C23	0.034(3)	0.076(4)	0.065(4)	0.001(3)	0.015(3)	-0.019(3)
C24	0.031(3)	0.062(4)	0.099(6)	0.013(4)	-0.004(3)	-0.005(3)
C25	0.036(3)	0.046(3)	0.073(4)	0.015(3)	-0.003(3)	-0.004(2)
C26	0.035(3)	0.034(3)	0.080(5)	0.000(3)	-0.002(3)	-0.008(2)
C27	0.030(2)	0.063(3)	0.043(3)	0.012(3)	0.012(2)	-0.012(2)
C28	0.022(2)	0.044(3)	0.053(3)	-0.007(2)	0.010(2)	-0.005(2)
C29	0.025(2)	0.056(3)	0.040(3)	0.010(2)	0.002(2)	-0.015(2)
C30	0.027(2)	0.083(4)	0.049(3)	-0.036(3)	0.009(2)	-0.013(3)
C36	0.078(5)	0.081(5)	0.044(4)	0.014(3)	-0.011(3)	-0.010(4)
C37	0.086(5)	0.088(5)	0.046(4)	0.004(3)	0.038(4)	-0.007(4)
C38	0.110(6)	0.080(5)	0.058(5)	-0.035(4)	0.036(4)	-0.019(4)
C39	0.068(4)	0.026(2)	0.053(4)	-0.001(2)	0.015(3)	0.004(2)
C40	0.061(4)	0.060(4)	0.085(5)	0.001(3)	0.039(4)	0.025(3)
C41	0.040(3)	0.048(3)	0.050(3)	0.010(3)	-0.002(2)	0.011(2)

5.2.16  $\{[(\text{Me}_3\text{SiNPPh}_2)_2\text{CH}]\text{Sm}(\text{C}_5\text{Me}_5)\text{Cl}\} (\mathbf{8b}) \times \frac{1}{2} \text{Toluol}$ 

Summenformel	$\text{C}_{44.5}\text{H}_{58}\text{ClN}_2\text{P}_2\text{Si}_2\text{Sm}$
Molare Masse [ $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ]	924.85
Raumgruppe	$P2_1/c$ (No. 14:b1)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	2097.38(13), 1565.68(8), 1460.19(9)
$\beta$ [°]	105.776(7)
Volumen [ $10^6 \text{ pm}^3$ ]	4614.4(5)
Röntgenographische Dichte [ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ]	1.331
Messgerät	Stoe IPDS I
Strahlungsquelle	Ag- $\text{K}\alpha$ ( $\lambda = 56.087 \text{ pm}$ )
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	keine
Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]	0.792
Gemessene Reflexe	46628
Unabhängige Reflexe	11565 [ $R_{\text{int}} = 0.0351$ ]
Beobachtete Reflexe [ $I > 2\sigma(I)$ ]	9701
Daten / Parameter	11565 / 448
$R_1; wR_2$	0.0367; 0.1055

Atom	x	y	z	$U_{\text{eq/iso}}$
Sm	0.311486(7)	1.075492(10)	-0.371496(10)	0.02177(6)
Cl1	0.28015(5)	1.18512(6)	-0.51349(7)	0.0442(2)
P1	0.26275(3)	0.88486(5)	-0.40411(5)	0.02085(14)
P2	0.21306(3)	1.00058(5)	-0.26341(5)	0.01941(14)
Si1	0.25195(6)	0.95352(8)	-0.60297(7)	0.0407(2)
Si2	0.16956(4)	1.18720(6)	-0.32473(6)	0.0290(2)
N1	0.27057(13)	0.9553(2)	-0.4798(2)	0.0269(5)
N2	0.21311(12)	1.0918(2)	-0.3119(2)	0.0231(5)
C1	0.27070(13)	0.9347(2)	-0.2952(2)	0.0201(5)
C2	0.32846(15)	0.8050(2)	-0.3796(2)	0.0287(6)
C3	0.34394(18)	0.7572(2)	-0.2967(3)	0.0401(8)
C4	0.3937(2)	0.6954(3)	-0.2817(4)	0.0550(11)
C5	0.4281(2)	0.6821(3)	-0.3484(4)	0.0617(14)
C6	0.4138(2)	0.7296(3)	-0.4285(4)	0.0638(14)
C7	0.3645(2)	0.7913(3)	-0.4458(3)	0.0463(9)
C8	0.18670(14)	0.8246(2)	-0.4480(2)	0.0261(6)
C9	0.1831(2)	0.7374(3)	-0.4303(3)	0.0465(9)
C10	0.1240(2)	0.6936(3)	-0.4654(4)	0.0675(14)
C11	0.0682(2)	0.7360(3)	-0.5181(4)	0.0603(13)
C12	0.0710(2)	0.8204(3)	-0.5343(4)	0.0578(12)
C13	0.1299(2)	0.8657(3)	-0.4997(3)	0.0417(8)
C14	0.24211(15)	1.0046(2)	-0.1339(2)	0.0257(6)
C15	0.2476(2)	1.0830(2)	-0.0888(2)	0.0384(8)
C16	0.2709(3)	1.0888(3)	0.0096(3)	0.0598(13)
C17	0.2894(3)	1.0163(3)	0.0627(3)	0.0576(12)

Atom	x	y	z	$U_{eq/iso}$
C18	0.2851(2)	0.9385(3)	0.0197(3)	0.0516(11)
C19	0.2611(2)	0.9321(2)	-0.0790(2)	0.0374(8)
C20	0.13090(14)	0.9525(2)	-0.2896(2)	0.0251(6)
C21	0.1227(2)	0.8726(3)	-0.2540(3)	0.0478(10)
C22	0.0606(2)	0.8352(3)	-0.2734(3)	0.0599(13)
C23	0.0062(2)	0.8760(3)	-0.3292(3)	0.0504(10)
C24	0.0136(2)	0.9540(3)	-0.3667(4)	0.0561(11)
C25	0.0757(2)	0.9925(3)	-0.3475(3)	0.0414(8)
C26	0.4177(2)	1.1781(3)	-0.2983(4)	0.0497(10)
C27	0.4394(2)	1.1194(3)	-0.3554(3)	0.0419(9)
C28	0.4439(2)	1.0397(3)	-0.3125(3)	0.0389(8)
C29	0.4245(2)	1.0468(3)	-0.2292(3)	0.0418(9)
C30	0.4083(2)	1.1334(3)	-0.2192(3)	0.0520(12)
C31	0.4144(3)	1.2726(4)	-0.3169(5)	0.088(2)
C32	0.4600(3)	1.1370(4)	-0.4448(4)	0.0728(15)
C33	0.4714(3)	0.9597(4)	-0.3456(4)	0.0738(15)
C34	0.4305(3)	0.9798(4)	-0.1531(4)	0.0736(15)
C35	0.3944(3)	1.1745(5)	-0.1336(5)	0.086(2)
C36	0.1795(2)	1.0225(4)	-0.6579(3)	0.0637(13)
C37	0.3262(3)	0.9947(4)	-0.6372(3)	0.0630(13)
C38	0.2312(3)	0.8430(4)	-0.6555(3)	0.0697(15)
C39	0.2311(2)	1.2753(3)	-0.2933(3)	0.0437(8)
C40	0.1117(2)	1.1994(3)	-0.2475(3)	0.0549(11)
C41	0.1206(2)	1.2004(3)	-0.4519(3)	0.0443(9)
C42	0.0815(7)	0.4550(9)	-0.5409(10)	0.173(5)
C43	0.0278(6)	0.4858(9)	-0.5194(9)	0.077(3)
C44	-0.0290(4)	0.5184(6)	-0.5811(6)	0.102(2)
C45	-0.0807(10)	0.5451(13)	-0.5545(14)	0.116(5)
C46	0.0257(9)	0.4884(11)	-0.6020(12)	0.104(5)

Atom	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{23}$	$U_{13}$	$U_{12}$
Sm	0.02035(8)	0.02004(9)	0.02520(8)	0.00097(5)	0.00666(5)	-0.00352(5)
Cl1	0.0569(5)	0.0363(5)	0.0381(4)	0.0131(4)	0.0104(4)	-0.0024(4)
P1	0.0201(3)	0.0177(4)	0.0255(3)	-0.0017(3)	0.0076(3)	0.0010(2)
P2	0.0201(3)	0.0182(4)	0.0204(3)	0.0009(2)	0.0063(2)	0.0008(2)
Si1	0.0551(6)	0.0448(6)	0.0238(4)	-0.0038(4)	0.0137(4)	-0.0058(5)
Si2	0.0322(4)	0.0228(4)	0.0330(4)	0.0032(3)	0.0106(3)	0.0083(3)
N1	0.0331(13)	0.0262(14)	0.0237(12)	-0.0010(10)	0.0115(10)	0.0002(10)
N2	0.0260(12)	0.0191(13)	0.0245(11)	0.0031(9)	0.0075(9)	0.0036(9)
C1	0.0200(12)	0.0166(14)	0.0231(12)	-0.0005(9)	0.0045(10)	0.0019(9)
C2	0.0218(13)	0.021(2)	0.044(2)	-0.0034(12)	0.0089(12)	0.0022(11)
C3	0.037(2)	0.030(2)	0.048(2)	0.0001(15)	0.0026(15)	0.0091(14)
C4	0.044(2)	0.034(2)	0.072(3)	0.0045(19)	-0.009(2)	0.012(2)
C5	0.029(2)	0.040(3)	0.110(4)	-0.008(2)	0.008(2)	0.013(2)
C6	0.042(2)	0.052(3)	0.110(4)	-0.007(3)	0.044(3)	0.012(2)
C7	0.042(2)	0.036(2)	0.071(3)	0.0011(18)	0.033(2)	0.008(2)
C8	0.0247(14)	0.024(2)	0.0304(14)	-0.0059(11)	0.0086(11)	-0.0021(11)
C9	0.039(2)	0.031(2)	0.065(3)	-0.003(2)	0.006(2)	-0.0054(15)
C10	0.051(3)	0.039(3)	0.109(4)	-0.013(3)	0.014(3)	-0.019(2)
C11	0.035(2)	0.048(3)	0.092(4)	-0.026(2)	0.009(2)	-0.016(2)



Atom	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
C12	0.027(2)	0.068(3)	0.070(3)	-0.009(2)	0.001(2)	-0.001(2)
C13	0.029(2)	0.043(2)	0.050(2)	-0.001(2)	0.0043(15)	0.0020(14)
C14	0.0263(14)	0.030(2)	0.0209(13)	0.0003(11)	0.0067(10)	-0.0018(11)
C15	0.058(2)	0.031(2)	0.026(2)	-0.0012(13)	0.0124(15)	-0.0009(15)
C16	0.103(4)	0.046(3)	0.027(2)	-0.011(2)	0.013(2)	-0.012(2)
C17	0.084(3)	0.061(3)	0.021(2)	0.001(2)	0.005(2)	-0.013(2)
C18	0.062(3)	0.058(3)	0.029(2)	0.018(2)	0.003(2)	-0.004(2)
C19	0.048(2)	0.031(2)	0.031(2)	0.0055(13)	0.0049(14)	-0.0013(14)
C20	0.0231(13)	0.0250(15)	0.0277(14)	-0.0024(11)	0.0078(11)	-0.0021(11)
C21	0.037(2)	0.045(2)	0.054(2)	0.018(2)	0.001(2)	-0.012(2)
C22	0.051(2)	0.061(3)	0.064(3)	0.019(2)	0.010(2)	-0.027(2)
C23	0.029(2)	0.066(3)	0.056(2)	0.001(2)	0.011(2)	-0.019(2)
C24	0.025(2)	0.060(3)	0.076(3)	0.005(2)	0.002(2)	-0.001(2)
C25	0.026(2)	0.036(2)	0.059(2)	0.0072(16)	0.0047(15)	-0.0001(13)
C26	0.026(2)	0.033(2)	0.080(3)	-0.0040(19)	-0.001(2)	-0.0127(14)
C27	0.0240(15)	0.055(3)	0.046(2)	0.004(2)	0.0095(14)	-0.0124(15)
C28	0.0217(14)	0.039(2)	0.054(2)	-0.006(2)	0.0074(14)	-0.0021(13)
C29	0.0242(15)	0.055(2)	0.040(2)	0.012(2)	-0.0013(13)	-0.0136(15)
C30	0.0223(15)	0.082(3)	0.049(2)	-0.032(2)	0.0059(15)	-0.014(2)
C36	0.062(3)	0.072(4)	0.045(2)	0.014(2)	-0.008(2)	-0.006(2)
C37	0.082(3)	0.075(4)	0.046(2)	-0.001(2)	0.041(2)	-0.010(3)
C38	0.102(4)	0.063(3)	0.047(2)	-0.029(2)	0.027(3)	-0.017(3)
C39	0.055(2)	0.031(2)	0.044(2)	-0.0017(15)	0.012(2)	-0.002(2)
C40	0.055(2)	0.055(3)	0.065(3)	0.001(2)	0.034(2)	0.021(2)
C41	0.040(2)	0.044(2)	0.043(2)	0.013(2)	0.0007(15)	0.010(2)

### 5.2.17 $\{[(\text{Me}_3\text{SiNPPPh}_2)_2\text{CH}]\text{Er}(\text{C}_5\text{Me}_5\text{Cl})\}$ (8c)

Summenformel	C <sub>41</sub> H <sub>54</sub> ClErN <sub>2</sub> P <sub>2</sub> Si <sub>2</sub>
Molare Masse [g•mol <sup>-1</sup> ]	895.69
Raumgruppe	$P\bar{1}$ (No. 2)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	998.40(10), 1100.62(11), 1992.4(3)
$\alpha, \beta, \gamma$ [°]	89.015(14), 88.332(14), 72.343(12)
Volumen [10 <sup>6</sup> pm <sup>3</sup> ]	2085.3(4)
Röntgenographische Dichte [g•cm <sup>-3</sup> ]	1.428
Messgerät	Stoe IPDS I
Strahlungsquelle	Ag-K $\alpha$ ( $\lambda$ = 56.087 pm)
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	keine
Absorptionskoeffizient [mm <sup>-1</sup> ]	1.202
Gemessene Reflexe	16495
Unabhängige Reflexe	7602 [R <sub>int</sub> = 0.0666]
Beobachtete Reflexe [I > 2 $\sigma$ (I)]	6244
Daten / Parameter	7602 / 405
R <sub>1</sub> ; wR <sub>2</sub>	0.0814; 0.2245

Atom	x	y	z	U <sub>eq/iso</sub>
Er	0.91707(4)	0.59901(4)	0.75134(2)	0.0217(2)
Cl1	0.7406(3)	0.4739(3)	0.75548(15)	0.0406(6)
Si1	0.7108(3)	0.6882(3)	0.59756(14)	0.0354(7)
Si2	0.6969(3)	0.6972(3)	0.90462(14)	0.0349(7)
P1	0.8659(2)	0.8472(2)	0.67035(11)	0.0205(5)
P2	0.8614(2)	0.8488(2)	0.82676(11)	0.0211(5)
N1	0.8132(8)	0.7272(7)	0.6569(4)	0.024(2)
N2	0.8095(8)	0.7272(7)	0.8432(4)	0.024(2)
C1	0.9458(9)	0.8275(8)	0.7484(4)	0.019(2)
C2	1.0025(11)	0.8628(10)	0.6117(5)	0.028(2)
C3	1.0209(12)	0.8008(11)	0.5508(5)	0.034(2)
C4	1.1198(13)	0.8161(12)	0.5040(6)	0.044(3)
C5	1.2070(14)	0.8856(12)	0.5193(6)	0.046(3)
C6	1.1938(13)	0.9447(13)	0.5795(6)	0.043(3)
C7	1.0910(12)	0.9353(11)	0.6252(6)	0.037(2)
C8	0.7268(11)	0.9970(9)	0.6623(5)	0.029(2)
C9	0.591(2)	1.001(2)	0.6510(9)	0.070(5)
C10	0.496(2)	1.117(2)	0.6444(12)	0.097(7)
C11	0.523(2)	1.2284(13)	0.6535(8)	0.073(5)
C12	0.655(2)	1.2248(12)	0.6662(7)	0.057(4)
C13	0.756(2)	1.1099(11)	0.6693(6)	0.048(3)
C14	0.7189(10)	0.9979(10)	0.8347(5)	0.030(2)
C15	0.5863(13)	0.9996(14)	0.8163(7)	0.053(3)
C16	0.477(2)	1.114(2)	0.8158(9)	0.084(6)
C17	0.505(2)	1.2246(15)	0.8367(9)	0.086(7)
C18	0.639(2)	1.2232(14)	0.8515(7)	0.066(5)
C19	0.7404(15)	1.1114(11)	0.8515(6)	0.045(3)
C20	0.9956(10)	0.8648(9)	0.8823(5)	0.025(2)
C21	1.0126(11)	0.8022(10)	0.9438(5)	0.033(2)
C22	1.1117(13)	0.8151(12)	0.9882(5)	0.041(3)
C23	1.1970(11)	0.8892(12)	0.9705(6)	0.039(3)
C24	1.1800(13)	0.9535(11)	0.9088(6)	0.040(3)
C25	1.0824(11)	0.9389(10)	0.8650(5)	0.032(2)
C26	1.1032(6)	0.3791(5)	0.7168(3)	0.047(3)
C27	1.1005(6)	0.3786(5)	0.7876(3)	0.050(3)
C28	1.1596(6)	0.4721(5)	0.8082(3)	0.038(3)
C29	1.1989(5)	0.5303(5)	0.7503(2)	0.034(2)
C30	1.1640(5)	0.4728(5)	0.6938(3)	0.038(3)
C31	1.0507(10)	0.2948(9)	0.6737(4)	0.097(6)
C32	1.0445(10)	0.2937(8)	0.8328(4)	0.084(5)
C33	1.1776(9)	0.5039(8)	0.8794(4)	0.061(4)
C34	1.2659(9)	0.6349(8)	0.7490(4)	0.062(4)
C35	1.1875(9)	0.5056(8)	0.6218(4)	0.056(3)
C36	0.676(2)	0.798(2)	0.5220(6)	0.064(4)
C37	0.5379(14)	0.6888(15)	0.6340(7)	0.054(3)
C38	0.8024(2)	0.5243(13)	0.5681(7)	0.056(4)
C39	0.5263(14)	0.6972(15)	0.8697(7)	0.053(3)
C40	0.782(2)	0.5349(14)	0.9398(7)	0.057(4)
C41	0.656(2)	0.815(2)	0.9747(7)	0.066(4)

Atom	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
Er	0.0212(3)	0.0130(2)	0.0300(3)	0.00014(15)	-0.00096(15)	-0.0037(2)
C11	0.0437(15)	0.0307(13)	0.055(2)	-0.0027(11)	0.0019(12)	-0.0231(12)
Si1	0.045(2)	0.041(2)	0.0300(14)	0.0010(12)	-0.0095(12)	-0.0255(15)
Si2	0.041(2)	0.042(2)	0.0288(14)	-0.0029(12)	0.0081(11)	-0.0218(14)
P1	0.0208(11)	0.0155(11)	0.0254(11)	0.0023(8)	-0.0032(8)	-0.0057(9)
P2	0.0213(11)	0.0166(11)	0.0247(11)	-0.0012(8)	-0.0015(8)	-0.0043(9)
N1	0.026(4)	0.020(4)	0.027(4)	0.000(3)	-0.002(3)	-0.010(3)
N2	0.025(4)	0.020(4)	0.029(4)	-0.002(3)	-0.001(3)	-0.011(3)
C1	0.017(4)	0.012(4)	0.029(4)	0.001(3)	-0.008(3)	-0.005(3)
C2	0.029(5)	0.028(5)	0.026(5)	0.010(4)	-0.003(4)	-0.007(4)
C3	0.038(6)	0.032(5)	0.035(5)	0.001(4)	-0.006(4)	-0.016(5)
C4	0.047(7)	0.049(7)	0.033(6)	-0.002(5)	0.014(5)	-0.013(6)
C5	0.056(8)	0.046(7)	0.043(6)	0.010(5)	0.004(5)	-0.026(6)
C6	0.041(6)	0.056(7)	0.041(6)	0.009(5)	-0.008(5)	-0.029(6)
C7	0.043(6)	0.034(6)	0.038(6)	-0.002(4)	-0.001(4)	-0.019(5)
C8	0.039(6)	0.023(5)	0.023(4)	0.002(3)	-0.013(4)	-0.006(4)
C9	0.044(8)	0.055(9)	0.111(13)	-0.008(8)	-0.027(8)	-0.014(7)
C10	0.048(9)	0.097(15)	0.14(2)	0.000(13)	-0.053(11)	-0.006(10)
C11	0.080(11)	0.028(7)	0.087(11)	-0.012(7)	-0.043(9)	0.025(7)
C12	0.080(10)	0.029(6)	0.057(8)	0.002(5)	-0.014(7)	-0.006(7)
C13	0.069(9)	0.024(5)	0.047(7)	-0.003(5)	-0.005(6)	-0.005(6)
C14	0.027(5)	0.030(5)	0.026(5)	0.006(4)	-0.001(4)	0.000(4)
C15	0.028(6)	0.047(8)	0.075(9)	0.008(6)	0.007(5)	0.003(6)
C16	0.043(8)	0.092(15)	0.093(12)	0.037(11)	0.018(8)	0.011(9)
C17	0.071(11)	0.040(9)	0.102(12)	0.024(8)	0.046(9)	0.047(8)
C18	0.084(12)	0.038(7)	0.054(8)	-0.009(6)	0.006(7)	0.013(8)
C19	0.059(8)	0.029(6)	0.041(6)	-0.001(5)	0.002(5)	-0.003(6)
C20	0.030(5)	0.017(4)	0.027(5)	-0.010(3)	0.000(4)	-0.004(4)
C21	0.034(5)	0.033(5)	0.030(5)	-0.003(4)	-0.001(4)	-0.009(5)
C22	0.047(7)	0.043(6)	0.031(5)	0.005(4)	-0.004(5)	-0.012(6)
C23	0.028(5)	0.046(7)	0.039(6)	-0.006(5)	-0.010(4)	-0.006(5)
C24	0.049(7)	0.037(6)	0.041(6)	-0.003(5)	-0.003(5)	-0.025(6)
C25	0.036(6)	0.030(5)	0.034(5)	-0.005(4)	0.002(4)	-0.015(5)
C26	0.033(6)	0.031(6)	0.074(8)	-0.024(6)	0.006(5)	-0.004(5)
C27	0.035(6)	0.028(6)	0.079(9)	0.019(6)	0.012(6)	0.000(5)
C28	0.035(6)	0.030(6)	0.039(6)	0.003(4)	-0.002(4)	0.005(5)
C29	0.010(4)	0.035(6)	0.053(6)	-0.002(5)	-0.001(4)	0.001(4)
C30	0.030(5)	0.034(6)	0.037(6)	0.001(4)	-0.004(4)	0.008(5)
C36	0.085(11)	0.092(11)	0.030(6)	0.018(7)	-0.023(6)	-0.047(9)
C37	0.043(7)	0.063(9)	0.065(8)	0.006(7)	-0.010(6)	-0.029(7)
C38	0.084(10)	0.045(7)	0.043(7)	-0.004(5)	-0.012(6)	-0.026(7)
C39	0.043(7)	0.069(9)	0.055(8)	-0.008(6)	0.013(6)	-0.028(7)
C40	0.077(10)	0.053(8)	0.042(7)	0.009(6)	0.003(6)	-0.022(7)
C41	0.081(11)	0.085(11)	0.047(8)	-0.029(7)	0.026(7)	-0.050(9)

5.2.18  $[(\text{Me}_3\text{SiNPPPh}_2)_2\text{CH}]_2\text{Sm}(\text{C}_5\text{Me}_5)(\text{NPh}_2)$  (9)

Summenformel	$\text{C}_{53}\text{H}_{64}\text{N}_3\text{P}_2\text{Si}_2\text{Sm}$
Molare Masse [ $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ]	1011.54
Raumgruppe	C2/c (No. 15:b1)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1986.16(9), 1255.49(5), 4052.63(18)
$\beta$ [°]	91.36(3)
Volumen [ $10^6 \text{ pm}^3$ ]	10102.8(8)
Röntgenographische Dichte [ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ]	1.330
Messgerät	Stoe IPDS I
Strahlungsquelle	Ag- $\text{K}\alpha$ ( $\lambda = 56.087 \text{ pm}$ )
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	keine
Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]	0.703
Gemessene Reflexe	20485
Unabhängige Reflexe	12099 [ $R_{\text{int}} = 0.0457$ ]
Beobachtete Reflexe [ $I > 2\sigma(I)$ ]	8872
Daten / Parameter	12099 / 536
$R_1; wR_2$	0.0532; 0.1276

Atom	x	y	z	$U_{\text{eq/iso}}$
Sm	0.701606(12)	0.53764(2)	0.848107(5)	0.02237(7)
Si1	0.62793(8)	0.24857(11)	0.84634(4)	0.0341(3)
Si2	0.80961(8)	0.67904(14)	0.91333(4)	0.0385(3)
P1	0.57526(6)	0.43606(9)	0.88425(3)	0.0219(2)
P2	0.66283(6)	0.61552(9)	0.92047(3)	0.0242(2)
N1	0.6270(2)	0.3809(3)	0.85966(9)	0.0264(8)
N2	0.7342(2)	0.6158(3)	0.90258(9)	0.0290(8)
N3	0.8010(2)	0.4326(4)	0.84721(10)	0.0333(9)
C1	0.6015(2)	0.5647(3)	0.89330(10)	0.0239(9)
C2	0.5648(2)	0.3528(4)	0.92051(11)	0.0263(9)
C3	0.6213(3)	0.3025(4)	0.93453(13)	0.0364(11)
C4	0.6163(3)	0.2428(5)	0.96304(14)	0.0448(14)
C5	0.5549(4)	0.2313(5)	0.97801(13)	0.0468(15)
C6	0.4987(3)	0.2807(5)	0.96476(13)	0.0441(14)
C7	0.5035(3)	0.3415(5)	0.93644(12)	0.0362(11)
C8	0.4908(2)	0.4584(4)	0.86675(11)	0.0287(9)
C9	0.4454(3)	0.5250(5)	0.88214(14)	0.0389(12)
C10	0.3838(3)	0.5484(6)	0.8676(2)	0.0523(15)
C11	0.3667(3)	0.5070(6)	0.8370(2)	0.055(2)
C12	0.4108(3)	0.4413(5)	0.82136(14)	0.0468(15)
C13	0.4730(3)	0.4162(4)	0.83619(12)	0.0344(11)
C14	0.6325(3)	0.7481(4)	0.93030(12)	0.0324(11)
C15	0.6226(4)	0.8160(6)	0.9042(2)	0.064(2)
C16	0.5987(5)	0.9185(8)	0.9094(2)	0.083(3)
C17	0.5860(5)	0.9540(5)	0.9403(2)	0.073(2)

Atom	x	y	z	U <sub>eq/iso</sub>
C18	0.5962(4)	0.8874(6)	0.9665(2)	0.065(2)
C19	0.6204(4)	0.7866(5)	0.96156(14)	0.0463(14)
C20	0.6652(2)	0.5479(4)	0.96000(11)	0.0267(9)
C21	0.7254(3)	0.5132(4)	0.97408(13)	0.0401(12)
C22	0.7272(4)	0.4668(5)	1.00525(15)	0.053(2)
C23	0.6685(4)	0.4538(5)	1.02237(13)	0.050(2)
C24	0.6082(4)	0.4856(5)	1.00790(13)	0.0452(15)
C25	0.6058(3)	0.5326(4)	0.97735(12)	0.0336(10)
C26	0.7015(3)	0.1732(5)	0.8633(2)	0.056(2)
C27	0.5510(3)	0.1720(5)	0.8574(2)	0.0516(15)
C28	0.6341(4)	0.2441(6)	0.8007(2)	0.063(2)
C29	0.8445(5)	0.7353(8)	0.8762(2)	0.082(2)
C30	0.8006(5)	0.7778(7)	0.9461(2)	0.078(2)
C31	0.8788(5)	0.5871(7)	0.9279(2)	0.074(2)
C32	0.6984(3)	0.5879(4)	0.78159(11)	0.0325(11)
C33	0.7292(3)	0.6787(4)	0.79650(11)	0.0335(11)
C34	0.6788(3)	0.7334(4)	0.81414(12)	0.0352(11)
C35	0.6180(3)	0.6753(5)	0.81044(12)	0.0383(12)
C36	0.6303(3)	0.5861(5)	0.79039(12)	0.0367(12)
C37	0.7297(3)	0.5186(5)	0.75584(13)	0.0487(15)
C38	0.7967(3)	0.7251(5)	0.78792(15)	0.0470(14)
C39	0.6871(4)	0.8467(5)	0.8262(2)	0.055(2)
C40	0.5486(3)	0.7124(6)	0.8207(2)	0.055(2)
C41	0.5771(4)	0.5157(6)	0.7748(2)	0.058(2)
C42	0.8315(3)	0.3798(4)	0.87416(12)	0.0327(10)
C43	0.7942(3)	0.3634(5)	0.90309(13)	0.0424(13)
C44	0.8234(4)	0.3134(5)	0.93041(14)	0.0492(15)
C45	0.8885(4)	0.2795(5)	0.9311(2)	0.058(2)
C46	0.9260(4)	0.2957(6)	0.9030(2)	0.060(2)
C47	0.8985(3)	0.3428(5)	0.87515(15)	0.0477(14)
C48	0.8384(3)	0.4198(5)	0.81763(12)	0.0353(11)
C49	0.8299(3)	0.3299(6)	0.79807(14)	0.0490(15)
C50	0.8659(4)	0.3179(7)	0.76922(15)	0.061(2)
C51	0.9098(4)	0.3952(7)	0.75958(16)	0.065(2)
C52	0.9194(4)	0.4833(7)	0.7789(2)	0.065(2)
C53	0.8847(3)	0.4957(6)	0.80796(15)	0.0489(15)

Atom	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
Sm	0.02370(11)	0.02742(11)	0.01612(10)	0.00024(9)	0.00312(6)	-0.00299(11)
Si1	0.0378(8)	0.0276(7)	0.0372(7)	-0.0075(6)	0.0077(6)	-0.0013(6)
Si2	0.0364(8)	0.0495(9)	0.0297(7)	-0.0070(6)	0.0044(5)	-0.0186(7)
P1	0.0216(5)	0.0230(5)	0.0212(5)	0.0001(4)	0.0031(4)	-0.0022(4)
P2	0.0299(6)	0.0248(5)	0.0180(5)	-0.0028(4)	0.0056(4)	-0.0065(5)
N1	0.026(2)	0.030(2)	0.024(2)	-0.0046(15)	0.0060(14)	0.000(2)
N2	0.028(2)	0.036(2)	0.024(2)	-0.004(2)	0.0056(14)	-0.011(2)
N3	0.030(2)	0.041(2)	0.029(2)	-0.004(2)	0.008(2)	0.003(2)
C1	0.027(2)	0.022(2)	0.022(2)	-0.0019(15)	0.002(2)	-0.001(2)
C2	0.031(2)	0.026(2)	0.022(2)	0.000(2)	0.005(2)	-0.007(2)
C3	0.034(3)	0.030(3)	0.046(3)	0.006(2)	0.002(2)	0.000(2)
C4	0.061(4)	0.037(3)	0.037(3)	0.009(2)	0.001(3)	0.012(3)

Atom	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
C5	0.079(5)	0.035(3)	0.026(3)	0.004(2)	0.003(3)	-0.016(3)
C6	0.048(3)	0.058(4)	0.027(3)	-0.002(2)	0.010(2)	-0.018(3)
C7	0.035(3)	0.044(3)	0.029(2)	-0.001(2)	0.003(2)	-0.012(2)
C8	0.024(2)	0.033(2)	0.029(2)	0.004(2)	0.000(2)	-0.004(2)
C9	0.028(2)	0.049(3)	0.040(3)	0.003(2)	0.004(2)	0.000(2)
C10	0.031(3)	0.061(4)	0.065(4)	0.002(3)	-0.001(3)	0.008(3)
C11	0.032(3)	0.067(4)	0.064(4)	0.022(3)	-0.013(3)	-0.003(3)
C12	0.041(3)	0.060(4)	0.039(3)	0.011(3)	-0.013(2)	-0.019(3)
C13	0.034(3)	0.039(3)	0.030(2)	0.005(2)	-0.001(2)	-0.010(2)
C14	0.044(3)	0.024(2)	0.029(2)	-0.002(2)	0.004(2)	-0.009(2)
C17	0.100(7)	0.031(3)	0.089(6)	-0.017(4)	0.005(5)	0.007(4)
C18	0.081(5)	0.046(4)	0.068(5)	-0.020(3)	0.033(4)	0.001(4)
C19	0.068(4)	0.040(3)	0.031(3)	-0.005(2)	0.011(3)	0.000(3)
C20	0.034(2)	0.023(2)	0.023(2)	-0.003(2)	0.004(2)	-0.004(2)
C21	0.047(3)	0.038(3)	0.035(3)	0.006(2)	0.003(2)	0.001(2)
C22	0.064(4)	0.049(3)	0.045(3)	0.015(3)	-0.011(3)	0.000(3)
C23	0.084(5)	0.043(3)	0.024(2)	0.009(2)	0.000(3)	-0.005(3)
C24	0.064(4)	0.041(3)	0.031(3)	0.000(2)	0.015(2)	-0.016(3)
C25	0.038(3)	0.034(2)	0.029(2)	0.001(2)	0.010(2)	-0.005(2)
C26	0.048(4)	0.038(3)	0.081(5)	-0.010(3)	0.007(3)	0.013(3)
C27	0.050(4)	0.031(3)	0.074(4)	-0.002(3)	0.010(3)	-0.008(3)
C28	0.087(6)	0.060(4)	0.042(4)	-0.018(3)	0.011(3)	0.001(4)
C32	0.037(3)	0.044(3)	0.017(2)	0.002(2)	0.000(2)	-0.004(2)
C33	0.041(3)	0.042(3)	0.017(2)	0.008(2)	0.003(2)	-0.004(2)
C34	0.046(3)	0.033(3)	0.027(2)	0.007(2)	0.001(2)	0.000(2)
C35	0.041(3)	0.047(3)	0.027(2)	0.018(2)	0.004(2)	0.005(3)
C36	0.036(3)	0.051(3)	0.023(2)	0.012(2)	-0.0049(19)	-0.006(2)
C37	0.053(4)	0.066(4)	0.027(3)	-0.007(3)	-0.001(2)	-0.002(3)
C38	0.046(3)	0.053(4)	0.041(3)	0.013(3)	0.006(2)	-0.014(3)
C39	0.084(5)	0.040(3)	0.042(3)	0.006(3)	0.007(3)	0.003(3)
C40	0.046(4)	0.073(5)	0.047(3)	0.023(3)	0.011(3)	0.016(3)
C41	0.049(4)	0.081(5)	0.043(3)	0.012(3)	-0.010(3)	-0.025(4)
C42	0.030(3)	0.032(2)	0.035(3)	-0.003(2)	0.002(2)	0.002(2)
C43	0.044(3)	0.046(3)	0.037(3)	0.004(2)	0.005(2)	0.006(3)
C44	0.067(4)	0.047(3)	0.033(3)	0.009(2)	0.002(3)	0.001(3)
C45	0.079(5)	0.050(4)	0.043(3)	0.005(3)	-0.019(3)	0.008(4)
C46	0.050(4)	0.071(5)	0.059(4)	0.000(3)	-0.007(3)	0.020(4)
C47	0.045(3)	0.055(4)	0.044(3)	0.001(3)	0.009(2)	0.013(3)
C48	0.027(2)	0.050(3)	0.029(2)	-0.005(2)	0.0045(18)	0.005(2)
C49	0.046(3)	0.062(4)	0.039(3)	-0.018(3)	0.007(2)	-0.002(3)
C50	0.053(4)	0.090(5)	0.039(3)	-0.030(3)	0.002(3)	0.008(4)
C51	0.053(4)	0.105(6)	0.038(3)	-0.008(4)	0.020(3)	0.016(4)
C52	0.052(4)	0.090(6)	0.053(4)	0.003(4)	0.028(3)	-0.009(4)
C53	0.043(3)	0.063(4)	0.041(3)	-0.006(3)	0.014(2)	-0.003(3)

5.2.19  $[(\text{Me}_3\text{SiNPPh}_2)_2\text{CH}]\text{Y}\{\text{N}(\text{PPh}_2)_2\}\text{Cl}$  (10a)

Summenformel	$\text{C}_{55}\text{H}_{59}\text{ClN}_3\text{P}_4\text{Si}_2\text{Y}$
Molare Masse [ $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ]	1066.47
Raumgruppe	$P\bar{1}$ (No. 2)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1009.6(8), 1351.6(11), 2123.8(15)
$\alpha, \beta, \gamma$ [°]	90.47(6), 101.10(6), 109.63(5)
Volumen [ $10^6 \text{ pm}^3$ ]	2670(4)
Röntgenographische Dichte [ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ]	1.326
Messgerät	Stoe IPDS II
Strahlungsquelle	Mo- $\text{K}\alpha$ ( $\lambda = 71.073 \text{ pm}$ )
Meßtemperatur [K]	173(2)
Absorptionskorrektur	keine
Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]	1.346
Gemessene Reflexe	17437
Unabhängige Reflexe	8844 [ $R_{\text{int}} = 0.0453$ ]
Beobachtete Reflexe [ $I > 2\sigma(I)$ ]	6494
Daten / Parameter	8844 / 601
$R_1; wR_2$	0.0457; 0.1121

Atom	x	y	z	$U_{\text{eq/iso}}$
Y	0.65345(3)	0.64478(3)	0.74598(2)	0.03363(11)
Cl	0.40057(11)	0.59950(11)	0.76936(6)	0.0620(3)
Si1	0.64834(11)	0.52439(9)	0.90223(5)	0.0432(3)
Si2	0.48320(11)	0.42736(9)	0.62018(6)	0.0449(3)
N1	0.7334(3)	0.5748(2)	0.83917(14)	0.0369(7)
N2	0.6404(3)	0.5080(2)	0.67089(14)	0.0354(7)
N3	0.7240(3)	0.8248(2)	0.73691(15)	0.0371(7)
P1	0.88080(9)	0.56723(7)	0.82535(4)	0.0341(2)
P2	0.80796(9)	0.52502(7)	0.67748(4)	0.0337(2)
P3	0.60750(10)	0.80565(8)	0.66569(5)	0.0391(2)
P4	0.80016(10)	0.94993(8)	0.77387(5)	0.0404(2)
C1	0.8958(3)	0.6069(3)	0.7482(2)	0.0329(7)
C2	1.0375(4)	0.6562(3)	0.8789(2)	0.0365(8)
C3	1.0201(4)	0.7155(3)	0.9289(2)	0.0417(9)
C4	1.1397(4)	0.7828(3)	0.9720(2)	0.0503(10)
C5	1.2752(4)	0.7903(3)	0.9656(2)	0.0542(11)
C6	1.2949(4)	0.7335(3)	0.9159(2)	0.0523(11)
C7	1.1758(4)	0.6666(3)	0.8721(2)	0.0438(9)
C8	0.8830(4)	0.4354(3)	0.8377(2)	0.0403(9)
C9	0.9984(5)	0.4132(3)	0.8738(2)	0.0498(10)
C10	0.9894(6)	0.3099(4)	0.8829(2)	0.0607(12)
C11	0.8658(6)	0.2283(3)	0.8565(2)	0.0667(14)
C12	0.7505(5)	0.2479(3)	0.8196(2)	0.0590(12)
C13	0.7581(4)	0.3506(3)	0.8106(2)	0.0466(10)
C14	0.8581(4)	0.4073(3)	0.6764(2)	0.0374(8)

Atom	x	y	z	$U_{eq/iso}$
C15	0.9971(4)	0.4171(3)	0.7072(2)	0.0456(9)
C16	1.0448(5)	0.3317(4)	0.7057(2)	0.0573(11)
C17	0.9535(5)	0.2362(4)	0.6737(2)	0.0591(12)
C18	0.8172(5)	0.2258(3)	0.6431(2)	0.0541(11)
C19	0.7669(4)	0.3105(3)	0.6443(2)	0.0459(9)
C20	0.8799(4)	0.5935(3)	0.6117(2)	0.0374(8)
C21	0.9886(4)	0.5759(3)	0.5868(2)	0.0470(10)
C22	1.0389(5)	0.6302(3)	0.5368(2)	0.0524(11)
C23	0.9834(5)	0.7043(3)	0.5103(2)	0.0498(10)
C24	0.8745(4)	0.7234(3)	0.5340(2)	0.0472(9)
C25	0.8241(4)	0.6693(3)	0.5844(2)	0.0406(9)
C26	0.6034(5)	0.6320(4)	0.9387(2)	0.0583(11)
C27	0.7628(5)	0.4787(4)	0.9669(2)	0.0577(11)
C28	0.4813(5)	0.4085(4)	0.8729(2)	0.0672(14)
C29	0.3551(4)	0.5014(4)	0.6034(2)	0.0585(12)
C30	0.5153(5)	0.3853(4)	0.5418(2)	0.0626(13)
C31	0.3991(5)	0.3086(4)	0.6621(3)	0.0694(14)
C32	0.6947(4)	0.8881(3)	0.6072(2)	0.0421(9)
C33	0.8435(4)	0.9403(3)	0.6173(2)	0.0464(9)
C34	0.9045(5)	1.0009(4)	0.5714(2)	0.0557(11)
C35	0.8196(5)	1.0089(4)	0.5145(2)	0.0603(12)
C36	0.6725(6)	0.9579(4)	0.5034(2)	0.0630(12)
C37	0.6110(5)	0.8991(4)	0.5489(2)	0.0529(10)
C38	0.4700(4)	0.8654(3)	0.6698(2)	0.0401(8)
C39	0.3285(4)	0.7981(3)	0.6641(2)	0.0495(10)
C40	0.2191(4)	0.8400(4)	0.6644(2)	0.0575(11)
C41	0.2522(5)	0.9474(4)	0.6710(2)	0.0557(11)
C42	0.3913(5)	1.0142(4)	0.6769(2)	0.0526(10)
C43	0.4994(4)	0.9742(3)	0.6756(2)	0.0468(9)
C44	0.7597(4)	0.9334(3)	0.8552(2)	0.0422(9)
C45	0.6314(4)	0.9442(3)	0.8624(2)	0.0529(11)
C46	0.5978(5)	0.9464(4)	0.9227(2)	0.0587(12)
C47	0.6897(5)	0.9338(3)	0.9768(2)	0.0566(12)
C48	0.8159(5)	0.9211(4)	0.9700(2)	0.0587(11)
C49	0.8512(4)	0.9217(3)	0.9103(2)	0.0501(10)
C50	0.9955(4)	0.9770(3)	0.7950(2)	0.0426(9)
C51	1.0798(4)	1.0832(3)	0.8052(2)	0.0556(11)
C52	1.2283(5)	1.1132(4)	0.8241(2)	0.0632(13)
C53	1.2932(4)	1.0387(4)	0.8317(2)	0.0605(12)
C54	1.2112(5)	0.9342(4)	0.8203(2)	0.0562(11)
C55	1.0629(4)	0.9034(3)	0.8017(2)	0.0454(9)

Atom	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{23}$	$U_{13}$	$U_{12}$
Y	0.0318(2)	0.0329(2)	0.0366(2)	0.00164(15)	0.00872(13)	0.01071(13)
Cl	0.0396(5)	0.0895(9)	0.0598(6)	0.0146(6)	0.0182(5)	0.0213(5)
Si1	0.0393(5)	0.0462(6)	0.0397(6)	0.0062(5)	0.0131(4)	0.0063(5)
Si2	0.0359(5)	0.0393(6)	0.0538(7)	-0.0081(5)	0.0016(5)	0.0100(4)
N1	0.0353(15)	0.037(2)	0.034(2)	-0.0008(14)	0.0060(12)	0.0074(12)
N2	0.0313(15)	0.034(2)	0.039(2)	-0.0019(14)	0.0072(12)	0.0083(12)
N3	0.0340(15)	0.036(2)	0.041(2)	0.0031(14)	0.0054(12)	0.0125(13)



Atom	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
P1	0.0334(5)	0.0315(5)	0.0363(5)	0.0030(4)	0.0071(4)	0.0095(4)
P2	0.0333(5)	0.0307(5)	0.0375(5)	0.0015(4)	0.0093(4)	0.0103(4)
P3	0.0358(5)	0.0395(5)	0.0425(5)	0.0032(5)	0.0073(4)	0.0140(4)
P4	0.0382(5)	0.0346(5)	0.0483(6)	0.0014(5)	0.0077(4)	0.0130(4)
C1	0.032(2)	0.032(2)	0.034(2)	0.0002(15)	0.0067(14)	0.0098(14)
C2	0.035(2)	0.031(2)	0.041(2)	0.005(2)	0.0063(15)	0.0106(14)
C3	0.041(2)	0.039(2)	0.041(2)	0.001(2)	0.011(2)	0.008(2)
C4	0.055(2)	0.043(2)	0.041(2)	-0.005(2)	0.006(2)	0.002(2)
C5	0.044(2)	0.046(2)	0.056(3)	0.002(2)	-0.005(2)	0.003(2)
C6	0.038(2)	0.044(2)	0.070(3)	0.003(2)	0.002(2)	0.012(2)
C7	0.039(2)	0.040(2)	0.054(2)	0.001(2)	0.007(2)	0.016(2)
C8	0.045(2)	0.035(2)	0.040(2)	0.002(2)	0.011(2)	0.012(2)
C9	0.064(3)	0.036(2)	0.049(2)	0.007(2)	0.008(2)	0.019(2)
C10	0.085(3)	0.046(3)	0.056(3)	0.012(2)	0.009(2)	0.032(2)
C11	0.110(4)	0.031(2)	0.064(3)	0.009(2)	0.032(3)	0.021(2)
C12	0.076(3)	0.035(2)	0.057(3)	0.002(2)	0.018(2)	0.005(2)
C13	0.053(2)	0.035(2)	0.042(2)	-0.002(2)	0.012(2)	0.002(2)
C14	0.040(2)	0.035(2)	0.038(2)	0.002(2)	0.0134(15)	0.0099(15)
C15	0.046(2)	0.047(2)	0.048(2)	0.001(2)	0.011(2)	0.021(2)
C16	0.064(3)	0.061(3)	0.060(3)	0.003(2)	0.013(2)	0.038(2)
C17	0.085(3)	0.051(3)	0.060(3)	0.007(2)	0.024(2)	0.042(2)
C18	0.072(3)	0.032(2)	0.062(3)	0.000(2)	0.025(2)	0.017(2)
C19	0.051(2)	0.037(2)	0.052(2)	0.004(2)	0.018(2)	0.015(2)
C20	0.037(2)	0.035(2)	0.037(2)	-0.003(2)	0.0080(15)	0.0074(15)
C21	0.052(2)	0.044(2)	0.051(2)	0.006(2)	0.020(2)	0.019(2)
C22	0.061(3)	0.046(2)	0.057(3)	0.006(2)	0.033(2)	0.016(2)
C23	0.061(3)	0.044(2)	0.040(2)	0.006(2)	0.021(2)	0.006(2)
C24	0.055(2)	0.040(2)	0.043(2)	0.006(2)	0.008(2)	0.013(2)
C25	0.044(2)	0.037(2)	0.040(2)	0.003(2)	0.009(2)	0.013(2)
C26	0.059(3)	0.071(3)	0.053(3)	0.008(2)	0.026(2)	0.023(2)
C27	0.061(3)	0.064(3)	0.047(2)	0.018(2)	0.019(2)	0.016(2)
C28	0.055(3)	0.068(3)	0.059(3)	0.011(3)	0.017(2)	-0.007(2)
C29	0.043(2)	0.061(3)	0.065(3)	-0.015(2)	-0.005(2)	0.020(2)
C30	0.067(3)	0.064(3)	0.056(3)	-0.017(2)	-0.006(2)	0.033(2)
C31	0.049(3)	0.043(2)	0.108(4)	0.002(3)	0.022(3)	0.002(2)
C32	0.050(2)	0.040(2)	0.044(2)	0.007(2)	0.017(2)	0.021(2)
C33	0.047(2)	0.049(2)	0.045(2)	0.000(2)	0.0099(18)	0.019(2)
C34	0.056(3)	0.051(3)	0.060(3)	0.002(2)	0.026(2)	0.011(2)
C35	0.084(3)	0.051(3)	0.062(3)	0.015(2)	0.040(3)	0.030(2)
C36	0.081(3)	0.075(3)	0.048(3)	0.019(3)	0.018(2)	0.044(3)
C37	0.052(2)	0.064(3)	0.049(2)	0.011(2)	0.012(2)	0.027(2)
C38	0.039(2)	0.043(2)	0.039(2)	0.006(2)	0.0056(15)	0.017(2)
C39	0.042(2)	0.045(2)	0.060(3)	0.001(2)	0.008(2)	0.014(2)
C40	0.036(2)	0.069(3)	0.066(3)	0.004(2)	0.010(2)	0.017(2)
C41	0.054(3)	0.075(3)	0.051(2)	0.009(2)	0.010(2)	0.040(2)
C42	0.061(3)	0.049(2)	0.056(3)	0.010(2)	0.015(2)	0.028(2)
C43	0.043(2)	0.044(2)	0.053(2)	0.007(2)	0.009(2)	0.014(2)
C44	0.041(2)	0.032(2)	0.049(2)	-0.009(2)	0.006(2)	0.009(2)
C45	0.041(2)	0.057(3)	0.058(3)	0.003(2)	0.011(2)	0.012(2)
C46	0.049(2)	0.058(3)	0.073(3)	0.004(2)	0.029(2)	0.014(2)
C47	0.058(3)	0.051(3)	0.054(3)	-0.007(2)	0.024(2)	0.004(2)

Atom	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
C48	0.054(3)	0.059(3)	0.050(3)	0.004(2)	0.005(2)	0.007(2)
C49	0.045(2)	0.055(3)	0.051(2)	0.002(2)	0.012(2)	0.016(2)
C50	0.037(2)	0.040(2)	0.046(2)	-0.003(2)	0.008(2)	0.008(2)
C51	0.050(2)	0.041(2)	0.074(3)	-0.001(2)	0.010(2)	0.015(2)
C52	0.048(2)	0.047(3)	0.079(3)	-0.007(2)	0.009(2)	-0.002(2)
C53	0.037(2)	0.077(3)	0.062(3)	0.004(3)	0.008(2)	0.013(2)
C54	0.050(2)	0.067(3)	0.058(3)	0.016(2)	0.011(2)	0.028(2)
C55	0.043(2)	0.037(2)	0.055(2)	0.007(2)	0.011(2)	0.012(2)

### 5.2.20 $[(\text{Me}_3\text{SiNPPH}_2)_2\text{CH}]_2\text{La}\{\text{N}(\text{PPh}_2)_2\}\text{Cl} \cdot 2\text{THF}$ (10b) × THF

Summenformel	C <sub>59</sub> H <sub>67</sub> ClLaN <sub>3</sub> OP <sub>4</sub> Si <sub>2</sub>
Molare Masse [g•mol <sup>-1</sup> ]	1188.58
Raumgruppe	P2 <sub>1</sub> /n (No. 14:b2)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1060.0(2), 2772.9(6), 2057.1(4)
β [°]	99.66(3)
Volumen [10 <sup>6</sup> pm <sup>3</sup> ]	5960(2)
Röntgenographische Dichte [g•cm <sup>-3</sup> ]	1.325
Messgerät	Bruker Kappa CCD
Strahlungsquelle	Mo-K <sub>α</sub> (λ= 71.073 pm)
Meßtemperatur [K]	153(2)
Absorptionskorrektur	empirisch
Absorptionskoeffizient [mm <sup>-1</sup> ]	0.950
Gemessene Reflexe	72605
Unabhängige Reflexe	18281 [R <sub>int</sub> = 0.0625]
Beobachtete Reflexe [I>2σ(I)]	13734
Daten / Parameter	18281 / 621
R <sub>1</sub> ; wR <sub>2</sub>	0.0702; 0.1815

Atom	x	y	z	U <sub>eq/iso</sub>
La	0.80067(2)	0.616934(8)	0.756387(12)	0.02148(7)
Cl	1.01522(12)	0.67070(4)	0.74917(7)	0.0376(3)
Si1	0.70920(14)	0.63118(5)	0.57592(6)	0.0312(3)
Si2	0.86965(14)	0.64036(5)	0.93237(6)	0.0320(3)
P1	0.58491(10)	0.68794(4)	0.67845(5)	0.0199(2)
P2	0.64783(11)	0.69034(4)	0.83736(5)	0.0211(2)
P3	0.64322(11)	0.52884(4)	0.78192(6)	0.0234(2)
P4	0.87065(11)	0.47736(4)	0.74899(6)	0.0223(2)
N1	0.6820(4)	0.65173(12)	0.6515(2)	0.0227(7)
N2	0.7661(4)	0.65530(13)	0.8618(2)	0.0234(7)
N3	0.7830(3)	0.52890(12)	0.7544(2)	0.0223(7)
C1	0.5800(4)	0.67196(13)	0.7594(2)	0.0191(7)
C2	0.4253(4)	0.68413(15)	0.6299(2)	0.0243(8)
C3	0.3216(6)	0.6684(3)	0.6561(3)	0.053(2)

---

<b>Atom</b>	<b>x</b>	<b>y</b>	<b>z</b>	<b>U<sub>eq/iso</sub></b>
C4	0.2024(7)	0.6631(4)	0.6157(4)	0.073(3)
C5	0.1875(6)	0.6743(3)	0.5500(3)	0.052(2)
C6	0.2895(6)	0.6907(2)	0.5241(3)	0.0443(13)
C7	0.4078(5)	0.6959(2)	0.5636(2)	0.0370(11)
C8	0.6333(4)	0.75025(15)	0.6706(2)	0.0249(8)
C9	0.5462(6)	0.7878(2)	0.6734(3)	0.0401(12)
C10	0.5857(7)	0.8352(2)	0.6670(3)	0.053(2)
C11	0.7068(7)	0.8457(2)	0.6573(3)	0.0450(14)
C12	0.7932(7)	0.8088(2)	0.6537(3)	0.049(2)
C13	0.7563(5)	0.7611(2)	0.6611(3)	0.0370(11)
C14	0.6978(5)	0.75275(15)	0.8397(2)	0.0268(9)
C15	0.6121(6)	0.7900(2)	0.8468(3)	0.0411(13)
C16	0.6560(7)	0.8378(2)	0.8501(3)	0.054(2)
C17	0.7796(8)	0.8486(2)	0.8456(3)	0.056(2)
C18	0.8635(8)	0.8116(2)	0.8383(4)	0.065(2)
C19	0.8227(6)	0.7639(2)	0.8350(3)	0.0455(14)
C20	0.5272(5)	0.6889(2)	0.8907(2)	0.0276(9)
C21	0.4002(5)	0.6784(2)	0.8669(3)	0.0417(12)
C22	0.3087(7)	0.6795(3)	0.9084(3)	0.055(2)
C23	0.3450(7)	0.6906(3)	0.9741(3)	0.052(2)
C24	0.4699(7)	0.7015(3)	0.9980(3)	0.056(2)
C25	0.5615(6)	0.7008(3)	0.9570(3)	0.0456(14)
C26	0.5779(6)	0.5905(2)	0.5371(3)	0.0500(15)
C27	0.8625(5)	0.5963(2)	0.5951(3)	0.0391(11)
C28	0.7362(9)	0.6799(3)	0.5166(3)	0.066(2)
C29	0.7903(8)	0.6049(3)	0.9913(3)	0.060(2)
C30	0.9542(7)	0.6933(3)	0.9763(3)	0.061(2)
C31	0.9948(6)	0.6019(2)	0.9030(3)	0.0419(12)
C32	0.6573(5)	0.48966(15)	0.8546(2)	0.0264(9)
C33	0.5537(6)	0.4649(2)	0.8714(3)	0.0422(12)
C34	0.5656(7)	0.4387(2)	0.9304(3)	0.053(2)
C35	0.6807(7)	0.4376(2)	0.9723(3)	0.0513(15)
C36	0.7846(7)	0.4618(2)	0.9565(3)	0.0503(15)
C37	0.7733(5)	0.4873(2)	0.8977(3)	0.0360(11)
C38	0.5242(4)	0.4974(2)	0.7224(2)	0.0284(9)
C39	0.4327(6)	0.5245(3)	0.6831(3)	0.0457(14)
C40	0.3409(7)	0.5030(4)	0.6354(3)	0.074(3)
C41	0.3415(7)	0.4542(4)	0.6265(4)	0.076(3)
C42	0.4308(7)	0.4261(3)	0.6654(4)	0.067(2)
C43	0.5215(5)	0.4473(2)	0.7137(3)	0.0424(12)
C44	1.0317(4)	0.50015(15)	0.7808(2)	0.0255(8)
C45	1.1004(5)	0.4797(2)	0.8378(3)	0.0338(10)
C46	1.2176(5)	0.4981(2)	0.8677(3)	0.0419(12)
C47	1.2680(5)	0.5383(2)	0.8407(3)	0.0422(12)
C48	1.2025(5)	0.5593(2)	0.7838(3)	0.0376(11)
C49	1.0857(5)	0.5402(2)	0.7538(2)	0.0299(9)
C50	0.8779(4)	0.47229(15)	0.6604(2)	0.0251(8)
C51	0.9890(5)	0.4595(2)	0.6368(2)	0.0338(10)
C52	0.9868(6)	0.4498(2)	0.5706(3)	0.0427(13)
C53	0.8732(6)	0.4529(2)	0.5261(3)	0.0431(13)
C54	0.7618(5)	0.4655(2)	0.5482(3)	0.0372(11)

---

Atom	x	y	z	U <sub>eq/iso</sub>
C55	0.7647(5)	0.4752(2)	0.6146(2)	0.0300(9)
O1	0.2222(18)	0.3583(8)	0.7565(10)	0.264(8)
C56	0.239(3)	0.3263(10)	0.6989(13)	0.243(11)
C57	0.2762(17)	0.2854(7)	0.7367(8)	0.151(6)
C58	0.3378(19)	0.2912(7)	0.8028(9)	0.175(7)
C59	0.313(2)	0.3439(8)	0.8218(10)	0.192(8)

Atom	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
La	0.02675(13)	0.01422(10)	0.02411(12)	0.00023(8)	0.00616(8)	0.00207(9)
Cl	0.0343(6)	0.0307(5)	0.0502(7)	0.0014(5)	0.0142(5)	-0.0056(5)
Si1	0.0424(8)	0.0302(6)	0.0233(6)	0.0011(5)	0.0118(5)	0.0088(5)
Si2	0.0385(8)	0.0323(7)	0.0234(6)	-0.0015(5)	-0.0002(5)	0.0097(5)
P1	0.0233(5)	0.0154(4)	0.0216(5)	0.0011(3)	0.0051(4)	0.0011(4)
P2	0.0246(5)	0.0169(4)	0.0221(5)	-0.0010(3)	0.0051(4)	0.0017(4)
P3	0.0238(5)	0.0181(4)	0.0291(5)	0.0021(4)	0.0064(4)	0.0035(4)
P4	0.0236(5)	0.0152(4)	0.0284(5)	0.0014(4)	0.0052(4)	0.0018(4)
N1	0.027(2)	0.0189(15)	0.023(2)	-0.0004(12)	0.0062(13)	0.0041(13)
N2	0.029(2)	0.0201(15)	0.021(2)	0.0003(12)	0.0024(13)	0.0061(13)
C1	0.020(2)	0.018(2)	0.019(2)	0.0000(13)	0.0038(14)	0.0004(13)
C2	0.028(2)	0.022(2)	0.023(2)	-0.0006(15)	0.003(2)	0.0030(15)
C3	0.039(3)	0.094(5)	0.027(3)	0.006(3)	0.006(2)	-0.018(3)
C4	0.032(3)	0.134(8)	0.051(4)	0.004(4)	0.003(3)	-0.031(4)
C5	0.033(3)	0.077(5)	0.041(3)	-0.001(3)	-0.009(2)	-0.011(3)
C6	0.044(3)	0.055(3)	0.030(2)	0.008(2)	-0.006(2)	0.005(3)
C7	0.034(3)	0.047(3)	0.029(2)	0.011(2)	0.002(2)	0.000(2)
C8	0.032(2)	0.019(2)	0.024(2)	0.0014(14)	0.007(2)	-0.003(2)
C9	0.044(3)	0.020(2)	0.059(3)	0.005(2)	0.017(3)	0.003(2)
C10	0.071(4)	0.017(2)	0.072(4)	0.003(2)	0.022(3)	0.006(2)
C11	0.074(4)	0.023(2)	0.039(3)	0.004(2)	0.013(3)	-0.011(2)
C12	0.058(4)	0.034(3)	0.058(4)	0.008(2)	0.019(3)	-0.016(3)
C13	0.034(3)	0.033(2)	0.047(3)	0.005(2)	0.014(2)	-0.006(2)
C14	0.040(3)	0.017(2)	0.023(2)	-0.0019(14)	0.003(2)	0.002(2)
C15	0.043(3)	0.023(2)	0.053(3)	-0.006(2)	-0.006(2)	0.008(2)
C16	0.081(5)	0.023(2)	0.053(4)	-0.007(2)	0.001(3)	0.012(3)
C17	0.095(6)	0.021(2)	0.056(4)	-0.007(2)	0.023(4)	-0.015(3)
C18	0.081(5)	0.031(3)	0.093(5)	-0.017(3)	0.048(4)	-0.024(3)
C19	0.051(3)	0.026(2)	0.066(4)	-0.012(2)	0.029(3)	-0.011(2)
C20	0.032(2)	0.026(2)	0.027(2)	0.001(2)	0.009(2)	0.002(2)
C21	0.037(3)	0.052(3)	0.038(3)	-0.010(2)	0.014(2)	-0.009(2)
C22	0.044(4)	0.071(4)	0.054(4)	-0.014(3)	0.023(3)	-0.019(3)
C23	0.055(4)	0.060(4)	0.051(3)	-0.003(3)	0.033(3)	-0.006(3)
C24	0.059(4)	0.079(5)	0.033(3)	-0.010(3)	0.021(3)	0.006(3)
C25	0.038(3)	0.070(4)	0.029(2)	-0.007(2)	0.007(2)	0.005(3)
C26	0.056(4)	0.049(3)	0.039(3)	-0.019(3)	-0.009(3)	0.009(3)
C27	0.039(3)	0.037(3)	0.043(3)	-0.007(2)	0.014(2)	0.005(2)
C28	0.103(6)	0.057(4)	0.048(4)	0.024(3)	0.041(4)	0.017(4)
C29	0.083(5)	0.062(4)	0.039(3)	0.020(3)	0.024(3)	0.021(4)
C30	0.058(4)	0.060(4)	0.057(4)	-0.033(3)	-0.017(3)	0.010(3)
C31	0.044(3)	0.038(3)	0.041(3)	0.004(2)	0.000(2)	0.014(2)
C32	0.033(2)	0.020(2)	0.027(2)	0.0009(15)	0.007(2)	0.003(2)

Atom	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
C33	0.040(3)	0.045(3)	0.045(3)	0.015(2)	0.017(2)	0.003(2)
C34	0.055(4)	0.051(3)	0.061(4)	0.021(3)	0.028(3)	-0.002(3)
C35	0.074(5)	0.043(3)	0.038(3)	0.016(2)	0.015(3)	0.006(3)
C36	0.068(4)	0.048(3)	0.033(3)	0.010(2)	0.001(3)	0.003(3)
C37	0.041(3)	0.032(2)	0.034(2)	0.004(2)	0.003(2)	-0.003(2)
C38	0.026(2)	0.031(2)	0.030(2)	0.002(2)	0.010(2)	0.001(2)
C39	0.037(3)	0.065(4)	0.034(3)	0.007(3)	0.005(2)	0.014(3)
C40	0.045(4)	0.134(8)	0.040(3)	-0.002(4)	-0.002(3)	0.027(4)
C41	0.033(3)	0.130(8)	0.064(5)	-0.049(5)	0.004(3)	-0.008(4)
C42	0.037(3)	0.079(5)	0.086(5)	-0.042(4)	0.014(3)	-0.021(3)
C43	0.028(3)	0.040(3)	0.059(3)	-0.011(2)	0.006(2)	-0.007(2)
C44	0.028(2)	0.021(2)	0.029(2)	-0.0041(15)	0.006(2)	0.0008(15)
C45	0.033(3)	0.032(2)	0.037(2)	0.0046(19)	0.005(2)	0.008(2)
C46	0.034(3)	0.051(3)	0.038(3)	0.001(2)	-0.002(2)	0.011(2)
C47	0.028(3)	0.050(3)	0.046(3)	-0.014(2)	0.001(2)	-0.001(2)
C48	0.034(3)	0.031(2)	0.049(3)	-0.006(2)	0.010(2)	-0.004(2)
C49	0.025(2)	0.027(2)	0.037(2)	0.001(2)	0.004(2)	0.003(2)
C50	0.028(2)	0.018(2)	0.029(2)	-0.0020(15)	0.004(2)	-0.0008(15)
C51	0.031(2)	0.037(2)	0.033(2)	-0.007(2)	0.006(2)	0.002(2)
C52	0.036(3)	0.057(3)	0.037(3)	-0.011(2)	0.012(2)	0.005(2)
C53	0.046(3)	0.054(3)	0.029(2)	-0.010(2)	0.005(2)	-0.003(3)
C54	0.038(3)	0.041(3)	0.032(2)	-0.001(2)	0.002(2)	-0.001(2)
C55	0.026(2)	0.031(2)	0.032(2)	-0.004(2)	0.005(2)	-0.001(2)

### 5.2.21 $[(\text{Me}_3\text{SiNPPH}_2)_2\text{CH}]_2\text{Nd}\{\text{N}(\text{PPh}_2)_2\}\text{Cl}$ (10c) $\times$ Toluol

Summenformel	C <sub>62</sub> H <sub>67</sub> ClN <sub>3</sub> NdP <sub>4</sub> Si <sub>2</sub>
Molare Masse [g•mol <sup>-1</sup> ]	1213.94
Raumgruppe	$P\bar{1}$ (No. 2)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1189.9(2), 1310.1(2), 1973.4(3)
$\alpha, \beta, \gamma$ [°]	79.567(3), 83.876(3), 89.249(3)
Volumen [10 <sup>6</sup> pm <sup>3</sup> ]	3008.0(7)
Röntgenographische Dichte [g•cm <sup>-3</sup> ]	1.340
Messgerät	Stoe IPDS I
Strahlungsquelle	Ag-K $\alpha$ ( $\lambda$ = 56.087 pm)
Meßtemperatur [K]	173(2)
Absorptionskorrektur	empirisch
Absorptionskoeffizient [mm <sup>-1</sup> ]	1.094
Gemessene Reflexe	37922
Unabhängige Reflexe	18170 [R <sub>int</sub> = 0.0463]
Beobachtete Reflexe [I > 2 $\sigma$ (I)]	11558
Daten / Parameter	18170 / 470
R <sub>1</sub> ; wR <sub>2</sub>	0.0526; 0.1319

Atom	x	y	z	U <sub>eq/iso</sub>
Nd	0.65885(2)	0.50811(2)	0.668251(11)	0.01909(6)
Cl	0.73329(9)	0.54667(9)	0.53427(5)	0.0313(2)
Si1	0.41911(9)	0.33607(9)	0.67404(6)	0.0245(2)
Si2	0.90083(10)	0.32544(10)	0.64816(6)	0.0292(3)
P1	0.51345(8)	0.38904(7)	0.80481(5)	0.0184(2)
P2	0.77301(8)	0.35256(8)	0.78476(5)	0.0194(2)
P3	0.77462(9)	0.66922(8)	0.71520(5)	0.0230(2)
P4	0.57020(10)	0.79207(9)	0.67658(6)	0.0303(3)
N1	0.4980(3)	0.3947(2)	0.7251(2)	0.0209(7)
N2	0.8002(3)	0.3785(2)	0.7025(2)	0.0200(7)
N3	0.6491(3)	0.6810(2)	0.6842(2)	0.0235(7)
C1	0.6527(3)	0.4186(3)	0.8115(2)	0.0192(7)
C2	0.4572(4)	0.2710(3)	0.8611(2)	0.0247(8)
C3	0.3466(4)	0.2404(3)	0.8576(2)	0.0348(10)
C4	0.2984(4)	0.1552(4)	0.9040(3)	0.0433(12)
C5	0.3607(4)	0.1034(4)	0.9539(3)	0.0471(13)
C6	0.4678(4)	0.1340(4)	0.9589(3)	0.0410(11)
C7	0.5171(4)	0.2180(3)	0.9125(2)	0.0307(10)
C8	0.4314(3)	0.4842(3)	0.8449(2)	0.0209(8)
C9	0.4242(4)	0.4770(3)	0.9167(2)	0.0311(10)
C10	0.3607(4)	0.5465(4)	0.9492(3)	0.0375(11)
C11	0.3028(4)	0.6244(4)	0.9109(2)	0.0372(11)
C12	0.3090(4)	0.6323(4)	0.8400(2)	0.0346(10)
C13	0.3729(3)	0.5621(3)	0.8067(2)	0.0269(9)
C14	0.7609(3)	0.2122(3)	0.8122(2)	0.0239(8)
C15	0.6947(4)	0.1606(3)	0.7756(2)	0.0324(10)
C16	0.6795(4)	0.0536(4)	0.7933(3)	0.0430(12)
C17	0.7302(4)	-0.0014(4)	0.8476(3)	0.0467(13)
C18	0.7963(4)	0.0482(4)	0.8836(3)	0.0436(12)
C19	0.8128(4)	0.1541(4)	0.8664(2)	0.0352(10)
C20	0.8818(3)	0.3942(3)	0.8321(2)	0.0248(8)
C21	0.8661(4)	0.3837(4)	0.9041(2)	0.0325(10)
C22	0.9526(4)	0.4105(4)	0.9396(3)	0.0447(12)
C23	1.0530(5)	0.4477(4)	0.9038(3)	0.0500(13)
C24	1.0684(5)	0.4606(4)	0.8336(3)	0.0509(14)
C25	0.9829(4)	0.4333(4)	0.7969(2)	0.0350(10)
C26	0.2693(4)	0.3783(4)	0.6780(3)	0.0380(11)
C27	0.4229(4)	0.1909(4)	0.6925(3)	0.0400(11)
C28	0.4885(4)	0.3754(4)	0.5845(2)	0.0352(10)
C29	0.8264(5)	0.2634(4)	0.5879(3)	0.0496(13)
C30	0.9902(4)	0.2244(4)	0.6971(2)	0.0361(10)
C31	0.9941(4)	0.4305(4)	0.5973(3)	0.0451(12)
C32	0.8644(3)	0.7780(3)	0.6710(2)	0.0271(9)
C33	0.8515(4)	0.8764(4)	0.6889(3)	0.0396(11)
C34	0.9122(5)	0.9603(4)	0.6497(3)	0.0489(13)
C35	0.9877(4)	0.9473(4)	0.5946(3)	0.0462(13)
C36	1.0019(5)	0.8503(4)	0.5777(3)	0.0486(13)
C37	0.9401(4)	0.7658(4)	0.6154(2)	0.0362(11)
C38	0.7602(4)	0.6898(3)	0.8051(2)	0.0274(9)
C39	0.6557(4)	0.6896(3)	0.8436(2)	0.0318(10)
C40	0.6489(4)	0.6958(4)	0.9132(3)	0.0425(12)

Atom	x	y	z	U <sub>eq/iso</sub>
C41	0.7450(5)	0.7004(4)	0.9448(3)	0.0479(13)
C42	0.8480(5)	0.7001(4)	0.9085(3)	0.0496(13)
C43	0.8576(4)	0.6940(4)	0.8380(3)	0.0414(12)
C44	0.4423(4)	0.7434(3)	0.6479(2)	0.0265(9)
C45	0.4459(4)	0.6767(3)	0.5995(2)	0.0277(9)
C46	0.3462(4)	0.6409(4)	0.5811(2)	0.0343(10)
C47	0.2427(4)	0.6715(4)	0.6101(2)	0.0388(11)
C48	0.2389(4)	0.7381(4)	0.6569(3)	0.0409(11)
C49	0.3381(4)	0.7729(3)	0.6756(2)	0.0349(10)
C50	0.6273(4)	0.8712(3)	0.5926(3)	0.0425(13)
C51	0.6906(4)	0.8326(4)	0.5404(3)	0.0442(12)
C52	0.7273(6)	0.8973(5)	0.4782(3)	0.066(2)
C53	0.6980(6)	1.0022(6)	0.4710(4)	0.079(2)
C54	0.6414(6)	1.0395(6)	0.5179(4)	0.074(2)
C55	0.5999(5)	0.9763(5)	0.5828(3)	0.061(2)
C56	0.2177(6)	-0.1169(6)	0.9159(4)	0.080(2)
C57	0.1011(9)	-0.1095(8)	0.9092(6)	0.125(3)
C58	0.0698(10)	-0.0755(8)	0.8476(6)	0.135(4)
C59	0.1344(10)	-0.0390(9)	0.7875(6)	0.142(4)
C60	0.2436(8)	-0.0472(6)	0.7936(5)	0.095(3)
C61	0.2887(5)	-0.0852(5)	0.8523(3)	0.061(2)
C62	0.4109(7)	-0.0921(7)	0.8541(5)	0.108(3)

Atom	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
Nd	0.02057(10)	0.01975(10)	0.01651(10)	-0.00203(7)	-0.00184(7)	-0.00157(7)
Cl	0.0307(5)	0.0429(6)	0.0187(5)	-0.0030(4)	0.0000(4)	0.0007(5)
Si1	0.0220(5)	0.0302(6)	0.0221(6)	-0.0056(5)	-0.0048(4)	-0.0034(5)
Si2	0.0261(6)	0.0389(7)	0.0239(6)	-0.0104(5)	-0.0012(5)	0.0091(5)
P1	0.0183(5)	0.0192(5)	0.0171(5)	-0.0019(4)	-0.0009(4)	-0.0008(4)
P2	0.0195(5)	0.0205(5)	0.0182(5)	-0.0031(4)	-0.0031(4)	0.0002(4)
P3	0.0263(5)	0.0210(5)	0.0226(5)	-0.0043(4)	-0.0054(4)	-0.0015(4)
P4	0.0377(6)	0.0231(5)	0.0334(6)	-0.0084(5)	-0.0136(5)	0.0066(5)
N1	0.021(2)	0.023(2)	0.020(2)	-0.0042(13)	-0.0026(13)	-0.0037(13)
N2	0.020(2)	0.022(2)	0.019(2)	-0.0060(13)	-0.0006(13)	0.0018(13)
N3	0.027(2)	0.022(2)	0.022(2)	-0.0020(13)	-0.0062(14)	-0.0007(13)
C1	0.020(2)	0.022(2)	0.017(2)	-0.0050(15)	-0.0045(15)	0.0022(15)
C2	0.033(2)	0.019(2)	0.021(2)	-0.005(2)	0.003(2)	-0.003(2)
C3	0.042(3)	0.032(2)	0.029(2)	-0.005(2)	0.002(2)	-0.014(2)
C7	0.036(2)	0.024(2)	0.029(2)	-0.000(2)	0.004(2)	-0.002(2)
C8	0.018(2)	0.021(2)	0.022(2)	0.0000(15)	0.0008(15)	-0.0028(14)
C9	0.037(2)	0.033(2)	0.021(2)	-0.002(2)	-0.003(2)	0.007(2)
C13	0.029(2)	0.026(2)	0.025(2)	-0.003(2)	-0.003(2)	0.002(2)
C14	0.024(2)	0.023(2)	0.023(2)	-0.002(2)	0.002(2)	0.001(2)
C15	0.037(2)	0.023(2)	0.035(3)	-0.002(2)	-0.001(2)	-0.002(2)
C19	0.040(3)	0.034(2)	0.029(2)	0.003(2)	-0.002(2)	0.004(2)
C20	0.023(2)	0.027(2)	0.026(2)	-0.006(2)	-0.007(2)	0.003(2)
C21	0.028(2)	0.046(3)	0.027(2)	-0.012(2)	-0.009(2)	0.003(2)
C25	0.029(2)	0.044(3)	0.034(3)	-0.014(2)	0.003(2)	-0.006(2)
C32	0.026(2)	0.030(2)	0.027(2)	-0.005(2)	-0.006(2)	-0.003(2)
C33	0.051(3)	0.031(2)	0.036(3)	-0.007(2)	-0.001(2)	-0.011(2)

Atom	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
C37	0.029(2)	0.039(3)	0.040(3)	-0.008(2)	0.001(2)	0.001(2)
C38	0.038(2)	0.023(2)	0.022(2)	-0.004(2)	-0.006(2)	-0.004(2)
C39	0.045(3)	0.026(2)	0.025(2)	-0.004(2)	-0.006(2)	-0.005(2)
C43	0.047(3)	0.046(3)	0.036(3)	-0.012(2)	-0.018(2)	-0.001(2)
C44	0.031(2)	0.024(2)	0.024(2)	-0.001(2)	-0.004(2)	0.005(2)
C45	0.031(2)	0.030(2)	0.021(2)	-0.002(2)	-0.004(2)	0.002(2)
C49	0.040(3)	0.032(2)	0.031(2)	-0.005(2)	-0.001(2)	0.006(2)
C50	0.041(3)	0.023(2)	0.062(3)	0.013(2)	-0.031(2)	-0.012(2)

### 5.2.22 [(Me<sub>3</sub>SiNPPH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>CH]Yb{N(PPh<sub>2</sub>)<sub>2</sub>}Cl] (10d)

Summenformel	C <sub>55</sub> H <sub>59</sub> ClN <sub>3</sub> P <sub>4</sub> Si <sub>2</sub> Yb
Molare Masse [g•mol <sup>-1</sup> ]	1150.60
Raumgruppe	<i>P</i> $\bar{1}$ (No. 2)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1007.5(4), 1346.1(7), 2123.4(7)
α, β, γ [°]	90.07(3), 100.82(3), 109.44(3)
Volumen [10 <sup>6</sup> pm <sup>3</sup> ]	2661(2)
Röntgenographische Dichte [g•cm <sup>-3</sup> ]	1.436
Messgerät	Stoe IPDS II
Strahlungsquelle	Mo-K <sub>α</sub> (λ = 71.073 pm)
Meßtemperatur [K]	173(2)
Absorptionskorrektur	keine
Absorptionskoeffizient [mm <sup>-1</sup> ]	2.012
Gemessene Reflexe	16659
Unabhängige Reflexe	8801 [R <sub>int</sub> = 0.0461]
Beobachtete Reflexe [I > 2σ(I)]	8105
Daten / Parameter	8801 / 601
R <sub>1</sub> ; wR <sub>2</sub>	0.0445; 0.1219

Atom	x	y	z	U <sub>eq/iso</sub>
Yb	0.65693(2)	0.644725(12)	0.746190(8)	0.03147(9)
Cl	0.40690(15)	0.59989(12)	0.76869(7)	0.0557(3)
Si1	0.64843(15)	0.52507(10)	0.90183(6)	0.0398(3)
Si2	0.48280(15)	0.42871(10)	0.62143(7)	0.0414(3)
P1	0.88193(13)	0.56766(8)	0.82484(5)	0.0320(2)
P2	0.80770(12)	0.52569(8)	0.67724(5)	0.0308(2)
P3	0.60811(13)	0.80328(9)	0.66634(6)	0.0361(3)
P4	0.80018(14)	0.94767(9)	0.77388(6)	0.0370(3)
N1	0.7334(4)	0.5747(3)	0.8385(2)	0.0343(8)
N2	0.6412(4)	0.5091(3)	0.6718(2)	0.0332(8)
N3	0.7255(4)	0.8218(3)	0.7376(2)	0.0338(8)
C1	0.8979(5)	0.6086(3)	0.7472(2)	0.0304(8)
C2	1.0390(5)	0.6566(3)	0.8783(2)	0.0337(9)
C3	1.0204(6)	0.7157(4)	0.9283(2)	0.0406(10)
C4	1.1400(6)	0.7826(4)	0.9712(2)	0.0485(13)



---

<b>Atom</b>	<b>x</b>	<b>y</b>	<b>z</b>	<b>U<sub>eq/iso</sub></b>
C5	1.2749(6)	0.7894(4)	0.9649(3)	0.0540(14)
C6	1.2956(6)	0.7323(4)	0.9149(3)	0.0502(13)
C7	1.1771(5)	0.6669(3)	0.8707(2)	0.0407(10)
C8	0.8827(6)	0.4341(3)	0.8376(2)	0.0379(10)
C9	0.9997(6)	0.4125(4)	0.8739(2)	0.0460(12)
C10	0.9894(8)	0.3088(4)	0.8836(3)	0.0569(15)
C11	0.8666(8)	0.2263(4)	0.8575(3)	0.058(2)
C12	0.7505(7)	0.2474(4)	0.8206(3)	0.0551(14)
C13	0.7575(6)	0.3510(4)	0.8107(2)	0.0443(11)
C14	0.8578(5)	0.4068(3)	0.6763(2)	0.0362(10)
C15	0.9970(6)	0.4166(4)	0.7068(2)	0.0420(11)
C16	1.0453(7)	0.3309(4)	0.7054(3)	0.0540(13)
C17	0.9543(8)	0.2356(4)	0.6742(3)	0.0564(15)
C18	0.8149(7)	0.2251(4)	0.6438(3)	0.0500(13)
C19	0.7654(6)	0.3101(4)	0.6451(2)	0.0442(11)
C20	0.8791(5)	0.5949(3)	0.6104(2)	0.0343(9)
C21	0.9883(6)	0.5756(4)	0.5859(2)	0.0444(11)
C22	1.0392(6)	0.6307(4)	0.5356(3)	0.0479(12)
C23	0.9811(6)	0.7054(4)	0.5087(2)	0.0490(13)
C24	0.8726(6)	0.7239(4)	0.5321(2)	0.0462(12)
C25	0.8223(5)	0.6689(4)	0.5832(2)	0.0382(10)
C26	0.6033(7)	0.6321(5)	0.9380(3)	0.0577(14)
C27	0.7635(6)	0.4791(5)	0.9660(3)	0.0521(13)
C28	0.4817(6)	0.4087(5)	0.8733(3)	0.060(2)
C29	0.3554(6)	0.5025(5)	0.6028(3)	0.0552(14)
C30	0.5154(7)	0.3848(5)	0.5435(3)	0.0583(15)
C31	0.3984(7)	0.3108(4)	0.6656(4)	0.065(2)
C32	0.6953(6)	0.8871(4)	0.6081(2)	0.0406(11)
C33	0.8444(6)	0.9386(4)	0.6173(2)	0.0421(10)
C34	0.9039(7)	1.0004(4)	0.5712(3)	0.0516(13)
C35	0.8185(8)	1.0103(4)	0.5143(3)	0.0576(15)
C36	0.6738(8)	0.9590(5)	0.5041(3)	0.0584(15)
C37	0.6103(6)	0.8976(4)	0.5494(2)	0.0460(11)
C38	0.4705(5)	0.8628(4)	0.6704(2)	0.0381(10)
C39	0.3272(6)	0.7959(4)	0.6636(3)	0.0461(11)
C40	0.2194(6)	0.8387(5)	0.6634(3)	0.0535(13)
C41	0.2515(7)	0.9462(5)	0.6698(3)	0.0548(13)
C42	0.3919(7)	1.0125(4)	0.6766(3)	0.0492(12)
C43	0.4997(6)	0.9727(4)	0.6761(3)	0.0449(11)
C44	0.7590(5)	0.9324(3)	0.8554(2)	0.0398(10)
C45	0.6313(6)	0.9446(4)	0.8627(3)	0.0496(12)
C46	0.5972(7)	0.9465(4)	0.9233(3)	0.0549(14)
C47	0.6906(7)	0.9353(4)	0.9772(3)	0.0547(14)
C48	0.8161(7)	0.9207(5)	0.9706(3)	0.0560(14)
C49	0.8519(6)	0.9208(4)	0.9100(2)	0.0460(11)
C50	0.9952(5)	0.9758(4)	0.7943(2)	0.0400(10)
C51	1.0780(6)	1.0837(4)	0.8044(3)	0.0493(12)
C52	1.2270(6)	1.1141(4)	0.8240(3)	0.0567(14)
C53	1.2934(6)	1.0388(5)	0.8311(3)	0.0538(13)
C54	1.2125(7)	0.9340(5)	0.8195(3)	0.0533(13)
C55	1.0646(6)	0.9028(4)	0.8011(2)	0.0425(11)

---

Atom	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
Yb	0.03429(14)	0.02738(12)	0.03251(13)	0.00227(8)	0.00694(8)	0.01001(9)
Cl	0.0418(7)	0.0742(9)	0.0539(7)	0.0158(6)	0.0167(5)	0.0197(6)
Si1	0.0393(7)	0.0402(7)	0.0353(6)	0.0056(5)	0.0105(5)	0.0058(5)
Si2	0.0367(7)	0.0345(6)	0.0487(7)	-0.0058(5)	0.0019(5)	0.0099(5)
P1	0.0344(6)	0.0270(5)	0.0326(5)	0.0032(4)	0.0052(4)	0.0086(4)
P2	0.0340(6)	0.0264(5)	0.0327(5)	0.0021(4)	0.0073(4)	0.0106(4)
P3	0.0385(7)	0.0316(5)	0.0373(6)	0.0021(4)	0.0049(5)	0.0121(5)
P4	0.0396(7)	0.0281(5)	0.0413(6)	0.0020(4)	0.0048(5)	0.0108(5)
N1	0.037(2)	0.035(2)	0.029(2)	0.0055(14)	0.0056(14)	0.0104(15)
N2	0.039(2)	0.027(2)	0.034(2)	-0.0015(13)	0.0093(15)	0.0100(15)
N3	0.037(2)	0.025(2)	0.038(2)	0.0023(14)	0.0065(15)	0.0097(15)
C1	0.028(2)	0.030(2)	0.035(2)	0.004(2)	0.005(2)	0.013(2)
C2	0.035(2)	0.028(2)	0.035(2)	0.004(2)	0.001(2)	0.011(2)
C3	0.045(3)	0.035(2)	0.039(2)	0.000(2)	0.011(2)	0.008(2)
C4	0.054(3)	0.037(2)	0.042(3)	-0.003(2)	0.006(2)	0.002(2)
C5	0.052(3)	0.041(3)	0.050(3)	0.006(2)	-0.008(2)	0.000(2)
C6	0.035(3)	0.041(3)	0.073(4)	0.006(2)	-0.001(2)	0.017(2)
C7	0.042(3)	0.031(2)	0.049(3)	0.003(2)	0.007(2)	0.014(2)
C8	0.049(3)	0.028(2)	0.036(2)	0.006(2)	0.011(2)	0.012(2)
C9	0.063(3)	0.037(2)	0.040(2)	0.007(2)	0.008(2)	0.021(2)
C10	0.088(5)	0.041(3)	0.048(3)	0.003(2)	0.008(3)	0.034(3)
C11	0.101(5)	0.031(2)	0.050(3)	0.006(2)	0.025(3)	0.027(3)
C12	0.073(4)	0.033(2)	0.051(3)	-0.001(2)	0.019(3)	0.003(2)
C13	0.052(3)	0.032(2)	0.044(3)	0.003(2)	0.012(2)	0.007(2)
C14	0.047(3)	0.029(2)	0.035(2)	0.005(2)	0.013(2)	0.013(2)
C15	0.046(3)	0.042(3)	0.045(3)	0.007(2)	0.010(2)	0.023(2)
C16	0.059(4)	0.055(3)	0.060(3)	0.004(2)	0.011(3)	0.035(3)
C17	0.084(5)	0.045(3)	0.057(3)	0.010(2)	0.026(3)	0.037(3)
C18	0.072(4)	0.028(2)	0.053(3)	0.000(2)	0.022(3)	0.016(2)
C19	0.053(3)	0.034(2)	0.046(3)	0.003(2)	0.016(2)	0.013(2)
C20	0.042(3)	0.028(2)	0.030(2)	0.001(2)	0.009(2)	0.007(2)
C21	0.055(3)	0.033(2)	0.044(3)	0.005(2)	0.014(2)	0.012(2)
C22	0.053(3)	0.046(3)	0.047(3)	0.002(2)	0.022(2)	0.014(2)
C23	0.064(3)	0.039(3)	0.040(2)	0.003(2)	0.019(2)	0.007(2)
C24	0.060(3)	0.035(2)	0.037(2)	0.006(2)	0.005(2)	0.010(2)
C25	0.042(3)	0.039(2)	0.034(2)	0.003(2)	0.009(2)	0.014(2)
C26	0.069(4)	0.070(4)	0.046(3)	0.009(3)	0.026(3)	0.031(3)
C27	0.054(3)	0.054(3)	0.046(3)	0.015(2)	0.017(2)	0.012(2)
C28	0.048(3)	0.060(3)	0.055(3)	0.010(3)	0.013(2)	-0.004(3)
C29	0.043(3)	0.054(3)	0.061(3)	-0.013(2)	-0.005(2)	0.015(2)
C30	0.064(4)	0.055(3)	0.051(3)	-0.013(2)	-0.005(3)	0.023(3)
C31	0.054(4)	0.039(3)	0.098(5)	0.000(3)	0.025(3)	0.004(3)
C32	0.054(3)	0.036(2)	0.039(2)	0.005(2)	0.011(2)	0.023(2)
C33	0.041(3)	0.040(2)	0.047(3)	0.003(2)	0.006(2)	0.017(2)
C34	0.058(4)	0.043(3)	0.054(3)	0.003(2)	0.021(3)	0.013(2)
C35	0.081(4)	0.044(3)	0.058(3)	0.017(2)	0.034(3)	0.024(3)
C36	0.079(4)	0.065(4)	0.040(3)	0.016(2)	0.018(3)	0.033(3)
C37	0.048(3)	0.055(3)	0.042(3)	0.010(2)	0.010(2)	0.027(2)
C38	0.039(3)	0.040(2)	0.035(2)	0.005(2)	0.004(2)	0.014(2)
C39	0.041(3)	0.042(3)	0.051(3)	0.001(2)	0.002(2)	0.014(2)
C40	0.035(3)	0.059(3)	0.065(3)	0.003(3)	0.008(2)	0.015(2)

Atom	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
C41	0.056(4)	0.064(3)	0.051(3)	0.012(2)	0.009(2)	0.031(3)
C42	0.061(4)	0.044(3)	0.053(3)	0.014(2)	0.017(2)	0.028(2)
C43	0.045(3)	0.036(2)	0.053(3)	0.011(2)	0.009(2)	0.013(2)
C44	0.044(3)	0.029(2)	0.042(2)	-0.007(2)	0.005(2)	0.008(2)
C45	0.044(3)	0.046(3)	0.055(3)	0.001(2)	0.010(2)	0.011(2)
C46	0.052(3)	0.052(3)	0.066(3)	0.001(3)	0.024(3)	0.019(3)
C47	0.059(4)	0.049(3)	0.050(3)	-0.004(2)	0.023(3)	0.004(3)
C48	0.054(3)	0.057(3)	0.044(3)	-0.003(2)	-0.001(2)	0.007(3)
C49	0.043(3)	0.049(3)	0.049(3)	0.003(2)	0.010(2)	0.019(2)
C50	0.035(3)	0.039(2)	0.041(2)	-0.002(2)	0.001(2)	0.010(2)
C51	0.043(3)	0.039(3)	0.061(3)	-0.003(2)	0.004(2)	0.011(2)
C52	0.042(3)	0.041(3)	0.072(4)	-0.006(2)	0.005(3)	-0.002(2)
C53	0.040(3)	0.061(3)	0.052(3)	0.004(2)	0.006(2)	0.008(3)
C54	0.054(3)	0.055(3)	0.055(3)	0.013(2)	0.011(2)	0.024(3)
C55	0.047(3)	0.036(2)	0.045(3)	0.010(2)	0.008(2)	0.015(2)

### 5.2.23 $[(\text{Me}_3\text{SiNPPh}_2)_2\text{CH}]_2\text{La}\{\text{N}(\text{PPh}_2)_2\}(\text{NPh}_2)$ (11)

Summenformel	C <sub>67</sub> H <sub>69</sub> LaN <sub>4</sub> P <sub>4</sub> Si <sub>2</sub>
Molare Masse [g•mol <sup>-1</sup> ]	1249.23
Raumgruppe	P2 <sub>1</sub> /n (No. 14:b2)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1358.8(2), 2266.8(4), 2124.5(4)
β [°]	106.590(4)
Volumen [10 <sup>6</sup> pm <sup>3</sup> ]	6271.4(19)
Röntgenographische Dichte [g•cm <sup>-3</sup> ]	1.323
Messgerät	Bruker Kappa CCD
Strahlungsquelle	Mo-K <sub>α</sub> (λ= 71.073 pm)
Meßtemperatur [K]	130(2)
Absorptionskorrektur	empirisch
Absorptionskoeffizient [mm <sup>-1</sup> ]	0.864
Gemessene Reflexe	85640
Unabhängige Reflexe	22772 [R <sub>int</sub> = 0.0315]
Beobachtete Reflexe [I>2σ(I)]	16795
Daten / Parameter	22772 / 709
R <sub>1</sub> ; wR <sub>2</sub>	0.0326; 0.0827

Atom	x	y	z	U <sub>eq/iso</sub>
La	0.502557(7)	0.872029(4)	0.774350(4)	0.01634(3)
Si2	0.61717(4)	0.99849(2)	0.87792(3)	0.02639(11)
Si1	0.59790(4)	0.73934(2)	0.69725(2)	0.02343(10)
P2	0.61695(3)	0.98587(2)	0.73386(2)	0.01862(8)
P1	0.59887(3)	0.865815(19)	0.65051(2)	0.01650(8)
P3	0.29765(3)	0.86491(2)	0.67556(2)	0.01821(8)
P4	0.20759(3)	0.90072(2)	0.78018(2)	0.01917(9)
N1	0.58288(11)	0.81523(6)	0.69906(7)	0.0187(3)

Atom	x	y	z	U <sub>eq/iso</sub>
N2	0.60865(11)	0.96410(6)	0.80380(7)	0.0207(3)
N3	0.31303(11)	0.88473(6)	0.75388(7)	0.0182(3)
N4	0.58257(12)	0.80631(7)	0.86507(8)	0.0262(3)
C1	0.56221(13)	0.93385(7)	0.67459(8)	0.0184(3)
C2	0.51657(13)	0.86080(8)	0.56679(8)	0.0195(3)
C3	0.44673(14)	0.81499(8)	0.54686(9)	0.0257(4)
C4	0.3811(2)	0.81363(9)	0.48333(10)	0.0328(4)
C5	0.3841(2)	0.85847(9)	0.43952(10)	0.0309(4)
C6	0.45363(15)	0.90443(9)	0.45904(9)	0.0279(4)
C7	0.51935(14)	0.90559(8)	0.52183(9)	0.0225(3)
C8	0.72819(13)	0.86368(8)	0.64294(9)	0.0217(3)
C9	0.75112(15)	0.85267(9)	0.58408(10)	0.0301(4)
C10	0.8526(2)	0.84970(11)	0.58255(12)	0.0399(5)
C11	0.9315(2)	0.85910(10)	0.63898(14)	0.0420(6)
C12	0.9103(2)	0.87063(10)	0.69733(13)	0.0377(5)
C13	0.80906(14)	0.87213(9)	0.69997(10)	0.0284(4)
C14	0.54208(13)	1.05211(8)	0.70564(8)	0.0210(3)
C15	0.43636(14)	1.04776(9)	0.67499(9)	0.0257(4)
C16	0.3776(2)	1.09771(9)	0.65423(11)	0.0329(4)
C17	0.4223(2)	1.15261(10)	0.66467(11)	0.0360(5)
C18	0.5257(2)	1.15797(9)	0.69598(12)	0.0359(5)
C19	0.58606(15)	1.10813(9)	0.71627(10)	0.0283(4)
C20	0.74727(14)	1.00537(8)	0.73600(10)	0.0250(4)
C21	0.8273(2)	0.99905(12)	0.79269(11)	0.0421(6)
C22	0.9274(2)	1.01340(15)	0.79273(14)	0.0581(8)
C23	0.9476(2)	1.03314(12)	0.73669(15)	0.0526(7)
C24	0.8687(2)	1.03863(11)	0.67995(14)	0.0464(6)
C25	0.7688(2)	1.02456(10)	0.67902(11)	0.0345(5)
C26	0.6401(2)	0.71310(10)	0.62547(10)	0.0381(5)
C27	0.4724(2)	0.70471(9)	0.69611(12)	0.0369(5)
C28	0.6958(2)	0.71148(10)	0.77165(10)	0.0356(5)
C29	0.5706(2)	1.07574(10)	0.86956(11)	0.0453(6)
C30	0.7483(2)	0.99896(12)	0.93726(11)	0.0461(6)
C31	0.5306(2)	0.95521(11)	0.91435(11)	0.0412(5)
C32	0.19917(13)	0.80759(8)	0.65281(8)	0.0201(3)
C33	0.18029(15)	0.77037(8)	0.70027(9)	0.0267(4)
C34	0.1051(2)	0.72743(9)	0.68304(10)	0.0342(5)
C35	0.0480(2)	0.72041(9)	0.61845(10)	0.0339(4)
C36	0.0672(2)	0.75599(9)	0.57066(10)	0.0314(4)
C37	0.14271(15)	0.79931(9)	0.58768(9)	0.0262(4)
C38	0.23598(13)	0.92316(8)	0.61764(8)	0.0202(3)
C39	0.14888(14)	0.95450(8)	0.62159(9)	0.0261(4)
C40	0.1063(2)	0.99754(9)	0.57596(11)	0.0333(4)
C41	0.1491(2)	1.01071(10)	0.52555(11)	0.0352(5)
C42	0.2343(2)	0.97990(10)	0.52066(10)	0.0339(5)
C43	0.27739(14)	0.93662(9)	0.56644(9)	0.0270(4)
C44	0.2228(2)	0.85916(8)	0.85675(9)	0.0255(4)
C45	0.1397(2)	0.82592(11)	0.86199(12)	0.0419(5)
C46	0.1422(2)	0.79559(12)	0.91937(14)	0.0565(8)
C47	0.2288(3)	0.79663(11)	0.97114(13)	0.0584(8)
C48	0.3135(3)	0.82836(13)	0.96677(13)	0.0666(9)

Atom	x	y	z	U <sub>eq/iso</sub>
C49	0.3102(2)	0.86007(12)	0.91034(12)	0.0489(6)
C50	0.23538(14)	0.97518(8)	0.81360(9)	0.0227(3)
C51	0.2096(2)	0.99379(9)	0.86941(11)	0.0365(5)
C52	0.2194(2)	1.05236(10)	0.88863(12)	0.0478(6)
C53	0.2544(2)	1.09398(10)	0.85242(12)	0.0426(6)
C54	0.2796(2)	1.07634(10)	0.79685(12)	0.0401(5)
C55	0.2706(2)	1.01768(9)	0.77772(10)	0.0310(4)
C56	0.53200(15)	0.75636(9)	0.87840(9)	0.0261(4)
C57	0.4254(2)	0.75307(11)	0.85372(12)	0.0432(6)
C58	0.3709(2)	0.70331(13)	0.86093(15)	0.0581(8)
C59	0.4206(2)	0.65467(11)	0.89413(13)	0.0465(6)
C60	0.5260(2)	0.65641(9)	0.91889(10)	0.0332(4)
C61	0.5812(2)	0.70584(9)	0.91144(9)	0.0280(4)
C62	0.6831(2)	0.81814(8)	0.90154(9)	0.0264(4)
C63	0.7166(2)	0.81847(9)	0.97071(10)	0.0321(4)
C64	0.8167(2)	0.83314(9)	1.00432(11)	0.0382(5)
C65	0.8877(2)	0.84862(10)	0.97162(12)	0.0423(5)
C66	0.8563(2)	0.84954(11)	0.90380(12)	0.0398(5)
C67	0.7564(2)	0.83430(9)	0.86953(10)	0.0324(4)

Atom	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
La	0.01386(4)	0.02051(5)	0.01509(4)	0.00163(4)	0.00486(3)	0.00151(4)
Si2	0.0344(3)	0.0243(3)	0.0190(2)	-0.0020(2)	0.0052(2)	0.0041(2)
Si1	0.0280(3)	0.0215(2)	0.0219(2)	0.0009(2)	0.0087(2)	0.0051(2)
P2	0.0174(2)	0.0195(2)	0.0186(2)	0.0008(2)	0.0047(2)	0.0002(2)
P1	0.01350(18)	0.0212(2)	0.0150(2)	0.00042(15)	0.00439(15)	0.00037(15)
P3	0.01466(19)	0.0242(2)	0.0162(2)	0.0014(2)	0.0051(2)	0.0023(2)
P4	0.0166(2)	0.0231(2)	0.0192(2)	0.0012(2)	0.0075(2)	0.0016(2)
N2	0.0231(7)	0.0202(7)	0.0183(7)	0.0004(5)	0.0051(6)	0.0010(6)
N1	0.0172(7)	0.0209(7)	0.0184(7)	0.0012(5)	0.0058(6)	0.0015(5)
N3	0.0153(6)	0.0233(7)	0.0162(6)	0.0001(5)	0.0049(5)	0.0020(5)
N4	0.0278(8)	0.0285(8)	0.0239(8)	0.0085(6)	0.0099(7)	0.0089(6)
C1	0.0158(7)	0.0209(8)	0.0178(7)	0.0004(6)	0.0037(6)	0.0019(6)
C2	0.0172(8)	0.0243(9)	0.0180(7)	0.0001(6)	0.0064(6)	-0.0006(6)
C3	0.0240(9)	0.0255(9)	0.0246(9)	0.0052(7)	0.0022(7)	-0.0038(7)
C4	0.0299(10)	0.0293(10)	0.0320(10)	0.0014(8)	-0.0029(9)	-0.0075(8)
C5	0.0289(10)	0.0372(11)	0.0205(9)	0.0025(8)	-0.0025(8)	-0.0047(8)
C6	0.0313(10)	0.0332(10)	0.0192(8)	0.0047(7)	0.0072(8)	-0.0032(8)
C7	0.0221(8)	0.0261(9)	0.0203(8)	0.0006(7)	0.0074(7)	-0.0039(7)
C8	0.0166(8)	0.0224(8)	0.0280(9)	0.0004(7)	0.0095(7)	0.0001(6)
C9	0.0243(9)	0.0374(11)	0.0325(10)	-0.0009(8)	0.0145(8)	0.0023(8)
C10	0.0342(12)	0.0433(12)	0.0518(14)	0.0040(11)	0.0280(11)	0.0060(10)
C11	0.0210(10)	0.0384(12)	0.073(2)	0.0057(11)	0.0233(11)	0.0031(8)
C12	0.0167(9)	0.0379(12)	0.0546(14)	0.0022(10)	0.0037(9)	0.0000(8)
C13	0.0175(8)	0.0342(10)	0.0316(10)	0.0012(8)	0.0040(7)	0.0027(8)
C14	0.0217(8)	0.0214(8)	0.0205(8)	0.0032(6)	0.0072(7)	0.0025(6)
C15	0.0228(9)	0.0263(9)	0.0293(9)	0.0007(7)	0.0094(8)	0.0027(7)
C16	0.0260(10)	0.0345(11)	0.0392(11)	0.0036(9)	0.0109(9)	0.0080(8)
C17	0.0362(12)	0.0287(10)	0.0475(13)	0.0100(9)	0.0188(10)	0.0127(9)
C18	0.0385(12)	0.0211(9)	0.0521(13)	0.0043(9)	0.0194(11)	0.0027(8)

Atom	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
C19	0.0251(9)	0.0238(9)	0.0358(10)	0.0012(8)	0.0083(8)	-0.0006(7)
C20	0.0205(9)	0.0235(9)	0.0311(10)	-0.0022(7)	0.0075(7)	-0.0024(7)
C21	0.0264(11)	0.064(2)	0.0334(11)	-0.0082(11)	0.0052(9)	-0.0080(10)
C22	0.0231(11)	0.093(2)	0.053(2)	-0.0206(15)	0.0012(11)	-0.0143(13)
C23	0.0268(12)	0.057(2)	0.077(2)	-0.0122(14)	0.0202(13)	-0.0152(11)
C24	0.0368(13)	0.0435(13)	0.068(2)	0.0120(12)	0.0301(13)	-0.0006(10)
C25	0.0276(10)	0.0357(11)	0.0428(12)	0.0126(9)	0.0141(9)	0.0040(8)
C26	0.0511(14)	0.0348(11)	0.0312(11)	-0.0017(9)	0.0164(10)	0.0122(10)
C27	0.0400(12)	0.0265(10)	0.0447(13)	0.0037(9)	0.0128(10)	-0.0039(9)
C28	0.0398(12)	0.0348(11)	0.0305(10)	0.0034(9)	0.0072(9)	0.0184(9)
C29	0.071(2)	0.0302(11)	0.0319(11)	-0.0055(9)	0.0107(12)	0.0122(11)
C30	0.0521(15)	0.0535(15)	0.0242(11)	-0.0076(10)	-0.0026(10)	0.0063(12)
C31	0.0550(15)	0.0409(13)	0.0349(11)	0.0016(9)	0.0243(11)	0.0060(11)
C32	0.0190(8)	0.0213(8)	0.0203(8)	-0.0015(6)	0.0062(7)	0.0028(6)
C33	0.0318(10)	0.0239(9)	0.0220(9)	0.0024(7)	0.0040(8)	-0.0001(7)
C34	0.0434(12)	0.0257(10)	0.0320(10)	0.0054(8)	0.0082(9)	-0.0078(9)
C35	0.0403(12)	0.0241(10)	0.0353(11)	-0.0030(8)	0.0077(9)	-0.0095(8)
C36	0.0357(11)	0.0324(10)	0.0249(9)	-0.0062(8)	0.0066(8)	-0.0074(9)
C37	0.0277(9)	0.0309(10)	0.0202(8)	-0.0007(7)	0.0072(7)	-0.0040(8)
C38	0.0154(8)	0.0243(8)	0.0191(8)	0.0022(6)	0.0020(6)	-0.0024(6)
C39	0.0228(9)	0.0287(9)	0.0266(9)	0.0042(7)	0.0066(8)	0.0022(7)
C40	0.0287(10)	0.0311(10)	0.0369(11)	0.0076(9)	0.0044(9)	0.0082(8)
C41	0.0351(11)	0.0327(11)	0.0312(11)	0.0127(9)	-0.0014(9)	-0.0011(9)
C42	0.0302(10)	0.0455(12)	0.0249(9)	0.0108(9)	0.0057(8)	-0.0050(9)
C43	0.0196(9)	0.0391(11)	0.0220(9)	0.0054(8)	0.0053(7)	-0.0009(8)
C44	0.0331(10)	0.0252(9)	0.0221(8)	0.0011(7)	0.0143(8)	0.0035(7)
C45	0.0437(13)	0.0434(13)	0.0443(13)	0.0109(10)	0.0220(11)	-0.0033(10)
C46	0.083(2)	0.0465(15)	0.0578(17)	0.0117(13)	0.0481(17)	-0.0039(14)
C47	0.115(3)	0.0368(13)	0.0348(13)	0.0095(10)	0.0400(16)	0.0083(15)
C48	0.105(3)	0.056(2)	0.0273(12)	0.0123(12)	0.0008(15)	0.000(2)
C49	0.058(2)	0.0506(15)	0.0308(12)	0.0106(10)	0.0013(12)	-0.0085(12)
C50	0.0222(9)	0.0237(9)	0.0234(8)	0.0008(7)	0.0085(7)	0.0045(7)
C51	0.0572(14)	0.0260(10)	0.0356(11)	0.0001(8)	0.0283(11)	0.0029(9)
C52	0.083(2)	0.0300(11)	0.0433(13)	-0.0067(10)	0.0389(14)	0.0030(12)
C53	0.063(2)	0.0235(10)	0.0480(14)	-0.0061(9)	0.0263(13)	0.0009(10)
C54	0.0540(15)	0.0280(11)	0.0455(13)	-0.0009(9)	0.0259(12)	-0.0063(10)
C55	0.0393(12)	0.0281(10)	0.0309(10)	-0.0023(8)	0.0183(9)	-0.0037(8)
C56	0.0284(10)	0.0311(10)	0.0214(8)	0.0044(7)	0.0113(8)	0.0077(8)
C57	0.0283(11)	0.0492(14)	0.0563(15)	0.0280(12)	0.0186(11)	0.0167(10)
C58	0.0263(12)	0.0644(18)	0.084(2)	0.038(2)	0.0164(13)	0.0083(11)
C59	0.0338(12)	0.0452(14)	0.0597(16)	0.0202(12)	0.0124(12)	-0.0001(10)
C60	0.0381(12)	0.0263(10)	0.0347(11)	0.0035(8)	0.0095(9)	0.0067(8)
C61	0.0292(10)	0.0286(10)	0.0247(9)	0.0002(7)	0.0051(8)	0.0068(8)
C62	0.0352(10)	0.0218(9)	0.0213(8)	0.0022(7)	0.0067(8)	0.0077(7)
C63	0.0431(12)	0.0260(10)	0.0260(10)	0.0011(8)	0.0080(9)	0.0080(8)
C64	0.0522(14)	0.0273(10)	0.0265(10)	-0.0025(8)	-0.0026(10)	0.0099(10)
C65	0.0392(13)	0.0324(11)	0.0460(14)	-0.0015(10)	-0.0024(11)	0.0026(10)
C66	0.0341(12)	0.0406(12)	0.0420(13)	0.0041(10)	0.0066(10)	0.0001(10)
C67	0.0323(11)	0.0366(11)	0.0268(10)	0.0032(8)	0.0059(9)	0.0070(9)

5.2.24  $[\{(\text{Ph}_2\text{P})_2\text{N}\}_2\text{K}(\text{THF})_2\text{K}] (\mathbf{12a}) \times \frac{1}{4} \text{THF}$ 

CCDC-Nummer	186707
Summenformel	$\text{C}_{58}\text{H}_{60}\text{K}_2\text{N}_2\text{O}_{2.50}\text{P}_4$
Molare Masse [ $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ]	1027.16
Raumgruppe	$C2/c$ (No. 15:b1)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	2180.13(12), 2515.56(12), 2061.94(12)
$\beta$ [°]	105.676(7)
Volumen [ $10^6 \text{ pm}^3$ ]	10887.6(10)
Röntgenographische Dichte [ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ]	1.253
Messgerät	Stoe IPDS I
Strahlungsquelle	Ag- $\text{K}_\alpha$ ( $\lambda = 56.087 \text{ pm}$ )
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	keine
Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]	0.178
Gemessene Reflexe	47913
Unabhängige Reflexe	14031 [ $R_{\text{int}} = 0.0641$ ]
Beobachtete Reflexe [ $I > 2\sigma(I)$ ]	9407
Daten / Parameter	14031 / 585
$R_1$ ; $wR_2$	0.0661; 0.1982

5.2.25  $[\{(\text{Ph}_2\text{P})_2\text{N}\}\text{K}(\text{THF})] (\mathbf{12b}) \times \frac{1}{2} \text{THF}$ 

CCDC-Nummer	186708
Summenformel	$\text{C}_{60}\text{H}_{64}\text{K}_2\text{N}_2\text{O}_3\text{P}_4$
Molare Masse [ $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ]	1063.21
Raumgruppe	$P2_1/c$ (No. 14:b1)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	11.450(2), 25.119(4), 20.395(7)
$\beta$ [°]	94.45(3)
Volumen [ $10^6 \text{ pm}^3$ ]	5848(2)
Röntgenographische Dichte [ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ]	1.208
Messgerät	Stoe IPDS II
Strahlungsquelle	Mo- $\text{K}_\alpha$ ( $\lambda = 71.073 \text{ pm}$ )
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	keine
Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]	0.315
Gemessene Reflexe	24932
Unabhängige Reflexe	9573 [ $R_{\text{int}} = 0.0770$ ]
Beobachtete Reflexe [ $I > 2\sigma(I)$ ]	5945
Daten / Parameter	9573 / 587
$R_1$ ; $wR_2$	0.0639; 0.1730

5.2.26  $\{[(\text{Ph}_2\text{P})_2\text{N}]\text{YCl}_2(\text{THF})_3\}$  (13a)

Summenformel	$\text{C}_{36}\text{H}_{44}\text{Cl}_2\text{NO}_3\text{P}_2\text{Y}$
Molare Masse [ $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ]	761.48
Raumgruppe	$P2_1/c$ (No. 14:b1)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1204.72(6), 1555.36(13), 1958.54(11)
$\beta$ [°]	103.821(6)
Volumen [ $10^6 \text{ pm}^3$ ]	3563.6(4)
Röntgenographische Dichte [ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ]	1.419
Messgerät	Stoe IPDS I
Strahlungsquelle	Ag- $\text{K}\alpha$ ( $\lambda = 56.087 \text{ pm}$ )
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	keine
Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]	1.039
Gemessene Reflexe	18818
Unabhängige Reflexe	8420 [ $R_{\text{int}} = 0.1814$ ]
Beobachtete Reflexe [ $I > 2\sigma(I)$ ]	4176
Daten / Parameter	8420 / 406
$R_1; wR_2$	0.0793; 0.1911

Atom	x	y	z	$U_{\text{eq/iso}}$
Y1	1.26843(4)	0.36087(5)	0.77322(3)	0.01574(15)
Cl1	1.08278(13)	0.29955(15)	0.69122(10)	0.0303(5)
Cl2	1.45459(12)	0.44567(14)	0.82435(10)	0.0260(4)
P1	1.34326(13)	0.20980(14)	0.85398(10)	0.0193(4)
P2	1.20554(13)	0.27245(15)	0.94682(10)	0.0210(4)
N	1.2470(4)	0.2808(4)	0.8706(3)	0.0156(12)
O1	1.2486(3)	0.4663(4)	0.6804(3)	0.032(2)
O2	1.1722(3)	0.4778(4)	0.8102(3)	0.0271(13)
O3	1.3725(3)	0.2941(4)	0.6978(3)	0.0261(14)
C1	1.2842(5)	0.1016(6)	0.8401(4)	0.023(2)
C2	1.3172(6)	0.0490(7)	0.7893(5)	0.035(2)
C3	1.2747(7)	-0.0340(6)	0.7740(5)	0.039(2)
C4	1.1997(7)	-0.0649(7)	0.8095(5)	0.043(3)
C5	1.1671(6)	-0.0161(7)	0.8596(5)	0.040(2)
C6	1.2080(5)	0.0653(6)	0.8749(4)	0.027(2)
C7	1.4580(5)	0.1970(5)	0.9345(4)	0.019(2)
C8	1.4714(5)	0.1257(6)	0.9779(4)	0.026(2)
C9	1.5592(6)	0.1221(7)	1.0389(4)	0.037(3)
C10	1.6327(5)	0.1915(6)	1.0562(4)	0.024(2)
C11	1.6204(5)	0.2636(6)	1.0140(4)	0.031(2)
C12	1.5326(5)	0.2661(6)	0.9521(4)	0.025(2)
C13	1.2163(5)	0.3846(5)	0.9801(3)	0.019(2)
C14	1.1428(6)	0.4206(7)	1.0181(5)	0.037(2)
C15	1.1676(6)	0.4967(7)	1.0521(5)	0.037(2)
C16	1.2657(6)	0.5442(6)	1.0492(4)	0.033(2)



Atom	x	y	z	U <sub>eq/iso</sub>
C18	1.3133(5)	0.4306(6)	0.9770(4)	0.022(2)
C19	1.0502(5)	0.2589(6)	0.9224(4)	0.024(2)
C20	0.9843(5)	0.2627(6)	0.8532(4)	0.028(2)
C21	0.8657(6)	0.2506(7)	0.8387(5)	0.044(3)
C22	0.8136(6)	0.2342(7)	0.8929(6)	0.044(3)
C23	0.8780(6)	0.2289(8)	0.9614(6)	0.048(3)
C24	0.9956(6)	0.2394(7)	0.9753(5)	0.035(2)
C25	1.3337(6)	0.4938(8)	0.6442(5)	0.049(3)
C26	1.2782(8)	0.4932(12)	0.5698(5)	0.084(6)
C27	1.1536(8)	0.4894(9)	0.5644(5)	0.061(3)
C28	1.1431(6)	0.4990(7)	0.6375(5)	0.040(3)
C29	1.2177(6)	0.5640(6)	0.8243(5)	0.032(2)
C30	1.1249(7)	0.6162(7)	0.8458(6)	0.051(3)
C31	1.0184(6)	0.5683(8)	0.8143(6)	0.054(3)
C32	1.0545(5)	0.4760(6)	0.8192(5)	0.032(2)
C33	1.4970(6)	0.2851(7)	0.7163(5)	0.037(2)
C34	1.5212(6)	0.1984(8)	0.6933(5)	0.043(3)
C35	1.4231(6)	0.1823(7)	0.6303(5)	0.040(2)
C36	1.3258(6)	0.2280(7)	0.6479(5)	0.041(3)

Atom	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
Y1	0.0181(2)	0.0143(3)	0.0152(3)	0.0005(3)	0.0046(2)	-0.0016(2)
Cl1	0.0264(8)	0.0350(15)	0.0274(10)	-0.0051(9)	0.0026(6)	-0.0095(7)
Cl2	0.0243(7)	0.0232(13)	0.0286(10)	-0.0011(8)	0.0023(6)	-0.0073(6)
P1	0.0225(7)	0.0155(12)	0.0211(10)	0.0004(8)	0.0078(6)	0.0017(6)
P2	0.0226(8)	0.0197(13)	0.0233(10)	0.0011(9)	0.0106(6)	0.0010(7)
N	0.019(2)	0.008(4)	0.021(3)	0.001(3)	0.008(2)	-0.001(2)
O1	0.025(2)	0.043(5)	0.030(3)	0.022(3)	0.010(2)	0.003(2)
O2	0.024(2)	0.024(4)	0.034(3)	0.001(3)	0.008(2)	0.004(2)
O3	0.025(2)	0.033(4)	0.021(3)	-0.007(3)	0.006(2)	-0.002(2)
C1	0.021(3)	0.018(5)	0.025(4)	-0.001(3)	-0.004(2)	-0.002(3)
C2	0.052(4)	0.021(6)	0.036(5)	0.001(4)	0.017(3)	0.012(4)
C3	0.067(5)	0.011(5)	0.030(5)	-0.009(4)	-0.004(4)	0.018(4)
C4	0.044(4)	0.021(6)	0.049(6)	-0.002(5)	-0.017(4)	-0.002(4)
C5	0.026(4)	0.029(7)	0.059(6)	0.016(5)	-0.001(3)	-0.005(3)
C6	0.023(3)	0.024(5)	0.032(4)	0.001(4)	-0.001(3)	0.002(3)
C7	0.017(3)	0.015(5)	0.025(4)	0.002(3)	0.005(2)	0.004(2)
C8	0.025(3)	0.017(5)	0.035(4)	0.005(4)	0.006(3)	-0.003(3)
C9	0.036(4)	0.045(8)	0.029(4)	0.010(4)	0.006(3)	0.009(3)
C10	0.027(3)	0.012(5)	0.033(4)	0.000(3)	0.007(3)	0.004(3)
C11	0.020(3)	0.041(7)	0.032(5)	0.008(4)	0.005(3)	-0.003(3)
C12	0.019(3)	0.028(6)	0.026(4)	0.003(4)	0.004(2)	0.002(3)
C13	0.027(3)	0.017(5)	0.014(3)	-0.005(3)	0.005(2)	-0.002(2)
C14	0.031(4)	0.045(7)	0.042(5)	-0.016(5)	0.021(3)	-0.009(3)
C15	0.045(4)	0.027(7)	0.046(6)	-0.008(5)	0.025(4)	0.003(4)
C16	0.044(4)	0.016(6)	0.039(5)	-0.005(4)	0.009(3)	-0.004(3)
C17	0.027(3)	0.028(6)	0.030(4)	-0.005(4)	0.006(3)	-0.004(3)
C18	0.023(3)	0.023(5)	0.021(4)	0.000(3)	0.006(2)	0.003(3)
C19	0.030(3)	0.017(5)	0.029(4)	-0.001(3)	0.014(3)	-0.004(3)
C20	0.032(3)	0.017(6)	0.039(5)	-0.001(4)	0.015(3)	-0.010(3)

Atom	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
C21	0.027(4)	0.044(8)	0.056(6)	-0.001(5)	0.002(3)	-0.012(4)
C22	0.025(3)	0.040(7)	0.071(7)	-0.010(5)	0.019(4)	-0.007(3)
C23	0.038(4)	0.040(8)	0.078(8)	-0.005(6)	0.038(4)	-0.006(4)
C24	0.038(4)	0.039(7)	0.037(5)	-0.001(4)	0.025(3)	-0.008(4)
C25	0.034(4)	0.062(9)	0.053(6)	0.023(6)	0.015(4)	-0.006(4)
C26	0.072(7)	0.16(2)	0.029(6)	0.023(8)	0.028(5)	0.012(7)
C27	0.075(6)	0.052(10)	0.040(6)	0.002(6)	-0.016(5)	-0.004(6)
C28	0.033(4)	0.035(7)	0.050(6)	0.023(5)	0.005(3)	0.015(4)
C29	0.039(4)	0.011(5)	0.046(5)	-0.013(4)	0.011(3)	-0.001(3)
C30	0.047(5)	0.021(7)	0.082(8)	-0.021(6)	0.007(4)	0.009(4)
C31	0.036(4)	0.045(9)	0.080(8)	-0.003(6)	0.010(4)	0.014(4)
C32	0.019(3)	0.035(6)	0.044(5)	-0.002(4)	0.013(3)	0.004(3)
C33	0.031(4)	0.046(8)	0.038(5)	-0.009(5)	0.014(3)	-0.005(4)
C34	0.039(4)	0.041(8)	0.052(6)	-0.004(5)	0.017(4)	0.011(4)
C35	0.049(5)	0.032(7)	0.042(6)	-0.015(5)	0.019(4)	0.002(4)
C36	0.041(4)	0.038(7)	0.036(5)	-0.020(5)	-0.003(3)	0.009(4)

### 5.2.27 [{(Ph<sub>2</sub>P)<sub>2</sub>N}ErCl<sub>2</sub>(THF)<sub>3</sub>] (13b)

Summenformel	C <sub>36</sub> H <sub>44</sub> Cl <sub>2</sub> ErNO <sub>3</sub> P <sub>2</sub>
Molare Masse [g•mol <sup>-1</sup> ]	838.82
Raumgruppe	P2 <sub>1</sub> /c (No. 14:b1)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1212.3(2), 1556.4(3), 1968.8(4)
β [°]	103.99(3)
Volumen [10 <sup>6</sup> pm <sup>3</sup> ]	3604.8(12)
Röntgenographische Dichte [g•cm <sup>-3</sup> ]	1.546
Messgerät	Stoe IPDS I
Strahlungsquelle	Ag-K <sub>α</sub> (λ= 56.087 pm)
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	keine
Absorptionskoeffizient [mm <sup>-1</sup> ]	1.393
Gemessene Reflexe	22620
Unabhängige Reflexe	8646 [R <sub>int</sub> = 0.1565]
Beobachtete Reflexe [I>2σ(I)]	5627
Daten / Parameter	8646 / 406
R <sub>1</sub> ; wR <sub>2</sub>	0.0745; 0.2075

Atom	x	y	z	U <sub>eq/iso</sub>
Er	1.26869(3)	0.35898(3)	0.774343(18)	0.02282(14)
Cl1	1.0860(2)	0.29646(19)	0.69373(12)	0.0417(6)
Cl2	1.4526(2)	0.4436(2)	0.82445(11)	0.0341(5)
P1	1.3425(2)	0.20992(15)	0.85456(11)	0.0267(5)
P2	1.2054(2)	0.2735(2)	0.94742(12)	0.0280(5)
N	1.2462(6)	0.2807(5)	0.8705(3)	0.0240(15)

Atom	x	y	z	$U_{eq/iso}$
O1	1.2485(7)	0.4623(5)	0.6801(4)	0.042(2)
O2	1.1726(6)	0.4757(4)	0.8106(3)	0.036(2)
O3	1.3752(6)	0.2945(5)	0.7009(3)	0.038(2)
C1	1.2842(9)	0.1006(6)	0.8408(5)	0.034(2)
C2	1.3166(11)	0.0496(8)	0.7913(5)	0.045(3)
C3	1.2762(13)	-0.0308(9)	0.7764(6)	0.059(4)
C4	1.2007(13)	-0.0636(8)	0.8108(7)	0.059(3)
C5	1.1644(12)	-0.0172(8)	0.8601(7)	0.056(3)
C6	1.2063(10)	0.0664(7)	0.8751(6)	0.042(2)
C7	1.4567(8)	0.1967(6)	0.9349(4)	0.028(2)
C8	1.4716(9)	0.1258(6)	0.9783(5)	0.034(2)
C9	1.5587(10)	0.1224(7)	1.0386(5)	0.040(2)
C10	1.6316(9)	0.1910(8)	1.0561(5)	0.040(2)
C11	1.6175(9)	0.2615(7)	1.0125(5)	0.040(2)
C12	1.5308(9)	0.2654(6)	0.9526(5)	0.034(2)
C13	1.2175(8)	0.3853(7)	0.9800(5)	0.031(2)
C14	1.1457(10)	0.4209(8)	1.0182(5)	0.044(3)
C15	1.1706(10)	0.5002(8)	1.0510(6)	0.051(3)
C16	1.2664(10)	0.5436(7)	1.0488(6)	0.045(3)
C17	1.3370(9)	0.5098(7)	1.0107(5)	0.038(2)
C18	1.3150(9)	0.4310(7)	0.9781(5)	0.034(2)
C19	1.0523(9)	0.2590(6)	0.9238(5)	0.036(2)
C20	0.9867(10)	0.2619(7)	0.8554(6)	0.040(2)
C21	0.8693(10)	0.2494(8)	0.8421(7)	0.051(3)
C22	0.8161(11)	0.2345(8)	0.8945(8)	0.057(3)
C23	0.8807(12)	0.2276(8)	0.9633(8)	0.056(3)
C24	0.9997(11)	0.2402(8)	0.9771(7)	0.053(3)
C25	1.3333(11)	0.4899(10)	0.6457(7)	0.062(4)
C26	1.279(2)	0.4971(15)	0.5712(7)	0.094(6)
C27	1.154(2)	0.4891(12)	0.5644(7)	0.086(6)
C28	1.1430(12)	0.4958(10)	0.6394(6)	0.062(4)
C29	1.2186(10)	0.5629(7)	0.8233(6)	0.043(2)
C30	1.1268(13)	0.6136(10)	0.8450(9)	0.071(4)
C31	1.0214(12)	0.5660(9)	0.8170(9)	0.071(4)
C32	1.0582(9)	0.4741(7)	0.8203(6)	0.042(2)
C33	1.4985(9)	0.2846(9)	0.7187(6)	0.049(3)
C34	1.5215(11)	0.1975(9)	0.6938(7)	0.054(3)
C35	1.4222(13)	0.1819(10)	0.6316(7)	0.065(4)
C36	1.3250(13)	0.2287(10)	0.6480(7)	0.069(4)

Atom	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{23}$	$U_{13}$	$U_{12}$
Er	0.0269(2)	0.0226(2)	0.0184(2)	0.00067(15)	0.00459(13)	-0.0019(2)
Cl1	0.0397(14)	0.049(2)	0.0321(11)	-0.0068(10)	0.0008(10)	-0.0139(12)
Cl2	0.0317(12)	0.0359(13)	0.0318(10)	-0.0006(9)	0.0019(9)	-0.0076(10)
P1	0.0330(12)	0.0240(12)	0.0249(10)	0.0032(8)	0.0105(9)	0.0038(10)
P2	0.0335(13)	0.0285(13)	0.0243(10)	0.0014(9)	0.0118(10)	0.0002(10)
N	0.029(4)	0.023(4)	0.019(3)	0.003(3)	0.004(3)	0.004(3)
O1	0.040(4)	0.049(5)	0.035(3)	0.015(3)	0.008(3)	-0.001(3)
O2	0.046(4)	0.023(4)	0.038(3)	-0.005(3)	0.009(3)	-0.001(3)
O3	0.047(4)	0.050(5)	0.021(3)	-0.007(3)	0.013(3)	0.008(4)

Atom	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{23}$	$U_{13}$	$U_{12}$
C1	0.050(6)	0.022(5)	0.030(4)	0.000(4)	0.007(4)	0.003(4)
C2	0.063(8)	0.041(7)	0.028(5)	-0.004(4)	0.005(5)	0.006(6)
C3	0.087(11)	0.040(7)	0.041(6)	-0.016(5)	-0.004(6)	0.011(7)
C4	0.078(10)	0.022(6)	0.062(7)	0.000(5)	-0.014(7)	0.007(6)
C5	0.052(8)	0.035(7)	0.074(8)	0.015(6)	-0.001(7)	-0.004(6)
C6	0.045(6)	0.031(6)	0.045(5)	-0.007(4)	0.004(5)	0.005(5)
C7	0.027(4)	0.033(5)	0.024(4)	0.004(3)	0.005(3)	0.008(4)
C8	0.033(5)	0.025(5)	0.040(5)	0.009(4)	0.002(4)	0.011(4)
C9	0.053(7)	0.031(6)	0.034(5)	0.013(4)	0.005(5)	0.013(5)
C10	0.038(6)	0.050(7)	0.026(4)	-0.003(4)	-0.004(4)	-0.002(5)
C11	0.034(6)	0.043(6)	0.039(5)	0.003(4)	0.000(4)	-0.012(5)
C12	0.035(5)	0.029(5)	0.037(5)	0.010(4)	0.005(4)	0.000(4)
C13	0.028(5)	0.038(5)	0.025(4)	-0.002(4)	0.004(4)	0.001(4)
C14	0.050(7)	0.045(6)	0.040(5)	-0.008(5)	0.019(5)	-0.004(5)
C15	0.047(7)	0.058(8)	0.058(7)	-0.021(6)	0.031(6)	0.005(6)
C16	0.050(7)	0.033(6)	0.050(6)	-0.008(5)	0.008(5)	-0.007(5)
C17	0.031(5)	0.037(6)	0.046(5)	0.001(4)	0.010(5)	-0.002(4)
C18	0.041(6)	0.036(6)	0.027(4)	0.002(4)	0.010(4)	0.005(4)
C19	0.044(6)	0.027(5)	0.042(5)	-0.001(4)	0.020(5)	-0.004(4)
C21	0.033(6)	0.045(7)	0.069(7)	-0.001(6)	0.000(6)	-0.003(5)
C22	0.032(6)	0.050(8)	0.089(10)	-0.009(7)	0.014(7)	-0.012(5)
C23	0.062(8)	0.049(8)	0.072(8)	-0.001(6)	0.042(8)	-0.010(6)
C24	0.055(8)	0.051(7)	0.062(7)	0.001(6)	0.035(7)	-0.004(6)
C25	0.050(8)	0.081(10)	0.057(7)	0.041(7)	0.019(6)	0.001(7)
C26	0.082(13)	0.16(2)	0.042(7)	0.016(9)	0.026(8)	0.019(12)
C27	0.131(17)	0.074(12)	0.038(6)	0.005(7)	-0.007(8)	0.023(11)
C28	0.055(8)	0.077(10)	0.051(7)	0.027(7)	0.006(6)	-0.005(7)
C29	0.050(7)	0.028(6)	0.046(5)	-0.003(4)	0.002(5)	0.001(5)
C30	0.056(9)	0.053(9)	0.099(11)	-0.026(8)	0.010(8)	0.008(7)
C31	0.048(8)	0.057(9)	0.108(12)	-0.019(8)	0.022(8)	0.001(7)
C32	0.030(5)	0.045(7)	0.053(6)	-0.003(5)	0.014(5)	0.006(5)
C33	0.030(5)	0.068(9)	0.050(6)	-0.023(6)	0.009(5)	-0.003(5)
C34	0.050(7)	0.051(8)	0.064(7)	-0.013(6)	0.021(6)	0.001(6)
C35	0.084(11)	0.062(9)	0.053(7)	-0.026(6)	0.019(7)	0.004(8)
C36	0.080(11)	0.078(11)	0.044(6)	-0.037(7)	0.008(7)	0.007(8)

5.2.28 [ $\{(\text{Ph}_2\text{P})_2\text{N}\}\text{YbCl}_2(\text{THF})_3$ ] (13c)

Summenformel	$\text{C}_{36}\text{H}_{44}\text{Cl}_2\text{NO}_3\text{P}_2\text{Yb}$
Molare Masse [ $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ]	844.60
Raumgruppe	$P2_1/c$ (No. 14:b1)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1207.42(8), 1554.16(7), 1962.81(14)
$\beta$ [°]	103.541(8)
Volumen [ $10^6 \text{ pm}^3$ ]	3580.9(4)
Röntgenographische Dichte [ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ]	1.569
Messgerät	Stoe IPDS I
Strahlungsquelle	Ag- $\text{K}\alpha$ ( $\lambda = 56.087 \text{ pm}$ )
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	keine
Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]	1.548
Gemessene Reflexe	21472
Unabhängige Reflexe	9181 [ $R_{\text{int}} = 0.0390$ ]
Beobachtete Reflexe [ $I > 2\sigma(I)$ ]	7302
Daten / Parameter	9181 / 406
$R_1; wR_2$	0.0285; 0.0693

Atom	x	y	z	$U_{\text{eq/iso}}$
Yb	0.16174(2)	0.2483	0.16172(2)	0.02361(13)
Cl	0.0372(2)	0.2485(7)	0.0371(2)	0.0633(11)
P1	0.1782(2)	0.2101(3)	0.3480(2)	0.0348(7)
P2	0.0033(2)	0.3061(3)	0.3477(2)	0.0366(7)
P3	0.3478(2)	0.3071(3)	0.0041(3)	0.0372(7)
P4	0.3480(2)	0.2101(3)	0.1782(2)	0.0356(7)
N1	0.0872(6)	0.2402(14)	0.2908(6)	0.043(3)
N2	0.2881(6)	0.2515(16)	0.0884(6)	0.044(3)
O1	0.1497(9)	0.0668(13)	0.1539(8)	0.043(4)
O2	0.1578(9)	0.431(2)	0.1526(11)	0.061(6)
C1	0.1480(11)	0.0962(14)	0.4124(12)	0.050(4)
C2	0.2032(14)	0.060(2)	0.4840(15)	0.063(5)
C3	0.185(2)	-0.044(2)	0.526(2)	0.084(7)
C4	0.110(2)	-0.095(2)	0.494(2)	0.081(6)
C5	0.048(2)	-0.052(2)	0.421(2)	0.080(6)
C6	0.0681(14)	0.041(2)	0.3808(15)	0.062(5)
C7	0.2215(10)	0.3007(13)	0.4357(10)	0.043(3)
C8	0.1716(13)	0.314(2)	0.5085(13)	0.056(4)
C9	0.200(2)	0.396(2)	0.573(2)	0.074(6)
C10	0.2718(14)	0.469(2)	0.5469(15)	0.067(5)
C11	0.320(2)	0.457(2)	0.472(2)	0.082(6)
C12	0.2889(13)	0.370(2)	0.4126(15)	0.061(4)
C13	-0.0973(6)	0.2565(14)	0.2881(7)	0.031(2)
C14	-0.0946(14)	0.185(2)	0.2209(14)	0.066(5)
C15	-0.1791(15)	0.136(2)	0.185(2)	0.072(5)
C16	-0.2562(17)	0.169(2)	0.222(2)	0.077(6)

Atom	x	y	z	$U_{eq/iso}$
C17	-0.2585(12)	0.252(3)	0.2933(12)	0.068(4)
C18	-0.1759(12)	0.2795(14)	0.3268(13)	0.057(4)
C19	-0.0008(10)	0.4448(13)	0.3247(10)	0.042(3)
C20	0.0357(13)	0.515(2)	0.3851(14)	0.056(4)
C21	0.0344(16)	0.625(2)	0.373(2)	0.072(5)
C22	-0.0061(14)	0.669(2)	0.2995(15)	0.065(5)
C23	-0.053(2)	0.603(2)	0.235(2)	0.091(7)
C24	-0.0477(12)	0.4936(15)	0.2427(13)	0.053(4)
C25	0.4106(12)	0.0966(15)	0.1481(13)	0.054(4)
C26	0.3813(12)	0.0418(15)	0.0712(13)	0.054(4)
C27	0.418(2)	-0.049(2)	0.047(2)	0.089(7)
C28	0.490(2)	-0.095(3)	0.113(2)	0.106(10)
C29	0.521(2)	-0.044(2)	0.186(2)	0.086(7)
C30	0.484(2)	0.060(2)	0.204(2)	0.074(6)
C31	0.4380(10)	0.3028(14)	0.2203(11)	0.046(3)
C32	0.5102(13)	0.313(2)	0.1694(14)	0.060(4)
C33	0.573(2)	0.397(2)	0.201(2)	0.072(5)
C34	0.5428(14)	0.470(2)	0.2754(14)	0.062(4)
C35	0.469(2)	0.458(2)	0.317(2)	0.075(6)
C36	0.4143(13)	0.368(2)	0.2878(14)	0.059(4)
C37	0.2885(7)	0.245(2)	-0.0984(7)	0.036(2)
C38	0.2219(14)	0.184(2)	-0.0990(15)	0.067(5)
C39	0.188(2)	0.139(2)	-0.184(2)	0.078(6)
C40	0.2271(15)	0.171(2)	-0.259(2)	0.071(5)
C41	0.2932(12)	0.252(3)	-0.2581(13)	0.070(4)
C42	0.3291(12)	0.2776(14)	-0.1774(12)	0.054(4)
C43	0.3256(9)	0.4471(12)	-0.0016(9)	0.036(3)
C44	0.2456(12)	0.493(2)	-0.0515(13)	0.054(4)
C45	0.237(2)	0.601(2)	-0.053(2)	0.073(6)
C46	0.3030(15)	0.666(2)	-0.009(2)	0.070(5)
C47	0.3724(15)	0.627(2)	0.032(2)	0.072(5)
C48	0.3824(13)	0.515(2)	0.0364(13)	0.055(4)
C49	0.2128(13)	-0.0037(14)	0.2085(13)	0.041(4)
C50	0.198(2)	-0.119(2)	0.185(2)	0.069(5)
C51	0.165(3)	-0.124(3)	0.097(3)	0.129(13)
C52	0.110(2)	0.000(2)	0.081(2)	0.078(6)
C53	0.073(2)	0.495(2)	0.114(2)	0.082(7)
C54	0.081(3)	0.590(3)	0.154(3)	0.126(12)
C55	0.171(2)	0.611(3)	0.197(3)	0.099(9)
C56	0.197(2)	0.503(2)	0.205(2)	0.071(7)

Atom	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{23}$	$U_{13}$	$U_{12}$
Yb	0.02161(6)	0.02040(6)	0.01913(6)	0.00066(5)	0.00438(4)	-0.00128(5)
Cl1	0.0324(4)	0.0465(5)	0.0314(4)	-0.0061(4)	0.0015(3)	-0.0119(3)
Cl2	0.0279(3)	0.0311(4)	0.0330(4)	-0.0003(3)	0.0026(3)	-0.0071(3)
P1	0.0274(3)	0.0202(3)	0.0230(4)	0.0012(3)	0.0080(3)	0.0014(3)
P2	0.0277(3)	0.0223(4)	0.0249(4)	0.0017(3)	0.0099(3)	0.0011(3)
N1	0.0239(11)	0.0175(11)	0.0214(12)	0.0010(9)	0.0062(9)	0.0001(9)
O1	0.0314(11)	0.0504(15)	0.0344(13)	0.0185(11)	0.0082(10)	0.0003(10)
O2	0.0304(10)	0.0209(10)	0.0359(12)	-0.0013(9)	0.0094(9)	-0.0002(8)

---

Atom	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
O3	0.0326(11)	0.0369(12)	0.0280(12)	-0.0044(10)	0.0096(9)	0.0026(9)
C1	0.0344(15)	0.0205(14)	0.0306(16)	-0.0002(12)	0.0028(13)	0.0030(11)
C2	0.058(2)	0.030(2)	0.037(2)	-0.0033(14)	0.014(2)	0.006(2)
C3	0.080(3)	0.027(2)	0.045(2)	-0.011(2)	-0.005(2)	0.009(2)
C4	0.055(2)	0.024(2)	0.058(3)	-0.003(2)	-0.026(2)	-0.002(2)
C5	0.033(2)	0.029(2)	0.068(3)	0.007(2)	-0.005(2)	-0.0070(14)
C6	0.035(2)	0.028(2)	0.046(2)	-0.0006(15)	0.007(2)	-0.0017(13)
C7	0.0234(12)	0.0237(14)	0.0259(15)	0.0020(11)	0.0075(11)	0.0027(10)
C8	0.036(2)	0.0232(15)	0.039(2)	0.0037(13)	0.0074(14)	-0.0010(12)
C9	0.042(2)	0.032(2)	0.035(2)	0.0120(14)	0.0044(15)	0.0061(13)
C10	0.0338(15)	0.038(2)	0.031(2)	0.0033(14)	0.0011(14)	0.0092(14)
C11	0.0295(15)	0.032(2)	0.040(2)	0.0041(14)	0.0031(14)	-0.0036(13)
C12	0.0292(14)	0.0274(15)	0.036(2)	0.0097(13)	0.0086(13)	-0.0013(12)
C13	0.0291(14)	0.0245(13)	0.0214(14)	-0.0022(11)	0.0038(12)	0.0007(11)
C14	0.036(2)	0.038(2)	0.050(2)	-0.014(2)	0.019(2)	-0.0055(14)
C15	0.049(2)	0.044(2)	0.052(2)	-0.018(2)	0.027(2)	0.002(2)
C16	0.050(2)	0.027(2)	0.040(2)	-0.0080(14)	0.012(2)	0.0001(14)
C17	0.038(2)	0.030(2)	0.038(2)	-0.0024(14)	0.0095(15)	-0.0053(13)
C18	0.0317(14)	0.0287(15)	0.030(2)	-0.0045(13)	0.0094(13)	-0.0006(12)
C19	0.0295(14)	0.0181(13)	0.045(2)	-0.0022(13)	0.0153(14)	-0.0033(11)
C20	0.033(2)	0.026(2)	0.048(2)	-0.0006(14)	0.0108(15)	-0.0052(12)
C21	0.034(2)	0.038(2)	0.070(3)	-0.004(2)	0.005(2)	-0.0040(15)
C22	0.034(2)	0.041(2)	0.097(4)	-0.012(2)	0.026(2)	-0.010(2)
C23	0.051(2)	0.047(2)	0.086(4)	-0.010(2)	0.047(2)	-0.010(2)
C24	0.047(2)	0.037(2)	0.051(2)	0.001(2)	0.029(2)	-0.0027(15)
C25	0.047(2)	0.067(3)	0.057(3)	0.031(2)	0.020(2)	-0.004(2)
C26	0.085(4)	0.147(6)	0.045(3)	0.023(3)	0.032(3)	0.024(4)
C27	0.075(3)	0.069(3)	0.042(2)	0.004(2)	-0.011(2)	0.003(3)
C28	0.037(2)	0.052(2)	0.055(2)	0.025(2)	0.006(2)	0.007(2)
C29	0.042(2)	0.0216(15)	0.048(2)	-0.0019(14)	0.008(2)	-0.0031(13)
C30	0.056(3)	0.039(2)	0.096(4)	-0.020(2)	0.009(3)	0.011(2)
C31	0.049(2)	0.043(2)	0.100(4)	-0.008(2)	0.024(2)	0.013(2)
C32	0.0296(15)	0.030(2)	0.050(2)	-0.0011(15)	0.0132(15)	0.0019(13)
C33	0.029(2)	0.060(2)	0.050(2)	-0.019(2)	0.014(2)	-0.002(2)
C34	0.044(2)	0.050(2)	0.056(3)	-0.001(2)	0.014(2)	0.011(2)
C35	0.062(2)	0.049(2)	0.050(2)	-0.017(2)	0.020(2)	0.001(2)
C36	0.049(2)	0.069(3)	0.040(2)	-0.027(2)	0.002(2)	0.010(2)

---

5.2.29  $[(\text{Ph}_2\text{P})_2\text{N}]\text{Sm}(\text{C}_5\text{Me}_5)_2$  (14)

Summenformel	$\text{C}_{44}\text{H}_{50}\text{NP}_2\text{Sm}$
Molare Masse [ $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ]	805.14
Raumgruppe	$P2_1/n$ (No. 14:b2)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1009.23(6), 1711.27(9), 2227.51(15)
$\beta$ [°]	97.793(8)
Volumen [ $10^6 \text{ pm}^3$ ]	3811.5(4)
Röntgenographische Dichte [ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ]	1.403
Messgerät	Stoe IPDS I
Strahlungsquelle	Ag- $\text{K}\alpha$ ( $\lambda = 56.087 \text{ pm}$ )
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	keine
Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]	0.888
Gemessene Reflexe	17584
Unabhängige Reflexe	9238 [ $R_{\text{int}} = 0.0625$ ]
Beobachtete Reflexe [ $I > 2\sigma(I)$ ]	6911
Daten / Parameter	9238 / 443
$R_1; wR_2$	0.0435; 0.1037

Atom	x	y	z	$U_{\text{eq/iso}}$
Sm	0.87331(2)	0.310210(11)	0.618768(8)	0.02088(6)
P1	0.76991(11)	0.26828(6)	0.49376(4)	0.0255(2)
P2	0.58573(11)	0.17080(6)	0.56221(5)	0.0271(2)
N	0.7214(3)	0.2259(2)	0.55419(14)	0.0248(7)
C1	0.8150(4)	0.1967(3)	0.4382(2)	0.0283(8)
C2	0.7461(5)	0.1274(3)	0.4253(2)	0.0355(10)
C3	0.7789(6)	0.0766(3)	0.3805(2)	0.0440(12)
C4	0.8789(6)	0.0965(3)	0.3473(2)	0.0450(13)
C5	0.9490(6)	0.1653(3)	0.3595(2)	0.0441(12)
C6	0.9176(5)	0.2153(3)	0.4045(2)	0.0359(10)
C7	0.6323(5)	0.3145(3)	0.4426(2)	0.0310(9)
C8	0.6702(6)	0.3673(3)	0.4006(2)	0.0408(11)
C9	0.5758(6)	0.4100(3)	0.3627(2)	0.0466(14)
C10	0.4421(7)	0.3985(3)	0.3661(2)	0.053(2)
C11	0.4022(6)	0.3447(3)	0.4060(2)	0.0478(13)
C12	0.4976(5)	0.3027(3)	0.4443(2)	0.0402(11)
C13	0.6478(4)	0.0695(3)	0.5692(2)	0.0290(9)
C14	0.5607(5)	0.0098(3)	0.5815(2)	0.0433(11)
C15	0.6051(6)	-0.0676(3)	0.5867(2)	0.0526(14)
C16	0.7330(6)	-0.0867(3)	0.5773(2)	0.0483(13)
C17	0.8197(6)	-0.0288(3)	0.5644(2)	0.0508(13)
C18	0.7764(5)	0.0494(3)	0.5609(2)	0.0394(11)
C19	0.5803(4)	0.1826(3)	0.6444(2)	0.0302(9)
C20	0.6986(5)	0.1812(3)	0.6854(2)	0.0343(10)
C21	0.6926(7)	0.1833(3)	0.7471(2)	0.0512(14)



Atom	x	y	z	U <sub>eq/iso</sub>
C22	0.5690(8)	0.1859(3)	0.7680(2)	0.064(2)
C23	0.4542(7)	0.1893(4)	0.7289(3)	0.060(2)
C24	0.4588(5)	0.1880(3)	0.6661(2)	0.0445(11)
C25	0.6667(4)	0.4121(2)	0.6196(2)	0.0273(8)
C26	0.7567(5)	0.4514(2)	0.5867(2)	0.0294(9)
C27	0.8731(5)	0.4721(2)	0.6282(2)	0.0308(9)
C28	0.8518(5)	0.4463(2)	0.6864(2)	0.0310(9)
C29	0.7249(4)	0.4087(2)	0.6811(2)	0.0261(8)
C30	0.5264(5)	0.3884(3)	0.5955(2)	0.0411(11)
C31	0.7274(6)	0.4808(3)	0.5230(2)	0.0458(13)
C32	0.9807(6)	0.5246(3)	0.6117(3)	0.0499(13)
C33	0.9321(6)	0.4685(3)	0.7461(2)	0.0484(13)
C34	0.6566(6)	0.3838(3)	0.7339(2)	0.0456(12)
C35	1.0590(4)	0.1966(2)	0.6650(2)	0.0286(8)
C36	1.0898(4)	0.2653(2)	0.7001(2)	0.0284(9)
C37	1.1384(4)	0.3220(3)	0.6626(2)	0.0316(9)
C38	1.1333(4)	0.2895(3)	0.6035(2)	0.0337(10)
C39	1.0864(4)	0.2115(3)	0.6053(2)	0.0283(9)
C40	1.0310(5)	0.1182(3)	0.6905(2)	0.0385(11)
C41	1.0889(5)	0.2712(3)	0.7675(2)	0.0381(11)
C42	1.2142(5)	0.3950(3)	0.6837(2)	0.0484(13)
C43	1.1818(5)	0.3274(4)	0.5494(2)	0.0487(14)
C44	1.0931(5)	0.1516(3)	0.5563(2)	0.0425(12)

Atom	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
Sm	0.02336(11)	0.01884(9)	0.02007(9)	-0.00030(8)	0.00164(6)	0.00013(9)
P1	0.0289(6)	0.0268(5)	0.0205(4)	0.0010(4)	0.0021(4)	-0.0005(4)
P2	0.0255(6)	0.0286(5)	0.0262(5)	0.0013(4)	-0.0002(4)	-0.0030(4)
N	0.026(2)	0.026(2)	0.0217(14)	0.0003(13)	0.0035(12)	-0.0036(14)
C1	0.027(2)	0.036(2)	0.022(2)	0.000(2)	0.0054(14)	0.005(2)
C2	0.040(3)	0.038(2)	0.029(2)	-0.004(2)	0.007(2)	-0.001(2)
C3	0.059(3)	0.033(2)	0.040(2)	-0.002(2)	0.008(2)	-0.001(2)
C4	0.070(4)	0.038(3)	0.030(2)	0.003(2)	0.014(2)	0.019(2)
C5	0.051(3)	0.048(3)	0.038(2)	0.012(2)	0.025(2)	0.018(2)
C6	0.038(3)	0.038(2)	0.033(2)	0.004(2)	0.011(2)	0.001(2)
C7	0.042(2)	0.028(2)	0.022(2)	-0.004(2)	-0.003(2)	0.006(2)
C8	0.061(3)	0.032(2)	0.028(2)	0.001(2)	0.000(2)	0.001(2)
C9	0.084(4)	0.027(2)	0.025(2)	-0.002(2)	-0.006(2)	0.003(2)
C10	0.083(4)	0.037(3)	0.031(2)	-0.009(2)	-0.016(2)	0.026(3)
C11	0.046(3)	0.044(3)	0.050(3)	-0.006(2)	-0.006(2)	0.017(2)
C12	0.040(3)	0.047(3)	0.032(2)	-0.003(2)	-0.001(2)	0.008(2)
C13	0.034(2)	0.028(2)	0.024(2)	-0.003(2)	-0.002(2)	-0.003(2)
C14	0.038(3)	0.035(3)	0.056(3)	-0.001(2)	0.006(2)	-0.007(2)
C15	0.065(4)	0.031(3)	0.058(3)	0.001(2)	-0.005(3)	-0.012(3)
C16	0.059(4)	0.031(3)	0.052(3)	-0.004(2)	-0.003(2)	0.005(2)
C17	0.048(3)	0.047(3)	0.057(3)	0.002(2)	0.007(2)	0.014(2)
C18	0.038(3)	0.036(3)	0.043(2)	0.002(2)	0.005(2)	-0.004(2)
C19	0.035(2)	0.027(2)	0.030(2)	0.001(2)	0.011(2)	0.003(2)
C20	0.044(3)	0.030(2)	0.029(2)	0.005(2)	0.005(2)	0.001(2)
C21	0.082(4)	0.039(3)	0.031(2)	0.001(2)	0.001(2)	0.009(3)

Atom	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
C22	0.118(6)	0.041(3)	0.039(3)	0.010(2)	0.037(3)	0.012(4)
C23	0.080(5)	0.047(3)	0.063(3)	0.005(3)	0.050(3)	0.011(3)
C24	0.043(3)	0.035(2)	0.059(3)	0.004(2)	0.018(2)	0.005(2)
C25	0.033(2)	0.017(2)	0.032(2)	-0.0026(15)	0.01(2)	0.0080(15)
C26	0.042(3)	0.020(2)	0.027(2)	0.0020(15)	0.010(2)	0.005(2)
C27	0.036(2)	0.024(2)	0.035(2)	-0.000(2)	0.011(2)	-0.002(2)
C28	0.042(3)	0.022(2)	0.029(2)	-0.003(2)	0.005(2)	0.000(2)
C29	0.035(2)	0.016(2)	0.031(2)	0.0001(14)	0.015(2)	0.0014(15)
C30	0.036(3)	0.031(2)	0.055(3)	-0.009(2)	0.002(2)	0.005(2)
C31	0.084(4)	0.029(2)	0.024(2)	0.004(2)	0.008(2)	0.011(2)
C32	0.056(4)	0.033(3)	0.064(3)	0.004(2)	0.020(3)	-0.014(2)
C33	0.060(4)	0.041(3)	0.041(3)	-0.014(2)	-0.002(2)	0.002(2)
C34	0.067(4)	0.034(3)	0.042(3)	0.003(2)	0.029(2)	0.002(2)
C35	0.026(2)	0.028(2)	0.030(2)	0.002(2)	-0.0022(15)	0.002(2)
C36	0.030(2)	0.027(2)	0.026(2)	0.0012(15)	-0.001(2)	-0.001(2)
C37	0.025(2)	0.031(2)	0.038(2)	0.003(2)	-0.003(2)	-0.003(2)
C38	0.024(2)	0.046(3)	0.031(2)	0.006(2)	0.004(2)	0.000(2)
C39	0.019(2)	0.037(2)	0.029(2)	-0.001(2)	0.0023(15)	0.007(2)
C40	0.044(3)	0.030(2)	0.039(2)	0.004(2)	-0.001(2)	0.009(2)
C41	0.049(3)	0.038(3)	0.026(2)	-0.001(2)	-0.001(2)	-0.001(2)
C42	0.038(3)	0.049(3)	0.057(3)	-0.005(2)	0.001(2)	-0.010(2)
C43	0.031(3)	0.073(4)	0.044(3)	0.012(3)	0.014(2)	-0.010(2)
C44	0.037(3)	0.055(3)	0.034(2)	-0.013(2)	0.003(2)	0.013(2)

### 5.2.30 [ $(\text{Ph}_2\text{P})_2\text{N}\text{La}(\text{C}_8\text{H}_8)(\text{THF})_2$ ] (15a)

Summenformel	C <sub>40</sub> H <sub>44</sub> LaNO <sub>2</sub> P <sub>2</sub>
Molare Masse [g•mol <sup>-1</sup> ]	771.61
Raumgruppe	P2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> (No. 19)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1055.22(5), 1124.32(7), 3040.46(14)
Volumen [10 <sup>6</sup> pm <sup>3</sup> ]	3607.2(3)
Röntgenographische Dichte [g•cm <sup>-3</sup> ]	1.421
Messgerät	Stoe IPDS I
Strahlungsquelle	Ag-K <sub>α</sub> (λ= 56.087 pm)
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	keine
Absorptionskoeffizient [mm <sup>-1</sup> ]	0.696
Gemessene Reflexe	20671
Unabhängige Reflexe	9510 [R <sub>int</sub> = 0.0349]
Beobachtete Reflexe [I>2σ(I)]	8790
Daten / Parameter	9510 / 407
R <sub>1</sub> ; wR <sub>2</sub>	0.0305; 0.0775

---

<b>Atom</b>	<b>x</b>	<b>y</b>	<b>z</b>	<b>U<sub>eq/iso</sub></b>
La	0.671013(15)	0.373350(15)	0.094485(4)	0.02288(4)
P1	0.65572(8)	0.47981(7)	0.18499(2)	0.02462(14)
P2	0.69719(8)	0.70877(8)	0.13783(2)	0.0269(2)
N	0.6798(3)	0.5591(2)	0.13961(6)	0.0234(4)
O1	0.4634(2)	0.2723(2)	0.12683(7)	0.0335(5)
O2	0.4782(2)	0.4648(2)	0.05776(7)	0.0308(5)
C1	0.7957(5)	0.3634(5)	0.01587(13)	0.0612(14)
C2	0.8893(5)	0.3925(5)	0.0458(2)	0.0603(14)
C3	0.9288(4)	0.3479(5)	0.0857(2)	0.0583(13)
C4	0.8903(5)	0.2550(5)	0.11307(15)	0.0523(12)
C5	0.7984(5)	0.1671(4)	0.11114(13)	0.0515(11)
C6	0.7057(4)	0.1336(5)	0.08047(15)	0.0523(10)
C7	0.6655(5)	0.1803(4)	0.03924(15)	0.0568(12)
C8	0.7035(5)	0.2762(5)	0.01235(12)	0.0592(15)
C9	0.7730(3)	0.5166(3)	0.22717(9)	0.0312(6)
C10	0.8519(4)	0.4260(4)	0.24168(11)	0.0440(9)
C11	0.9403(5)	0.4488(6)	0.27480(14)	0.0585(13)
C12	0.9502(4)	0.5598(6)	0.29270(13)	0.0589(14)
C13	0.8743(5)	0.6511(5)	0.27753(12)	0.0573(14)
C14	0.7847(4)	0.6287(5)	0.24533(10)	0.0438(8)
C15	0.5105(3)	0.5281(3)	0.21285(8)	0.0290(6)
C16	0.4658(4)	0.4558(4)	0.24694(11)	0.0438(9)
C17	0.3525(5)	0.4827(5)	0.26794(14)	0.0594(14)
C18	0.2827(5)	0.5791(6)	0.2548(2)	0.0627(15)
C19	0.3263(4)	0.6514(5)	0.22130(13)	0.0542(11)
C20	0.4385(3)	0.6238(5)	0.20001(10)	0.0406(7)
C21	0.6403(3)	0.7418(3)	0.08204(9)	0.0284(6)
C22	0.5425(4)	0.8218(4)	0.07660(12)	0.0372(7)
C23	0.4934(4)	0.8457(4)	0.03503(13)	0.0432(9)
C24	0.5424(4)	0.7898(4)	-0.00139(12)	0.0423(9)
C25	0.6405(3)	0.7097(4)	0.00346(10)	0.0380(8)
C26	0.6901(3)	0.6859(3)	0.04518(9)	0.0296(6)
C27	0.8669(3)	0.7333(3)	0.12840(9)	0.0296(6)
C28	0.9068(4)	0.8444(3)	0.11301(11)	0.0381(8)
C29	1.0329(4)	0.8715(5)	0.10941(12)	0.0494(10)
C30	1.1222(5)	0.7885(5)	0.12142(14)	0.0558(12)
C31	1.0859(4)	0.6783(5)	0.13689(13)	0.0500(10)
C32	0.9578(3)	0.6499(4)	0.14060(11)	0.0379(8)
C33	0.4425(4)	0.4616(3)	0.01150(10)	0.0346(7)
C34	0.3311(4)	0.5453(3)	0.00755(10)	0.0374(7)
C35	0.2680(4)	0.5301(4)	0.05188(13)	0.0412(8)
C36	0.3814(4)	0.5266(4)	0.08230(10)	0.0360(7)
C37	0.3608(4)	0.2293(5)	0.09976(14)	0.0532(11)
C38	0.3289(6)	0.1085(5)	0.11440(14)	0.0668(15)
C39	0.4081(5)	0.0856(4)	0.15496(12)	0.0479(10)
C40	0.4568(5)	0.2067(4)	0.16718(11)	0.0461(10)

---

Atom	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
La	0.02743(7)	0.02097(7)	0.02024(6)	-0.00263(5)	0.00047(5)	0.00290(6)
P1	0.0304(4)	0.0252(4)	0.0182(2)	-0.0008(2)	-0.0016(2)	-0.0024(3)
P2	0.0340(4)	0.0219(4)	0.0249(3)	-0.0031(2)	0.0017(3)	-0.0003(3)
N	0.0305(12)	0.0213(11)	0.0184(8)	0.0000(7)	-0.0001(9)	-0.0003(9)
O1	0.0391(13)	0.0324(14)	0.0290(10)	0.0032(8)	-0.0018(9)	-0.0107(10)
O2	0.0320(12)	0.0306(13)	0.0296(10)	0.0010(8)	-0.0059(8)	0.0043(9)
C1	0.084(3)	0.059(3)	0.041(2)	0.007(2)	0.034(2)	0.036(3)
C2	0.058(3)	0.040(3)	0.083(3)	0.004(2)	0.044(2)	0.008(2)
C3	0.033(2)	0.049(3)	0.093(4)	-0.020(2)	0.016(2)	0.003(2)
C4	0.050(2)	0.053(3)	0.054(2)	-0.013(2)	-0.015(2)	0.025(2)
C5	0.068(3)	0.039(2)	0.048(2)	0.0112(15)	0.006(2)	0.024(2)
C6	0.058(2)	0.020(2)	0.079(3)	-0.007(2)	0.018(2)	0.002(2)
C7	0.045(2)	0.054(3)	0.071(3)	-0.044(2)	-0.007(2)	0.009(2)
C8	0.074(3)	0.074(4)	0.0297(15)	-0.019(2)	-0.003(2)	0.042(3)
C9	0.033(2)	0.041(2)	0.0199(11)	-0.0017(10)	0.0012(10)	-0.0069(13)
C10	0.044(2)	0.055(3)	0.0335(15)	0.0028(13)	-0.0064(14)	0.002(2)
C11	0.046(2)	0.085(4)	0.045(2)	0.009(2)	-0.014(2)	0.004(2)
C12	0.037(2)	0.104(5)	0.035(2)	-0.005(2)	-0.0083(15)	-0.019(2)
C13	0.062(3)	0.075(4)	0.035(2)	-0.017(2)	-0.003(2)	-0.027(2)
C14	0.050(2)	0.050(2)	0.0322(14)	-0.0073(15)	-0.0050(12)	-0.006(2)
C15	0.0295(15)	0.037(2)	0.0204(11)	-0.0068(10)	0.0028(10)	-0.0078(12)
C16	0.055(2)	0.044(2)	0.0324(15)	-0.0010(13)	0.0124(15)	-0.012(2)
C17	0.058(3)	0.074(4)	0.046(2)	-0.006(2)	0.023(2)	-0.024(2)
C18	0.037(2)	0.094(5)	0.058(3)	-0.019(2)	0.016(2)	-0.012(2)
C19	0.037(2)	0.075(4)	0.051(2)	-0.008(2)	0.003(2)	0.012(2)
C20	0.034(2)	0.055(2)	0.0327(13)	0.0028(15)	0.0030(11)	0.001(2)
C21	0.034(2)	0.0212(15)	0.0302(12)	0.0019(9)	-0.0012(10)	-0.0001(10)
C22	0.041(2)	0.025(2)	0.045(2)	0.0017(12)	-0.0029(14)	0.0010(13)
C23	0.037(2)	0.035(2)	0.058(2)	0.0129(14)	-0.0092(15)	0.0023(14)
C24	0.041(2)	0.045(2)	0.041(2)	0.0185(15)	-0.0111(14)	-0.012(2)
C25	0.038(2)	0.047(2)	0.0290(13)	0.0070(12)	-0.0003(12)	-0.0091(14)
C26	0.029(2)	0.031(2)	0.0299(12)	0.0043(10)	0.0004(11)	-0.0013(11)
C27	0.0313(15)	0.032(2)	0.0252(12)	-0.0047(10)	0.0000(10)	-0.0054(11)
C28	0.049(2)	0.032(2)	0.0329(14)	-0.0031(11)	-0.0040(13)	-0.0103(14)
C29	0.057(2)	0.051(3)	0.040(2)	-0.002(2)	0.0031(15)	-0.023(2)
C30	0.042(2)	0.080(4)	0.045(2)	-0.012(2)	0.004(2)	-0.021(2)
C31	0.036(2)	0.069(3)	0.045(2)	-0.005(2)	-0.0016(15)	0.001(2)
C32	0.034(2)	0.045(2)	0.0347(14)	0.0010(12)	0.0009(12)	-0.0002(13)
C33	0.041(2)	0.030(2)	0.0321(14)	0.0007(11)	-0.0075(12)	-0.0009(13)
C34	0.042(2)	0.030(2)	0.0408(15)	0.0043(11)	-0.0115(15)	-0.0015(15)
C35	0.032(2)	0.040(2)	0.051(2)	0.0013(15)	-0.0067(14)	0.0042(14)
C36	0.039(2)	0.035(2)	0.0344(15)	-0.0060(11)	-0.0040(12)	0.0060(14)
C37	0.052(2)	0.050(3)	0.058(2)	0.013(2)	-0.022(2)	-0.023(2)
C38	0.089(4)	0.061(4)	0.049(2)	0.010(2)	-0.015(2)	-0.038(3)
C39	0.072(3)	0.035(2)	0.037(2)	0.0038(13)	0.005(2)	-0.010(2)
C40	0.065(3)	0.046(2)	0.0273(14)	0.0052(13)	0.0030(15)	-0.017(2)

5.2.31  $[(\text{Ph}_2\text{P})_2\text{N}]\text{Sm}(\text{C}_8\text{H}_8)(\text{THF})_2$  (15b)

Summenformel	$\text{C}_{40}\text{H}_{44}\text{NO}_2\text{P}_2\text{Sm}$
Molare Masse [ $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ]	783.05
Raumgruppe	$P2_12_1$ (No. 19)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1052.02(7), 1119.34(7), 3015.6(3)
Volumen [ $10^6 \text{ pm}^3$ ]	3551.1(5)
Röntgenographische Dichte [ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ]	1.465
Messgerät	Stoe IPDS I
Strahlungsquelle	Ag- $\text{K}\alpha$ ( $\lambda = 56.087 \text{ pm}$ )
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	keine
Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]	0.954
Gemessene Reflexe	13446
Unabhängige Reflexe	5570 [ $R_{\text{int}} = 0.0500$ ]
Beobachtete Reflexe [ $I > 2\sigma(I)$ ]	5274
Daten / Parameter	5570 / 407
$R_1$ ; $wR_2$	0.0346; 0.0993

Atom	x	y	z	$U_{\text{eq/iso}}$
Sm	0.33008(2)	0.63661(2)	0.905330(10)	0.02330(9)
P1	0.34395(12)	0.53281(12)	0.81714(5)	0.0248(3)
P2	0.30536(12)	0.30268(14)	0.86359(6)	0.0269(3)
N	0.3206(4)	0.4536(4)	0.86269(17)	0.0251(9)
O1	0.5333(3)	0.7347(4)	0.87361(18)	0.0337(10)
O2	0.5139(3)	0.5432(4)	0.94206(16)	0.0305(9)
C1A	0.1047(10)	0.6068(9)	0.9455(5)	0.027(2)
C1B	0.0815(14)	0.644(2)	0.9194(9)	0.031(4)
C2A	0.0746(10)	0.6572(13)	0.9048(6)	0.036(3)
C2B	0.1015(15)	0.7230(18)	0.8897(7)	0.032(3)
C3A	0.1256(10)	0.7607(12)	0.8799(4)	0.030(2)
C3B	0.1838(17)	0.8168(17)	0.8824(6)	0.030(3)
C4A	0.2204(11)	0.8451(11)	0.8886(4)	0.030(2)
C4B	0.2805(17)	0.8672(16)	0.9076(9)	0.037(4)
C5A	0.3066(9)	0.8686(10)	0.9241(5)	0.029(2)
C5B	0.3407(14)	0.8403(17)	0.9500(8)	0.033(4)
C6A	0.3342(10)	0.8131(12)	0.9651(5)	0.032(2)
C6B	0.3177(16)	0.7466(17)	0.9843(6)	0.033(4)
C7A	0.2841(12)	0.7120(13)	0.9883(4)	0.035(3)
C7B	0.2310(17)	0.6536(17)	0.9853(6)	0.028(3)
C8A	0.1903(13)	0.6274(10)	0.9782(4)	0.030(2)
C8B	0.1365(17)	0.6118(13)	0.9606(7)	0.023(3)
C9	0.2259(5)	0.4959(5)	0.7747(2)	0.0288(12)
C10	0.1461(5)	0.5857(7)	0.7606(2)	0.0396(15)
C11	0.0585(6)	0.5632(9)	0.7272(3)	0.059(2)
C12	0.0492(6)	0.4523(9)	0.7086(3)	0.058(2)
C13	0.1262(7)	0.3610(8)	0.7235(3)	0.053(2)

Atom	x	y	z	$U_{eq/iso}$
C14	0.2156(6)	0.3834(7)	0.7569(3)	0.043(2)
C15	0.4882(5)	0.4858(6)	0.7881(2)	0.0330(13)
C16	0.5299(6)	0.5576(7)	0.7535(3)	0.042(2)
C17	0.6437(7)	0.5313(8)	0.7312(4)	0.063(2)
C18	0.7155(7)	0.4332(9)	0.7449(4)	0.063(3)
C19	0.6741(5)	0.3640(8)	0.7777(3)	0.054(2)
C20	0.5618(5)	0.3899(6)	0.8004(2)	0.0385(15)
C21	0.3608(4)	0.2662(5)	0.9192(2)	0.0259(12)
C22	0.4586(5)	0.1824(5)	0.9240(3)	0.042(2)
C23	0.5042(6)	0.1535(6)	0.9660(3)	0.045(2)
C24	0.4549(5)	0.2044(6)	1.0026(3)	0.042(2)
C25	0.3571(5)	0.2867(6)	0.9987(3)	0.0357(14)
C26	0.3113(5)	0.3164(5)	0.9570(2)	0.0320(14)
C27	0.1349(5)	0.2754(5)	0.8716(2)	0.0290(12)
C28	0.0980(6)	0.1623(6)	0.8873(3)	0.040(2)
C29	-0.0301(6)	0.1339(8)	0.8895(3)	0.050(2)
C30	-0.1204(6)	0.2153(8)	0.8780(3)	0.055(2)
C31	-0.0852(6)	0.3270(8)	0.8622(3)	0.052(2)
C32	0.0427(5)	0.3576(7)	0.8596(2)	0.0363(14)
C33	0.5493(5)	0.5422(6)	0.9888(3)	0.040(17)
C34	0.6601(5)	0.4573(5)	0.9919(2)	0.0363(2)
C35	0.7239(5)	0.4736(6)	0.9476(3)	0.0377(15)
C36	0.6110(5)	0.4818(5)	0.9160(3)	0.0337(15)
C37	0.6368(7)	0.7748(7)	0.9023(4)	0.057(2)
C38	0.6759(10)	0.8946(8)	0.8857(3)	0.065(2)
C39	0.5945(7)	0.9203(7)	0.8455(3)	0.051(2)
C40	0.5427(7)	0.7996(7)	0.8338(3)	0.045(2)

Atom	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{23}$	$U_{13}$	$U_{12}$
Sm	0.02517(12)	0.01939(13)	0.02534(15)	-0.00220(12)	0.00095(10)	0.00302(9)
P1	0.0259(5)	0.0256(6)	0.0228(8)	0.0001(6)	-0.0016(5)	-0.0017(5)
P2	0.0305(6)	0.0199(6)	0.0301(9)	-0.0039(6)	0.0028(5)	-0.0004(5)
N	0.028(2)	0.027(2)	0.021(3)	-0.006(2)	-0.002(2)	0.001(2)
O1	0.037(2)	0.028(2)	0.035(3)	0.003(2)	-0.002(2)	-0.0078(14)
O2	0.029(2)	0.028(2)	0.034(3)	-0.001(2)	-0.005(2)	0.0032(14)
C9	0.028(2)	0.038(3)	0.020(3)	0.000(3)	-0.004(2)	-0.007(2)
C10	0.037(3)	0.052(4)	0.029(4)	-0.006(3)	-0.006(2)	-0.001(3)
C11	0.038(3)	0.093(7)	0.046(6)	0.003(5)	-0.014(3)	0.004(3)
C12	0.037(3)	0.092(7)	0.044(5)	-0.006(5)	-0.010(3)	-0.015(3)
C13	0.061(4)	0.058(4)	0.040(5)	-0.004(4)	-0.007(3)	-0.026(3)
C14	0.049(3)	0.046(4)	0.034(4)	0.000(3)	-0.002(3)	-0.010(3)
C15	0.030(2)	0.039(3)	0.030(4)	-0.008(3)	-0.001(2)	-0.008(2)
C16	0.053(4)	0.047(4)	0.026(4)	-0.004(3)	0.007(3)	-0.014(3)
C17	0.061(4)	0.071(5)	0.058(6)	-0.009(5)	0.023(4)	-0.032(4)
C18	0.038(3)	0.083(6)	0.067(7)	-0.023(5)	0.016(3)	-0.015(4)
C19	0.029(2)	0.077(5)	0.055(5)	-0.014(4)	-0.002(3)	0.011(4)
C20	0.034(2)	0.049(4)	0.033(4)	-0.002(3)	0.003(2)	0.005(2)
C21	0.030(2)	0.017(2)	0.031(4)	0.003(2)	-0.000(2)	-0.003(2)
C22	0.035(3)	0.014(3)	0.078(7)	-0.006(3)	0.002(3)	0.005(2)
C23	0.035(3)	0.032(3)	0.068(6)	0.020(3)	-0.010(3)	0.004(2)

Atom	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
C24	0.038(3)	0.037(4)	0.049(5)	0.013(3)	-0.008(3)	-0.010(2)
C25	0.035(3)	0.036(3)	0.035(4)	0.005(3)	0.000(2)	-0.006(2)
C26	0.029(2)	0.022(3)	0.044(4)	0.002(3)	0.001(2)	-0.001(2)
C27	0.034(2)	0.028(3)	0.025(3)	-0.010(3)	-0.003(2)	-0.005(2)
C28	0.046(3)	0.032(4)	0.042(5)	-0.002(3)	0.001(3)	-0.013(2)
C29	0.048(3)	0.049(4)	0.054(5)	-0.011(4)	0.005(3)	-0.023(3)
C30	0.037(3)	0.074(6)	0.054(6)	-0.014(5)	0.006(3)	-0.026(3)
C31	0.032(3)	0.062(5)	0.060(6)	-0.006(4)	-0.008(3)	0.000(3)
C32	0.035(2)	0.034(3)	0.040(4)	0.003(3)	0.003(2)	-0.001(2)
C33	0.034(3)	0.028(3)	0.059(6)	0.005(3)	-0.011(3)	-0.003(2)
C34	0.038(3)	0.029(3)	0.042(4)	0.006(3)	-0.015(3)	-0.001(2)
C35	0.030(2)	0.041(3)	0.042(5)	0.001(3)	-0.006(2)	0.002(2)
C36	0.033(2)	0.025(3)	0.043(5)	-0.003(3)	-0.006(2)	0.002(2)
C37	0.056(4)	0.057(4)	0.059(6)	0.006(5)	-0.021(4)	-0.025(3)
C38	0.090(5)	0.052(5)	0.052(6)	0.005(4)	-0.021(4)	-0.038(4)
C39	0.071(4)	0.037(4)	0.046(6)	0.000(4)	0.013(4)	-0.014(3)
C40	0.059(4)	0.040(4)	0.035(5)	0.001(3)	0.000(3)	-0.014(3)

### 5.2.32 $[(\text{Ph}_2\text{P})_2\text{N}]_2\text{YbCl}(\text{THF})_2$ (16)

Summenformel	$\text{C}_{56}\text{H}_{56}\text{ClN}_2\text{O}_2\text{P}_4\text{Yb}$
Molare Masse [ $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ]	1121.40
Raumgruppe	$P2_1$ (No. 4:b)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1506.4(3), 1267.2(3), 1506.9(3)
$\beta$ [°]	95.42(3)
Volumen [ $10^6 \text{ pm}^3$ ]	2863.8(10)
Röntgenographische Dichte [ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ]	1.300
Messgerät	Stoe IPDS I
Strahlungsquelle	Ag-K $_{\alpha}$ ( $\lambda = 56.087 \text{ pm}$ )
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	keine
Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]	0.983
Gemessene Reflexe	19786
Unabhängige Reflexe	13099 [ $R_{\text{int}} = 0.0441$ ]
Beobachtete Reflexe [ $I > 2\sigma(I)$ ]	10791
Daten / Parameter	13099 / 315
$R_1$ ; $wR_2$	0.0846; 0.2546

Atom	x	y	z	U <sub>eq/iso</sub>
Yb	0.16174(2)	0.2483	0.16172(2)	0.02361(13)
Cl	0.0372(2)	0.2485(7)	0.0371(2)	0.0633(11)
P1	0.1782(2)	0.2101(3)	0.3480(2)	0.0348(7)
P2	0.0033(2)	0.3061(3)	0.3477(2)	0.0366(7)
P3	0.3478(2)	0.3071(3)	0.0041(3)	0.0372(7)
P4	0.3480(2)	0.2101(3)	0.1782(2)	0.0356(7)

Atom	x	y	z	U <sub>eq/iso</sub>
N1	0.0872(6)	0.2402(14)	0.2908(6)	0.043(3)
N2	0.2881(6)	0.252(2)	0.0884(6)	0.044(3)
O1	0.1497(9)	0.0668(13)	0.1539(8)	0.043(4)
O2	0.1578(9)	0.431(2)	0.1526(11)	0.061(6)
C1	0.1480(11)	0.0962(14)	0.4124(12)	0.050(4)
C2	0.2032(14)	0.060(2)	0.4840(15)	0.063(5)
C3	0.185(2)	-0.044(2)	0.526(2)	0.084(7)
C4	0.110(2)	-0.095(2)	0.494(2)	0.081(6)
C5	0.048(2)	-0.052(2)	0.421(2)	0.080(6)
C6	0.0681(14)	0.041(2)	0.3808(15)	0.062(5)
C7	0.2215(10)	0.3007(13)	0.4357(10)	0.043(3)
C8	0.1716(13)	0.314(2)	0.5085(13)	0.056(4)
C9	0.200(2)	0.396(2)	0.573(2)	0.074(6)
C10	0.2718(14)	0.469(2)	0.5469(15)	0.067(5)
C11	0.320(2)	0.457(2)	0.472(2)	0.082(6)
C12	0.2889(13)	0.370(2)	0.4126(15)	0.061(4)
C13	-0.0973(6)	0.2565(14)	0.2881(7)	0.031(2)
C14	-0.0946(14)	0.185(2)	0.2209(14)	0.066(5)
C15	-0.1791(15)	0.136(2)	0.185(2)	0.072(5)
C16	-0.256(2)	0.169(2)	0.222(2)	0.077(6)
C17	-0.2585(12)	0.252(3)	0.2933(12)	0.068(4)
C18	-0.1759(12)	0.2795(14)	0.3268(13)	0.057(4)
C19	-0.0008(10)	0.4448(13)	0.3247(10)	0.042(3)
C20	0.0357(13)	0.515(2)	0.3851(14)	0.056(4)
C21	0.034(2)	0.625(2)	0.373(2)	0.072(5)
C22	-0.0061(14)	0.669(2)	0.2995(15)	0.065(5)
C23	-0.053(2)	0.603(2)	0.235(2)	0.091(7)
C24	-0.0477(12)	0.4936(15)	0.2427(13)	0.053(4)
C25	0.4106(12)	0.0966(15)	0.1481(13)	0.054(4)
C26	0.3813(12)	0.0418(15)	0.0712(13)	0.054(4)
C27	0.418(2)	-0.049(2)	0.047(2)	0.089(7)
C28	0.490(2)	-0.095(3)	0.113(2)	0.106(10)
C29	0.521(2)	-0.044(2)	0.186(2)	0.086(7)
C30	0.484(2)	0.060(2)	0.204(2)	0.074(6)
C31	0.4380(10)	0.3028(14)	0.2203(11)	0.046(3)
C32	0.5102(13)	0.313(2)	0.1694(14)	0.060(4)
C33	0.573(2)	0.397(2)	0.201(2)	0.072(5)
C34	0.5428(14)	0.470(2)	0.2754(14)	0.062(4)
C35	0.469(2)	0.458(2)	0.317(2)	0.075(6)
C36	0.4143(13)	0.368(2)	0.2878(14)	0.059(4)
C37	0.2885(7)	0.245(2)	-0.0984(7)	0.036(2)
C38	0.2219(14)	0.184(2)	-0.0990(15)	0.067(5)
C39	0.188(2)	0.139(2)	-0.184(2)	0.078(6)
C40	0.2271(15)	0.171(2)	-0.259(2)	0.071(5)
C41	0.2932(12)	0.252(3)	-0.2581(13)	0.070(4)
C42	0.3291(12)	0.2776(14)	-0.1774(12)	0.054(4)
C43	0.3256(9)	0.4471(12)	-0.0016(9)	0.036(3)
C44	0.2456(12)	0.493(2)	-0.0515(13)	0.054(4)
C45	0.237(2)	0.601(2)	-0.053(2)	0.073(6)
C46	0.3030(15)	0.666(2)	-0.009(2)	0.070(5)
C47	0.3724(15)	0.627(2)	0.032(2)	0.072(5)



Atom	x	y	z	U <sub>eq/iso</sub>
C48	0.3824(13)	0.515(2)	0.0364(13)	0.055(4)
C49	0.2128(13)	-0.0037(14)	0.2085(13)	0.041(4)
C50	0.198(2)	-0.119(2)	0.185(2)	0.069(5)
C51	0.165(3)	-0.124(3)	0.097(3)	0.129(13)
C52	0.110(2)	0.000(2)	0.081(2)	0.078(6)
C53	0.073(2)	0.495(2)	0.114(2)	0.082(7)
C54	0.081(3)	0.590(3)	0.154(3)	0.126(12)
C55	0.171(2)	0.611(3)	0.197(3)	0.099(9)
C56	0.197(2)	0.503(2)	0.205(2)	0.071(7)

Atom	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
Yb	0.0253(2)	0.0214(2)	0.0240(2)	-0.0009(3)	0.00169(12)	-0.0014(3)
Cl	0.0449(15)	0.098(3)	0.0439(15)	0.005(4)	-0.0121(13)	-0.023(3)
P1	0.041(2)	0.035(2)	0.0283(14)	0.0034(11)	0.0032(13)	0.0041(12)
P2	0.048(2)	0.027(2)	0.037(2)	0.0061(12)	0.0152(14)	0.0085(13)
P3	0.038(2)	0.027(2)	0.048(2)	0.0063(13)	0.0116(14)	0.0051(12)
P4	0.0306(14)	0.035(2)	0.041(2)	0.0046(12)	0.0036(13)	0.0036(11)
N1	0.036(4)	0.068(9)	0.025(4)	-0.033(7)	0.001(4)	0.020(7)
N2	0.034(4)	0.073(8)	0.024(4)	0.005(8)	0.007(3)	-0.034(8)
O1	0.053(7)	0.025(9)	0.049(8)	-0.004(5)	-0.003(6)	-0.025(5)
O2	0.065(11)	0.027(10)	0.085(13)	0.024(7)	-0.021(9)	-0.013(6)

### 5.2.33 [ $\{(\text{Ph}_2\text{P})_2\text{N}\}_2\text{Sm}(\text{C}_5\text{H}_5)\text{THF}\}$ ] (17)

Summenformel	$\text{C}_{57}\text{H}_{53}\text{N}_2\text{OP}_4\text{Sm}$
Molare Masse [ $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ]	1056.24
Raumgruppe	$C_C$ (No. 9:b1)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1084.4(2), 4383.8(9), 1086.3(2)
$\beta$ [°]	104.74(3)
Volumen [ $10^6 \text{ pm}^3$ ]	4993.9(17)
Röntgenographische Dichte [ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ]	1.405
Messgerät	Stoe IPDS I
Strahlungsquelle	Ag- $K_\alpha$ ( $\lambda = 56.087 \text{ pm}$ )
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	keine
Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]	0.721
Gemessene Reflexe	12201
Unabhängige Reflexe	6366 [ $R_{\text{int}} = 0.0505$ ]
Beobachtete Reflexe [ $I > 2\sigma(I)$ ]	5846
Daten / Parameter	6366 / 422
$R_1$ ; $wR_2$	0.0515; 0.1367

Atom	x	y	z	U <sub>eq/iso</sub>
Sm	0.25258(4)	0.362808(6)	0.25088(4)	0.02673(12)
P1	0.4296(3)	0.34877(4)	0.4885(2)	0.0279(5)
P2	0.5390(3)	0.30293(4)	0.3525(2)	0.0290(5)
P3	0.4058(3)	0.41740(4)	0.2571(2)	0.0293(5)
P4	0.1813(3)	0.44855(4)	0.3042(2)	0.0319(5)
N1	0.4282(9)	0.33091(13)	0.3543(7)	0.0305(17)
N2	0.2611(8)	0.41667(13)	0.2831(7)	0.0283(19)
O	0.1074(9)	0.33673(14)	0.3582(8)	0.048(2)
C1	0.4001(12)	0.32253(18)	0.6082(10)	0.039(2)
C2	0.2962(15)	0.3278(3)	0.6581(13)	0.054(3)
C3	0.267(2)	0.3079(2)	0.749(2)	0.067(3)
C4	0.3445(17)	0.2831(3)	0.7891(14)	0.061(3)
C5	0.4482(16)	0.2782(3)	0.7420(14)	0.058(3)
C6	0.4763(15)	0.2968(2)	0.6519(12)	0.053(3)
C7	0.5906(11)	0.36252(15)	0.5679(9)	0.034(2)
C8	0.6287(14)	0.36480(19)	0.7000(11)	0.047(3)
C9	0.743(2)	0.3776(2)	0.7593(19)	0.060(3)
C10	0.8221(16)	0.3882(2)	0.6871(13)	0.056(3)
C11	0.7867(15)	0.3870(2)	0.5587(12)	0.052(3)
C12	0.6668(12)	0.3740(2)	0.4959(11)	0.041(2)
C13	0.4439(11)	0.26813(18)	0.2919(10)	0.036(2)
C14	0.3730(14)	0.2656(2)	0.1686(12)	0.053(3)
C15	0.3123(17)	0.2383(3)	0.1236(15)	0.060(3)
C16	0.3326(14)	0.2131(2)	0.2033(11)	0.046(2)
C17	0.4054(15)	0.2146(2)	0.3189(12)	0.052(3)
C18	0.4680(16)	0.2422(2)	0.3660(13)	0.062(4)
C19	0.5948(10)	0.31099(18)	0.2087(9)	0.032(2)
C20	0.6532(14)	0.2876(2)	0.1615(12)	0.049(3)
C21	0.7051(17)	0.2930(3)	0.0595(14)	0.060(3)
C22	0.7011(16)	0.3219(2)	0.0025(13)	0.056(3)
C23	0.6429(14)	0.3453(2)	0.0550(12)	0.048(2)
C24	0.5914(12)	0.3398(2)	0.1580(11)	0.041(2)
C25	0.5072(12)	0.44143(19)	0.3774(12)	0.035(2)
C26	0.6042(14)	0.4600(2)	0.3490(12)	0.050(3)
C27	0.6879(17)	0.4766(3)	0.4433(15)	0.062(3)
C28	0.6768(18)	0.4745(3)	0.5666(15)	0.065(3)
C29	0.5855(16)	0.4565(3)	0.5964(14)	0.060(3)
C30	0.5008(12)	0.4399(2)	0.5022(13)	0.046(3)
C31	0.4050(11)	0.43748(18)	0.1108(11)	0.034(2)
C32	0.4397(14)	0.4217(2)	0.0136(11)	0.046(3)
C33	0.4392(16)	0.4347(2)	-0.1008(13)	0.056(3)
C34	0.3986(18)	0.4642(3)	-0.1290(15)	0.061(3)
C35	0.3648(16)	0.4808(3)	-0.0336(13)	0.057(3)
C36	0.3631(13)	0.4682(2)	0.0833(12)	0.047(3)
C37	0.1425(11)	0.44282(19)	0.4537(11)	0.036(2)
C38	0.0797(14)	0.4665(2)	0.5053(12)	0.050(3)
C39	0.0565(18)	0.4648(3)	0.6209(15)	0.060(3)
C40	0.0964(16)	0.4399(2)	0.7003(14)	0.056(3)
C41	0.1528(15)	0.4160(2)	0.6521(12)	0.052(3)
C42	0.1779(14)	0.4174(2)	0.5332(11)	0.044(3)
C43	0.0227(12)	0.4430(2)	0.1928(11)	0.038(2)

Atom	x	y	z	U <sub>eq/iso</sub>
C44	-0.0887(14)	0.4325(3)	0.2252(14)	0.054(3)
C45	-0.197(2)	0.4301(3)	0.1329(17)	0.079(4)
C46	-0.2076(19)	0.4378(3)	0.0095(16)	0.069(4)
C47	-0.1036(19)	0.4482(3)	-0.0223(16)	0.068(3)
C48	0.0125(13)	0.4510(2)	0.0677(12)	0.046(3)
C49	0.1619(17)	0.3271(3)	0.0439(14)	0.059(3)
C50	0.232(3)	0.3501(5)	0.004(2)	0.115(7)
C51	0.1620(17)	0.3766(3)	-0.0002(14)	0.064(3)
C52	0.0551(18)	0.3705(3)	0.0364(15)	0.064(3)
C53	0.0535(16)	0.3406(3)	0.0656(14)	0.056(3)
C54	0.1038(15)	0.3045(2)	0.3665(13)	0.052(3)
C55	-0.003(2)	0.2960(3)	0.4242(17)	0.077(4)
C56	-0.065(3)	0.3247(4)	0.443(2)	0.097(6)
C57	-0.0090(19)	0.3477(3)	0.3768(15)	0.065(3)

Atom	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
Sm	0.0260(2)	0.02214(15)	0.0289(2)	-0.00150(19)	0.00122(14)	-0.0015(2)
P1	0.0335(15)	0.0271(9)	0.0216(12)	0.0014(7)	0.0040(10)	0.0013(8)
P2	0.0282(15)	0.0281(9)	0.0285(12)	0.0032(7)	0.0027(10)	0.0039(8)
P3	0.0289(15)	0.0248(8)	0.0336(13)	0.0010(7)	0.0071(10)	-0.0010(7)
P4	0.0287(15)	0.0245(8)	0.0417(14)	-0.0033(7)	0.0074(11)	0.0009(8)
N1	0.033(5)	0.024(3)	0.034(4)	0.005(2)	0.008(4)	0.003(3)
N2	0.020(5)	0.024(3)	0.034(5)	0.001(2)	-0.004(4)	-0.001(3)
O	0.042(6)	0.044(3)	0.065(6)	-0.006(3)	0.026(4)	-0.011(3)
C1	0.048(8)	0.037(4)	0.027(5)	-0.002(3)	0.001(5)	-0.004(4)
C2	0.055(10)	0.062(6)	0.051(8)	-0.001(5)	0.023(7)	-0.001(5)
C6	0.061(10)	0.046(5)	0.054(8)	0.019(4)	0.019(6)	0.009(5)
C7	0.042(7)	0.023(3)	0.037(5)	0.003(3)	0.005(4)	0.002(3)
C8	0.063(10)	0.041(4)	0.034(6)	-0.002(3)	0.006(5)	-0.020(4)
C12	0.040(7)	0.047(4)	0.034(6)	0.001(4)	0.008(5)	0.005(4)
C13	0.036(7)	0.032(4)	0.041(6)	0.001(3)	0.013(5)	0.008(3)
C14	0.055(9)	0.039(4)	0.057(8)	0.007(4)	-0.003(6)	0.008(4)
C18	0.074(11)	0.041(5)	0.059(8)	0.016(4)	-0.004(7)	-0.021(5)
C19	0.022(6)	0.044(4)	0.022(5)	0.000(3)	-0.007(4)	0.002(3)
C20	0.048(9)	0.045(5)	0.060(8)	0.008(4)	0.024(6)	0.013(4)
C24	0.036(7)	0.040(4)	0.049(7)	0.005(4)	0.015(5)	0.004(4)
C25	0.036(7)	0.031(4)	0.042(7)	-0.002(4)	0.016(5)	-0.001(4)
C26	0.048(9)	0.062(6)	0.039(7)	-0.005(4)	0.009(6)	-0.014(5)
C30	0.031(7)	0.042(5)	0.063(8)	-0.004(4)	0.007(6)	-0.001(4)
C31	0.024(6)	0.032(4)	0.043(6)	0.004(3)	0.002(5)	-0.002(3)
C32	0.050(9)	0.049(5)	0.041(7)	0.005(4)	0.015(6)	0.005(4)
C36	0.042(8)	0.037(4)	0.064(8)	0.014(4)	0.018(6)	-0.003(4)
C37	0.027(6)	0.033(4)	0.051(7)	-0.013(4)	0.014(5)	0.002(3)
C38	0.054(9)	0.040(4)	0.058(8)	-0.009(4)	0.020(6)	0.005(4)
C42	0.052(9)	0.049(5)	0.035(6)	-0.005(4)	0.017(6)	-0.003(4)
C43	0.037(7)	0.035(4)	0.044(7)	-0.010(4)	0.012(5)	0.007(4)
C44	0.037(8)	0.061(6)	0.065(9)	-0.019(5)	0.016(7)	-0.001(5)
C48	0.040(8)	0.043(5)	0.045(7)	0.001(4)	-0.007(5)	0.012(4)

5.2.34 [ $\{(\text{Ph}_2\text{P})_2\text{N}\}_2\text{Yb}(\text{C}_5\text{Me}_5)$ ] (18)

Summenformel	$\text{C}_{58}\text{H}_{55}\text{N}_2\text{P}_4\text{Yb}$
Molare Masse [ $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ]	1076.96
Raumgruppe	$P2_1/c$ (No. 14:b1)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1091.6(2), 2128.8(4), 2160.8(4)
$\beta$ [°]	93.33(3)
Volumen [ $10^6 \text{ pm}^3$ ]	5013(2)
Röntgenographische Dichte [ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ]	1.427
Messgerät	Stoe IPDS II
Strahlungsquelle	Mo- $\text{K}_\alpha$ ( $\lambda = 71.073 \text{ pm}$ )
Meßtemperatur [K]	173(2)
Absorptionskorrektur	keine
Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]	2.033
Gemessene Reflexe	36499
Unabhängige Reflexe	9994 [ $R_{\text{int}} = 0.0510$ ]
Beobachtete Reflexe [ $I > 2\sigma(I)$ ]	9262
Daten / Parameter	9994 / 591
$R_1; wR_2$	0.0226; 0.0708

Atom	x	y	z	$U_{\text{eq/iso}}$
Yb	0.252521(9)	0.824952(4)	0.520828(4)	0.01204(4)
P1	0.22698(6)	0.80494(3)	0.69615(3)	0.01350(12)
P2	0.04887(6)	0.79828(3)	0.58810(3)	0.01374(12)
P3	0.18577(6)	0.71700(3)	0.38476(3)	0.01350(12)
P4	0.37371(6)	0.71785(3)	0.49415(3)	0.01332(12)
N1	0.1905(2)	0.81325(9)	0.61787(10)	0.0145(4)
N2	0.2455(2)	0.74201(9)	0.45609(10)	0.0143(4)
C1	0.3801(2)	0.76926(11)	0.69625(12)	0.0162(5)
C2	0.4734(2)	0.79188(12)	0.66037(13)	0.0209(5)
C3	0.5872(3)	0.76228(14)	0.66162(14)	0.0244(6)
C4	0.6091(3)	0.70992(15)	0.69854(14)	0.0284(6)
C5	0.5167(3)	0.68682(15)	0.73403(14)	0.0286(6)
C6	0.4030(3)	0.71635(13)	0.73303(12)	0.0211(5)
C7	0.2665(2)	0.88515(11)	0.72181(12)	0.0181(5)
C8	0.3649(3)	0.89746(13)	0.76332(14)	0.0270(6)
C9	0.3833(3)	0.95745(15)	0.78844(16)	0.0346(7)
C10	0.3025(3)	1.00560(14)	0.77109(16)	0.0338(7)
C11	0.2034(3)	0.99376(13)	0.73030(15)	0.0303(7)
C12	0.1841(3)	0.93379(12)	0.70570(13)	0.0215(5)
C13	0.0027(2)	0.71892(11)	0.60949(11)	0.0161(5)
C14	-0.1198(2)	0.70063(12)	0.59815(12)	0.0190(5)
C15	-0.1572(2)	0.63974(12)	0.61064(13)	0.0208(5)
C16	-0.0712(3)	0.59629(12)	0.63561(13)	0.0222(5)
C17	0.0503(3)	0.61381(12)	0.64582(13)	0.0225(5)
C18	0.0874(3)	0.67465(11)	0.63232(13)	0.0181(5)

Atom	x	y	z	$U_{eq/iso}$
C19	-0.0684(2)	0.84349(11)	0.62593(12)	0.0155(5)
C20	-0.0930(2)	0.83487(12)	0.68838(12)	0.0182(5)
C21	-0.1823(3)	0.87087(13)	0.71492(13)	0.0236(6)
C22	-0.2492(3)	0.91476(13)	0.67987(15)	0.0263(6)
C23	-0.2274(2)	0.92300(12)	0.61746(15)	0.0240(6)
C24	-0.1364(2)	0.88763(12)	0.59093(13)	0.0199(5)
C25	0.0526(2)	0.76989(11)	0.37104(12)	0.0150(5)
C26	-0.0311(2)	0.78183(11)	0.41655(12)	0.0184(5)
C27	-0.1341(3)	0.81876(12)	0.40323(14)	0.0223(6)
C28	-0.1564(3)	0.84350(13)	0.34437(14)	0.0237(5)
C29	-0.0754(3)	0.83132(12)	0.29838(14)	0.0236(6)
C30	0.0294(2)	0.79486(12)	0.31225(12)	0.0194(5)
C31	0.0930(2)	0.64745(11)	0.40107(12)	0.0153(5)
C32	0.0497(2)	0.61273(11)	0.34950(12)	0.0169(5)
C33	-0.0271(3)	0.56108(12)	0.35654(13)	0.0215(5)
C34	-0.0585(3)	0.54335(12)	0.41532(14)	0.0226(6)
C35	-0.0141(2)	0.57692(12)	0.46673(13)	0.0199(5)
C36	0.0614(2)	0.62922(11)	0.45985(12)	0.0168(5)
C37	0.5053(2)	0.70599(11)	0.44639(12)	0.0168(5)
C38	0.5066(2)	0.71289(12)	0.38253(13)	0.0208(5)
C39	0.6143(3)	0.70047(14)	0.35214(13)	0.0242(6)
C40	0.7194(3)	0.68149(13)	0.38490(14)	0.0231(6)
C41	0.7200(3)	0.67533(13)	0.44894(15)	0.0249(6)
C42	0.6143(3)	0.68765(13)	0.47932(13)	0.0229(5)
C43	0.3633(2)	0.63694(11)	0.52264(12)	0.0168(5)
C44	0.3482(3)	0.58590(12)	0.48183(14)	0.0230(5)
C45	0.3478(3)	0.52517(13)	0.5053(2)	0.0297(6)
C46	0.3648(3)	0.51464(13)	0.5687(2)	0.0323(7)
C47	0.3809(3)	0.56512(14)	0.60899(15)	0.0305(7)
C48	0.3804(3)	0.62616(13)	0.58588(14)	0.0229(5)
C49	0.4266(2)	0.89834(11)	0.48521(12)	0.0175(5)
C50	0.3728(2)	0.93143(11)	0.53450(12)	0.0161(5)
C51	0.2503(2)	0.94633(11)	0.51385(12)	0.0164(5)
C52	0.2291(2)	0.92323(11)	0.45265(12)	0.0176(5)
C53	0.3387(2)	0.89448(11)	0.43448(12)	0.0164(5)
C54	0.5593(2)	0.87768(12)	0.48525(13)	0.0220(5)
C55	0.4392(2)	0.95470(12)	0.59265(13)	0.0204(5)
C56	0.1609(2)	0.98547(11)	0.54750(12)	0.0194(5)
C57	0.1118(3)	0.93117(12)	0.41221(13)	0.0207(5)
C58	0.3599(3)	0.86969(13)	0.37072(12)	0.0238(6)

Atom	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{23}$	$U_{13}$	$U_{12}$
Yb	0.01375(7)	0.00931(6)	0.01327(6)	0.00043(3)	0.00254(4)	0.00011(3)
P1	0.0141(3)	0.0133(3)	0.0131(3)	0.0006(2)	0.0004(2)	0.0002(2)
P2	0.0135(3)	0.0147(3)	0.0130(3)	0.0008(2)	0.0006(2)	0.0003(2)
P3	0.0137(3)	0.0131(3)	0.0137(3)	-0.0009(2)	-0.0001(2)	0.0001(2)
P4	0.0134(3)	0.0122(3)	0.0141(3)	-0.0006(2)	-0.0006(2)	0.0019(2)
N1	0.0136(10)	0.0150(9)	0.0148(10)	-0.0001(7)	-0.0008(8)	-0.0007(7)
N2	0.0152(10)	0.0123(9)	0.0149(10)	-0.0005(7)	-0.0024(8)	0.0020(7)
C1	0.0166(12)	0.0168(11)	0.0152(11)	-0.0036(9)	-0.0003(10)	-0.0002(9)

Atom	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
C2	0.0213(13)	0.0170(11)	0.0249(13)	-0.0017(10)	0.0050(11)	-0.0016(9)
C3	0.0157(12)	0.0337(14)	0.0239(13)	-0.0055(11)	0.0025(11)	-0.0017(10)
C4	0.0209(13)	0.0405(16)	0.0233(14)	-0.0059(12)	-0.0026(12)	0.0122(12)
C5	0.031(2)	0.0332(14)	0.0209(14)	0.0051(11)	-0.0017(13)	0.0133(12)
C6	0.0235(13)	0.0259(13)	0.0137(11)	0.0030(10)	-0.0001(11)	0.0047(10)
C7	0.0228(13)	0.0159(11)	0.0161(11)	-0.0026(9)	0.0057(11)	-0.0022(9)
C8	0.0307(15)	0.0205(13)	0.0293(15)	-0.0054(11)	-0.0024(13)	-0.0002(11)
C9	0.040(2)	0.0303(15)	0.032(2)	-0.0120(13)	-0.0095(15)	-0.0082(13)
C10	0.045(2)	0.0215(13)	0.035(2)	-0.0100(12)	0.0060(15)	-0.0070(12)
C11	0.040(2)	0.0169(12)	0.035(2)	0.0002(11)	0.0137(14)	0.0023(11)
C12	0.0244(13)	0.0193(12)	0.0211(12)	0.0006(10)	0.0038(11)	-0.0009(10)
C13	0.0191(12)	0.0145(10)	0.0153(11)	-0.0018(9)	0.0053(10)	-0.0002(9)
C14	0.0171(12)	0.0180(12)	0.0219(12)	-0.0020(9)	0.0007(11)	0.0004(9)
C15	0.0187(12)	0.0211(12)	0.0227(13)	-0.0042(10)	0.0009(11)	-0.0040(9)
C16	0.0284(14)	0.0150(11)	0.0234(13)	-0.0026(9)	0.0032(12)	-0.0022(10)
C17	0.0276(14)	0.0164(12)	0.0232(13)	-0.0012(10)	-0.0020(12)	0.0030(10)
C18	0.0165(12)	0.0179(12)	0.0193(12)	-0.0030(9)	-0.0027(11)	-0.0003(9)
C19	0.0138(11)	0.0142(10)	0.0184(12)	-0.0008(9)	0.0001(10)	-0.0009(9)
C20	0.0169(12)	0.0208(11)	0.0164(12)	0.0009(9)	-0.0027(10)	0.0022(9)
C21	0.0215(13)	0.0293(13)	0.0202(13)	-0.0062(10)	0.0042(11)	-0.0015(10)
C22	0.0188(13)	0.0194(12)	0.041(2)	-0.0085(11)	0.0051(13)	0.0010(10)
C23	0.0164(12)	0.0159(11)	0.039(2)	0.0030(11)	-0.0003(12)	0.0014(9)
C24	0.0184(12)	0.0175(11)	0.0239(13)	0.0043(10)	0.0014(11)	-0.0007(9)
C25	0.0152(11)	0.0128(10)	0.0166(11)	-0.0003(8)	-0.0028(10)	-0.0012(8)
C26	0.0183(12)	0.0164(11)	0.0205(12)	0.0002(9)	0.0008(11)	0.0000(9)
C27	0.0196(13)	0.0192(12)	0.0283(15)	-0.0007(10)	0.0030(12)	0.0009(9)
C28	0.0192(13)	0.0183(12)	0.0328(15)	0.0022(11)	-0.0060(12)	0.0032(10)
C29	0.0258(14)	0.0216(12)	0.0225(13)	0.0069(10)	-0.0062(12)	0.0006(10)
C30	0.0208(12)	0.0183(11)	0.0189(12)	0.0014(9)	-0.0004(11)	-0.0006(9)
C31	0.0143(11)	0.0115(10)	0.0200(12)	-0.0019(9)	0.0011(10)	0.0014(8)
C32	0.0193(12)	0.0168(11)	0.0143(11)	-0.0013(9)	-0.0028(10)	0.0006(9)
C33	0.0243(13)	0.0142(11)	0.0254(13)	-0.0048(10)	-0.0044(11)	-0.0007(9)
C34	0.0214(13)	0.0122(11)	0.0346(15)	0.0009(10)	0.0045(12)	-0.0002(9)
C35	0.0209(12)	0.0161(11)	0.0230(13)	0.0035(9)	0.0044(11)	0.0017(9)
C36	0.0174(12)	0.0153(11)	0.0178(12)	-0.0026(9)	0.0003(10)	0.0013(9)
C37	0.0161(11)	0.0122(10)	0.0223(13)	-0.0024(9)	0.0016(10)	0.0004(8)
C38	0.0161(12)	0.0247(12)	0.0217(13)	-0.0014(10)	0.0008(11)	0.0009(9)
C39	0.0208(13)	0.0323(14)	0.0198(13)	-0.0045(11)	0.0042(11)	-0.0024(11)
C40	0.0158(13)	0.0271(13)	0.0266(15)	-0.0069(10)	0.0019(12)	0.0016(10)
C41	0.0152(13)	0.0323(15)	0.0265(15)	-0.0009(11)	-0.0043(12)	0.0069(10)
C42	0.0183(13)	0.0294(13)	0.0206(13)	-0.0007(11)	-0.0012(11)	0.0038(10)
C43	0.0131(11)	0.0157(11)	0.0212(12)	0.0015(9)	-0.0015(10)	0.0023(8)
C44	0.0207(13)	0.0172(12)	0.0309(14)	-0.0013(10)	-0.0003(12)	0.0025(9)
C45	0.0244(14)	0.0148(12)	0.050(2)	-0.0014(12)	0.0004(14)	0.0008(10)
C46	0.0228(14)	0.0199(13)	0.054(2)	0.0140(13)	0.0025(14)	0.0034(10)
C47	0.0283(15)	0.0303(15)	0.033(2)	0.0146(12)	0.0023(13)	0.0059(12)
C48	0.0197(13)	0.0238(13)	0.0253(14)	0.0031(10)	0.0034(11)	0.0036(10)
C49	0.0181(12)	0.0124(10)	0.0225(12)	0.0017(9)	0.0065(11)	-0.0016(9)
C50	0.0200(12)	0.0124(10)	0.0159(11)	0.0018(9)	0.0000(10)	-0.0013(9)
C51	0.0209(12)	0.0087(10)	0.0202(12)	0.0013(8)	0.0050(11)	-0.0015(8)
C52	0.0217(13)	0.0098(10)	0.0217(12)	0.0022(9)	0.0038(11)	-0.0017(9)

Atom	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
C53	0.0210(12)	0.0117(10)	0.0167(11)	0.0027(8)	0.0016(10)	-0.0019(9)
C54	0.0178(12)	0.0214(12)	0.0270(14)	-0.0001(10)	0.0026(11)	-0.0012(9)
C55	0.0213(13)	0.0163(11)	0.0235(13)	-0.0005(9)	-0.0001(11)	-0.0033(9)
C56	0.0221(13)	0.0150(11)	0.0210(12)	-0.0008(9)	0.0010(11)	0.0030(9)
C57	0.0229(13)	0.0152(11)	0.0231(13)	0.0010(9)	-0.0064(11)	0.0015(9)
C58	0.0322(15)	0.0203(12)	0.0194(13)	-0.0004(10)	0.0076(12)	-0.0024(10)

### 5.2.35 [{(Ph<sub>2</sub>P)<sub>2</sub>N<sub>3</sub>Y] (19a) · Toluol

CCDC-Nummer	186709
Summenformel	C <sub>79</sub> H <sub>68</sub> N <sub>3</sub> P <sub>6</sub> Y
Molare Masse [g•mol <sup>-1</sup> ]	1334.09
Raumgruppe	<i>P</i> $\bar{1}$ (No. 2)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1364.5(7), 1371.5(9), 2082(2)
α, β, γ [°]	91.19(11), 97.83(10), 118.15(6)
Volumen [10 <sup>6</sup> pm <sup>3</sup> ]	3387(5)
Röntgenographische Dichte [g•cm <sup>-3</sup> ]	1.308
Messgerät	Stoe IPDS I
Strahlungsquelle	Ag-K <sub>α</sub> (λ= 56.087 pm)
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	keine
Absorptionskoeffizient [mm <sup>-1</sup> ]	0.573
Gemessene Reflexe	44311
Unabhängige Reflexe	13517 [R <sub>int</sub> = 0.0632]
Beobachtete Reflexe [I>2σ(I)]	10625
Daten / Parameter	13517 / 788
R <sub>1</sub> ; wR <sub>2</sub>	0.0496; 0.1393

5.2.36  $[(\text{Ph}_2\text{P})_2\text{N}]_3\text{La}$  (19b) · Toluol

CCDC-Nummer	186710
Summenformel	$\text{C}_{79}\text{H}_{68}\text{LaN}_3\text{P}_6$
Molare Masse [ $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ]	1384.09
Raumgruppe	$P\bar{1}$ (No. 2)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1377.56(12), 1384.58(12), 2071.53(12)
$\alpha, \beta, \gamma$ [°]	91.307(10), 97.806(10), 118.356(10)
Volumen [ $10^6 \text{ pm}^3$ ]	3427.5(5)
Röntgenographische Dichte [ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ]	1.341
Messgerät	Stoe IPDS I
Strahlungsquelle	Ag- $\text{K}_\alpha$ ( $\lambda = 56.087 \text{ pm}$ )
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	keine
Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]	0.431
Gemessene Reflexe	29222
Unabhängige Reflexe	13900 [ $R_{\text{int}} = 0.0738$ ]
Beobachtete Reflexe [ $I > 2\sigma(I)$ ]	9374
Daten / Parameter	13900 / 783
$R_1; wR_2$	0.0598; 0.1546

5.2.37  $[(\text{Ph}_2\text{P})_2\text{N}]_3\text{Nd}$  (19c) · Toluol

CCDC-Nummer	186711
Summenformel	$\text{C}_{79}\text{H}_{68}\text{N}_3\text{NdP}_6$
Molare Masse [ $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ]	1389.42
Raumgruppe	$P\bar{1}$ (No. 2)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1371.75(2), 1380.9(3), 2082.5(3)
$\alpha, \beta, \gamma$ [°]	90.958(2), 98.076(2), 118.338(2)
Volumen [ $10^6 \text{ pm}^3$ ]	3421.8(9)
Röntgenographische Dichte [ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ]	1.349
Messgerät	Stoe Stadi IV
Strahlungsquelle	Mo- $\text{K}_\alpha$ ( $\lambda = 71.073 \text{ pm}$ )
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	keine
Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]	0.945
Gemessene Reflexe	14336
Unabhängige Reflexe	12055 [ $R_{\text{int}} = 0.0447$ ]
Beobachtete Reflexe [ $I > 2\sigma(I)$ ]	10502
Daten / Parameter	12055 / 793
$R_1; wR_2$	0.0364; 0.0922



5.2.38  $[(\text{Ph}_2\text{P})_2\text{N}]_3\text{Sm}$  (19d) · Toluol

Summenformel	$\text{C}_{79}\text{H}_{68}\text{N}_3\text{P}_6\text{Sm}$
Molare Masse [ $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ]	1395.53
Raumgruppe	$P\bar{1}$ (No. 2)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	13.8002(10), 13.8392(9), 20.8669(13)
$\alpha, \beta, \gamma$ [°]	91.085(8), 97.883(8), 118.235(7)
Volumen [ $10^6 \text{ pm}^3$ ]	3461.8(4)
Röntgenographische Dichte [ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ]	1.339
Messgerät	Stoe IPDS I
Strahlungsquelle	Ag- $\text{K}\alpha$ ( $\lambda = 56.087 \text{ pm}$ )
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	keine
Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]	0.554
Gemessene Reflexe	42345
Unabhängige Reflexe	20744 [ $R_{\text{int}} = 0.0511$ ]
Beobachtete Reflexe [ $I > 2\sigma(I)$ ]	16612
Daten / Parameter	20744 / 791
$R_1; wR_2$	0.0425; 0.1040

Atom	x	y	z	$U_{\text{eq/iso}}$
Sm	0.690170(11)	0.538636(11)	0.724960(7)	0.02234(4)
P1	0.52108(6)	0.32116(6)	0.67332(4)	0.02881(14)
P2	0.46361(7)	0.30062(6)	0.80556(4)	0.03196(15)
P3	0.86378(6)	0.53617(6)	0.66502(4)	0.02962(15)
P4	0.97974(6)	0.57984(7)	0.80305(4)	0.0327(2)
P5	0.62831(6)	0.66048(6)	0.63482(4)	0.02816(14)
P6	0.68257(7)	0.82017(6)	0.74498(4)	0.0333(2)
N1	0.5453(2)	0.3745(2)	0.75065(12)	0.0291(5)
N2	0.8670(2)	0.5535(2)	0.74454(12)	0.0299(5)
N3	0.6625(2)	0.6939(2)	0.71531(12)	0.0286(5)
C1	0.5208(3)	0.1879(2)	0.6695(2)	0.0351(6)
C2	0.4796(3)	0.1225(3)	0.6103(2)	0.0520(9)
C3	0.4826(4)	0.0230(4)	0.6045(3)	0.0686(13)
C4	0.5266(4)	-0.0105(3)	0.6574(3)	0.0645(12)
C5	0.5698(4)	0.0552(3)	0.7154(2)	0.0595(11)
C6	0.5668(3)	0.1545(3)	0.7213(2)	0.0460(8)
C7	0.3771(2)	0.2784(2)	0.63719(15)	0.0335(6)
C8	0.2857(3)	0.1854(3)	0.6536(2)	0.0459(8)
C9	0.1778(3)	0.1615(4)	0.6268(2)	0.0597(11)
C10	0.1604(3)	0.2283(4)	0.5835(2)	0.0628(12)
C11	0.2495(4)	0.3200(4)	0.5674(2)	0.0601(11)
C12	0.3579(3)	0.3454(3)	0.5942(2)	0.0427(7)
C13	0.5601(3)	0.3626(3)	0.88250(15)	0.0347(6)
C14	0.6320(4)	0.3209(4)	0.9034(2)	0.0542(10)
C15	0.7067(4)	0.3631(4)	0.9617(2)	0.0646(12)

Atom	x	y	z	U <sub>eq/iso</sub>
C17	0.6362(3)	0.4856(3)	0.9820(2)	0.0519(9)
C18	0.5637(3)	0.4459(3)	0.9235(2)	0.0443(7)
C19	0.3668(2)	0.3563(3)	0.8104(2)	0.0356(6)
C20	0.2952(3)	0.3172(3)	0.8565(2)	0.0482(9)
C21	0.2135(3)	0.3479(4)	0.8588(2)	0.0630(12)
C22	0.2011(3)	0.4164(4)	0.8164(2)	0.0658(13)
C23	0.2708(3)	0.4562(4)	0.7704(2)	0.0581(11)
C24	0.3533(3)	0.4253(3)	0.7674(2)	0.0424(7)
C25	0.8875(3)	0.4204(3)	0.64753(15)	0.0339(6)
C26	0.9937(3)	0.4280(3)	0.6598(2)	0.0479(9)
C27	1.0051(3)	0.3342(4)	0.6526(2)	0.0603(11)
C28	0.9127(4)	0.2332(3)	0.6326(2)	0.0561(10)
C29	0.8083(3)	0.2246(3)	0.6199(2)	0.0507(9)
C30	0.7962(3)	0.3180(3)	0.6272(2)	0.0405(7)
C31	0.9826(3)	0.6505(3)	0.6378(2)	0.0402(7)
C32	0.9991(4)	0.6419(4)	0.5740(2)	0.0641(12)
C33	1.0850(5)	0.7337(5)	0.5514(3)	0.0798(14)
C34	1.1473(5)	0.8254(5)	0.5894(3)	0.086(2)
C35	1.1325(5)	0.8392(5)	0.6521(3)	0.087(2)
C36	1.0485(3)	0.7490(3)	0.6762(2)	0.0606(11)
C37	0.9357(3)	0.4520(3)	0.8433(2)	0.0353(6)
C38	0.9920(3)	0.4576(3)	0.9055(2)	0.0442(8)
C39	0.9725(4)	0.3621(4)	0.9348(2)	0.0544(10)
C40	0.8979(4)	0.2606(4)	0.9026(2)	0.0606(11)
C41	0.8415(4)	0.2534(3)	0.8415(2)	0.0612(11)
C42	0.8601(3)	0.3486(3)	0.8119(2)	0.0475(8)
C43	0.9621(3)	0.6647(3)	0.8645(2)	0.0362(6)
C44	1.0529(3)	0.7639(3)	0.8910(2)	0.0501(9)
C45	1.0412(4)	0.8340(3)	0.9349(2)	0.0682(13)
C46	0.9392(5)	0.8064(4)	0.9507(2)	0.0686(13)
C47	0.8468(4)	0.7078(4)	0.9248(2)	0.0603(11)
C48	0.8580(3)	0.6365(3)	0.8828(2)	0.0424(7)
C49	0.4899(2)	0.6432(2)	0.6035(2)	0.0341(6)
C50	0.4512(3)	0.6135(3)	0.5372(2)	0.0454(8)
C51	0.3467(4)	0.5974(4)	0.5093(2)	0.0615(11)
C52	0.2808(4)	0.6125(4)	0.5475(3)	0.0691(13)
C53	0.3166(4)	0.6407(4)	0.6134(3)	0.0667(12)
C54	0.4216(3)	0.6555(3)	0.6418(2)	0.0466(8)
C55	0.7178(2)	0.7813(2)	0.59585(15)	0.0317(6)
C56	0.6835(3)	0.8526(3)	0.5668(2)	0.0422(7)
C57	0.7592(4)	0.9453(3)	0.5409(2)	0.0518(9)
C58	0.8677(3)	0.9673(3)	0.5440(2)	0.0522(9)
C59	0.9028(3)	0.8983(3)	0.5732(2)	0.0558(10)
C60	0.8284(3)	0.8057(3)	0.5987(2)	0.0449(8)
C61	0.6600(3)	0.7972(3)	0.8294(2)	0.0370(6)
C62	0.5685(3)	0.7021(3)	0.8420(2)	0.0468(8)
C63	0.5390(4)	0.6890(4)	0.9031(2)	0.0599(11)
C64	0.6009(5)	0.7688(5)	0.9536(2)	0.0720(14)
C65	0.6928(5)	0.8629(5)	0.9423(2)	0.083(2)
C66	0.7222(4)	0.8788(4)	0.8808(2)	0.0625(11)
C67	0.8346(3)	0.9103(2)	0.7583(2)	0.0377(7)

Atom	x	y	z	U <sub>eq/iso</sub>
C68	0.9135(3)	0.8765(3)	0.7760(2)	0.0505(9)
C69	1.0263(3)	0.9504(4)	0.7850(2)	0.0590(10)
C70	1.0623(4)	1.0603(3)	0.7775(2)	0.0650(12)
C71	0.9858(4)	1.0956(3)	0.7591(3)	0.080(2)
C72	0.8723(4)	1.0206(3)	0.7489(2)	0.0603(11)
C73	0.3411(4)	0.8434(5)	0.8313(3)	0.079(2)
C74	0.3511(6)	0.8159(6)	0.8927(4)	0.095(2)
C75	0.3669(7)	0.8817(7)	0.9440(5)	0.123(3)
C76	0.3743(7)	0.9777(7)	0.9373(5)	0.121(3)
C77	0.3621(7)	1.0150(6)	0.8804(6)	0.119(3)
C78	0.3450(6)	0.9455(7)	0.8216(4)	0.111(3)
C79	0.3253(10)	0.7679(10)	0.7728(6)	0.141(3)

Atom	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
Sm	0.02277(6)	0.02070(6)	0.02388(7)	0.00394(4)	0.00440(4)	0.01050(5)
P1	0.0287(3)	0.0251(3)	0.0294(4)	0.0012(3)	0.0071(3)	0.0098(3)
P2	0.0360(4)	0.0253(3)	0.0325(4)	0.0061(3)	0.0129(3)	0.0111(3)
P3	0.0279(3)	0.0381(4)	0.0279(4)	0.0073(3)	0.0063(3)	0.0194(3)
P4	0.0245(3)	0.0420(4)	0.0304(4)	0.0057(3)	0.0010(3)	0.0161(3)
P5	0.0310(3)	0.0263(3)	0.0281(4)	0.0049(3)	0.0037(3)	0.0147(3)
P6	0.0406(4)	0.0255(3)	0.0366(4)	0.0020(3)	0.0033(3)	0.0189(3)
N1	0.0313(11)	0.0250(11)	0.0299(13)	0.0052(9)	0.0093(9)	0.0115(9)
N2	0.0272(11)	0.0386(13)	0.0274(13)	0.0081(9)	0.0058(9)	0.0181(10)
N3	0.0327(11)	0.0222(10)	0.0301(13)	0.0039(8)	0.0057(9)	0.0124(9)
C1	0.0329(14)	0.0303(14)	0.041(2)	0.0015(12)	0.0099(12)	0.0132(12)
C2	0.060(2)	0.044(2)	0.051(2)	-0.011(2)	-0.002(2)	0.028(2)
C3	0.073(3)	0.049(2)	0.080(3)	-0.027(2)	0.005(2)	0.029(2)
C4	0.067(3)	0.035(2)	0.099(4)	0.002(2)	0.022(3)	0.029(2)
C5	0.074(3)	0.048(2)	0.074(3)	0.015(2)	0.020(2)	0.042(2)
C6	0.055(2)	0.043(2)	0.049(2)	0.0033(15)	0.011(2)	0.030(2)
C7	0.0292(13)	0.0317(14)	0.035(2)	-0.0060(11)	0.0040(11)	0.0115(11)
C8	0.036(2)	0.043(2)	0.045(2)	0.0028(14)	0.0065(14)	0.0082(14)
C9	0.030(2)	0.056(2)	0.069(3)	-0.011(2)	0.007(2)	0.002(2)
C10	0.037(2)	0.071(3)	0.076(3)	-0.023(2)	-0.006(2)	0.027(2)
C11	0.057(2)	0.058(2)	0.068(3)	-0.008(2)	-0.009(2)	0.035(2)
C12	0.042(2)	0.038(2)	0.047(2)	-0.0032(14)	0.0034(15)	0.0194(14)
C13	0.0375(15)	0.0356(15)	0.032(2)	0.0088(11)	0.0141(12)	0.0157(13)
C14	0.067(2)	0.072(3)	0.040(2)	0.004(2)	0.009(2)	0.047(2)
C15	0.068(3)	0.097(4)	0.049(3)	0.011(2)	0.006(2)	0.057(3)
C16	0.046(2)	0.084(3)	0.035(2)	0.003(2)	0.003(2)	0.027(2)
C17	0.049(2)	0.056(2)	0.040(2)	-0.006(2)	0.005(2)	0.018(2)
C18	0.045(2)	0.043(2)	0.043(2)	-0.0011(14)	0.0060(15)	0.0192(15)
C19	0.0280(13)	0.0334(14)	0.039(2)	-0.0029(12)	0.0076(12)	0.0090(12)
C20	0.035(2)	0.054(2)	0.044(2)	-0.002(2)	0.0155(15)	0.0100(15)
C21	0.035(2)	0.080(3)	0.061(3)	-0.019(2)	0.018(2)	0.016(2)
C22	0.042(2)	0.089(3)	0.068(3)	-0.025(3)	-0.002(2)	0.037(2)
C23	0.048(2)	0.065(3)	0.066(3)	-0.009(2)	-0.004(2)	0.035(2)
C24	0.039(2)	0.040(2)	0.048(2)	-0.0037(14)	0.0065(14)	0.0189(14)
C25	0.0350(14)	0.043(2)	0.0294(15)	0.0028(12)	0.0061(12)	0.0230(13)
C26	0.034(2)	0.047(2)	0.063(2)	-0.011(2)	-0.0019(15)	0.0230(15)

Atom	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
C27	0.051(2)	0.069(3)	0.075(3)	-0.013(2)	-0.004(2)	0.045(2)
C28	0.069(3)	0.047(2)	0.064(3)	-0.003(2)	0.009(2)	0.037(2)
C29	0.053(2)	0.040(2)	0.055(2)	0.003(2)	0.015(2)	0.018(2)
C30	0.037(2)	0.046(2)	0.042(2)	0.0065(14)	0.0114(14)	0.0219(14)
C31	0.0336(15)	0.052(2)	0.045(2)	0.0242(15)	0.0144(14)	0.0254(15)
C32	0.069(3)	0.085(3)	0.057(3)	0.033(2)	0.033(2)	0.045(3)
C36	0.048(2)	0.051(2)	0.067(3)	0.026(2)	0.005(2)	0.012(2)
C37	0.0359(15)	0.043(2)	0.035(2)	0.0085(12)	0.0048(12)	0.0251(14)
C38	0.049(2)	0.052(2)	0.038(2)	0.0038(14)	-0.0026(15)	0.032(2)
C39	0.072(3)	0.069(3)	0.042(2)	0.014(2)	0.003(2)	0.051(2)
C40	0.087(3)	0.057(2)	0.056(3)	0.021(2)	0.013(2)	0.049(2)
C41	0.080(3)	0.043(2)	0.060(3)	0.006(2)	0.003(2)	0.032(2)
C42	0.062(2)	0.046(2)	0.032(2)	0.0043(14)	-0.001(2)	0.027(2)
C43	0.040(2)	0.0346(15)	0.033(2)	0.0086(12)	0.0022(13)	0.0179(13)
C44	0.047(2)	0.042(2)	0.048(2)	0.0001(15)	-0.006(2)	0.014(2)
C45	0.083(3)	0.038(2)	0.064(3)	-0.011(2)	-0.012(2)	0.019(2)
C46	0.109(4)	0.052(2)	0.055(3)	0.001(2)	0.013(3)	0.048(3)
C47	0.083(3)	0.059(2)	0.058(3)	0.017(2)	0.031(2)	0.044(2)
C48	0.047(2)	0.040(2)	0.042(2)	0.0086(14)	0.0113(15)	0.0215(15)
C49	0.0328(14)	0.0295(13)	0.037(2)	0.0072(11)	0.0023(12)	0.0130(12)
C50	0.046(2)	0.049(2)	0.038(2)	0.0036(14)	-0.0016(15)	0.022(2)
C51	0.059(2)	0.071(3)	0.045(2)	0.003(2)	-0.017(2)	0.031(2)
C52	0.046(2)	0.078(3)	0.077(3)	-0.001(2)	-0.019(2)	0.033(2)
C53	0.045(2)	0.084(3)	0.077(3)	-0.007(2)	0.005(2)	0.037(2)
C54	0.037(2)	0.056(2)	0.044(2)	-0.001(2)	0.0022(14)	0.021(2)
C55	0.0336(14)	0.0293(13)	0.0296(15)	0.0068(11)	0.0053(11)	0.0128(11)
C56	0.044(2)	0.035(2)	0.047(2)	0.0145(14)	0.0082(15)	0.0178(14)
C57	0.066(2)	0.033(2)	0.051(2)	0.0165(15)	0.010(2)	0.019(2)
C58	0.058(2)	0.037(2)	0.045(2)	0.0103(15)	0.017(2)	0.007(2)
C59	0.039(2)	0.058(2)	0.060(3)	0.010(2)	0.017(2)	0.013(2)
C60	0.041(2)	0.045(2)	0.049(2)	0.0097(15)	0.0078(15)	0.0207(15)
C61	0.041(2)	0.0341(15)	0.040(2)	-0.0019(12)	0.0068(13)	0.0214(13)
C62	0.054(2)	0.041(2)	0.049(2)	0.0047(15)	0.015(2)	0.025(2)
C63	0.074(3)	0.058(2)	0.064(3)	0.018(2)	0.034(2)	0.038(2)
C64	0.102(4)	0.095(4)	0.048(3)	0.012(2)	0.034(3)	0.065(3)
C65	0.095(4)	0.091(4)	0.054(3)	-0.024(3)	0.019(3)	0.036(3)
C66	0.066(3)	0.057(2)	0.051(3)	-0.016(2)	0.013(2)	0.019(2)
C67	0.044(2)	0.0237(13)	0.039(2)	0.0038(11)	0.0058(14)	0.0112(12)
C68	0.044(2)	0.031(2)	0.067(3)	0.012(2)	0.006(2)	0.0099(14)
C69	0.046(2)	0.055(2)	0.063(3)	0.012(2)	0.001(2)	0.016(2)
C70	0.047(2)	0.044(2)	0.070(3)	0.004(2)	0.001(2)	-0.003(2)
C71	0.073(3)	0.026(2)	0.107(4)	0.014(2)	-0.002(3)	0.001(2)
C72	0.064(2)	0.026(2)	0.081(3)	0.007(2)	0.000(2)	0.017(2)
C73	0.057(3)	0.087(4)	0.098(4)	-0.013(3)	0.011(3)	0.040(3)
C74	0.098(5)	0.083(4)	0.118(6)	0.018(4)	0.010(4)	0.056(4)
C75	0.117(6)	0.116(6)	0.129(7)	0.003(5)	0.007(5)	0.055(5)
C76	0.116(6)	0.096(6)	0.143(8)	-0.024(5)	0.013(5)	0.048(5)
C77	0.116(6)	0.063(4)	0.183(9)	0.033(5)	0.038(6)	0.044(4)
C78	0.092(5)	0.143(7)	0.114(6)	0.066(5)	0.045(4)	0.060(5)

5.2.39  $[(\text{Ph}_2\text{P})_2\text{N}]_3\text{Er}$  (19e) · Toluol

CCDC-Nummer	186712
Summenformel	$\text{C}_{79}\text{H}_{68}\text{ErN}_3\text{P}_6$
Molare Masse [ $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ]	1412.44
Raumgruppe	$P\bar{1}$ (No. 2)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1362.66(12), 1367.55(12), 2078.1(2)
$\alpha, \beta, \gamma$ [°]	90.905(11), 97.950(11), 118.181(9)
Volumen [ $10^6 \text{ pm}^3$ ]	3366.1(5)
Röntgenographische Dichte [ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ]	1.394
Messgerät	Stoe IPDS I
Strahlungsquelle	Ag- $\text{K}_\alpha$ ( $\lambda = 56.087 \text{ pm}$ )
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	keine
Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]	0.772
Gemessene Reflexe	29470
Unabhängige Reflexe	13460 [ $R_{\text{int}} = 0.0393$ ]
Beobachtete Reflexe [ $I > 2\sigma(I)$ ]	12289
Daten / Parameter	13460 / 783
$R_1; wR_2$	0.0327; 0.0981

5.2.40  $[(\text{Ph}_2\text{P})_2\text{N}]_3\text{Lu}(\text{THF})$  (20) ·  $\frac{1}{2}$  Toluol

CCDC-Nummer	186713
Summenformel	$\text{C}_{79.5}\text{H}_{72}\text{LuN}_3\text{OP}_6$
Molare Masse [ $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ]	1446.19
Raumgruppe	$Pbca$ (No. 61)
Gitterkonstanten a, b, c [pm]	1503.8(3), 2088.2(4), 4518.7(9)
Volumen [ $10^6 \text{ pm}^3$ ]	14190(5)
Röntgenographische Dichte [ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ]	1.354
Messgerät	Stoe IPDS I
Strahlungsquelle	Ag- $\text{K}_\alpha$ ( $\lambda = 56.087 \text{ pm}$ )
Meßtemperatur [K]	203(2)
Absorptionskorrektur	keine
Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]	0.847
Gemessene Reflexe	43914
Unabhängige Reflexe	11295 [ $R_{\text{int}} = 0.0852$ ]
Beobachtete Reflexe [ $I > 2\sigma(I)$ ]	7710
Daten / Parameter	11295 / 624
$R_1; wR_2$	0.0553; 0.1471