

Kapitel 6

Kristallographischer Anhang

6.1 Tc-Komplexe

6.1.1 [TcO(9aneN₃)(OCH₂CH₂O)]Br · H₂O

Tabelle 6.1: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von [TcO(9aneN₃)(OCH₂CH₂O)]Br · H₂O.

Summenformel	C ₈ H ₁₉ BrN ₃ O ₄ Tc	
M (g/mol)	399.17	
Messtemperatur	153(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Monoklin, P2 ₁	
Elementarzelle	a= 7.207(5) Å	α= 90°
	b= 13.442(5) Å	β= 113.74(1)°
	c= 7.319(5) Å	γ= 90°
Volumen	649.0(7) Å ³	
Z	2	
Berechnete Dichte	2.043 g/cm ³	
Linearer Absorptionskoeffizient	4.195 mm ⁻¹	
F(000)	396	
Kristallgröße	0.19 x 0.13 x 0.08 mm ³	
Theta-Bereich	3.03 – 30.53°	
Indizes	-10 ≤ h ≤ 10, -18 ≤ k ≤ 19, -10 ≤ l ≤ 10	
Zahl der gemessenen Reflexe	8101	
Zahl der unabhängigen Reflexe	3766 [R(int)= 0.0198]	
Absorptionskorrektur	semiempirisch (SADABS)	
T _{min} , T _{max}	0.774866, 1	
Zahl der verfeinerten Parameter	154	
Goof	0.997	
R ₁ / wR ₂ [I > 2σ(I)]	R1= 0.0211, wR2= 0.0550	
R ₁ / wR ₂ (alle Reflexe)	R1= 0.0216, wR2= 0.0552	
Flack-Parameter	0.002(5)	
Restelektronendichte	0.649 und -0.585 e · Å ⁻³	
Diffraktometer	CCD, Bruker SMART	
Programm zur Strukturlösung	SIR 97 [140]	

Tabelle 6.2: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) von $[\text{TcO}(\text{9aneN}_3)(\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{O})]^+\text{Br} \cdot \text{H}_2\text{O}$.

	x	y	z	E(eq)
Tc(1)	8442(1)	2508(1)	1291(1)	13(1)
O(1)	9479(3)	1713(2)	221(3)	23(1)
N(1)	6469(3)	3103(2)	2784(3)	18(1)
C(1)	4309(4)	2944(2)	1403(5)	25(1)
C(2)	4055(4)	1874(2)	754(4)	25(1)
N(2)	5787(3)	1550(2)	288(3)	18(1)
C(3)	6612(4)	553(2)	1214(4)	25(1)
C(4)	7892(4)	667(2)	3417(4)	25(1)
N(3)	9185(3)	1580(2)	3907(3)	19(1)
C(5)	8993(5)	2175(3)	5544(4)	29(1)
C(6)	6951(5)	2677(2)	4800(4)	27(1)
O(21)	10330(3)	3524(2)	2786(3)	19(1)
C(22)	10036(4)	4474(2)	1821(4)	22(1)
C(23)	8851(4)	4304(2)	-395(4)	21(1)
O(24)	7302(3)	3587(2)	-587(3)	19(1)
Br(1)	3799(1)	479(1)	5719(1)	21(1)
O(30)	3291(5)	3276(3)	-3247(5)	54(1)

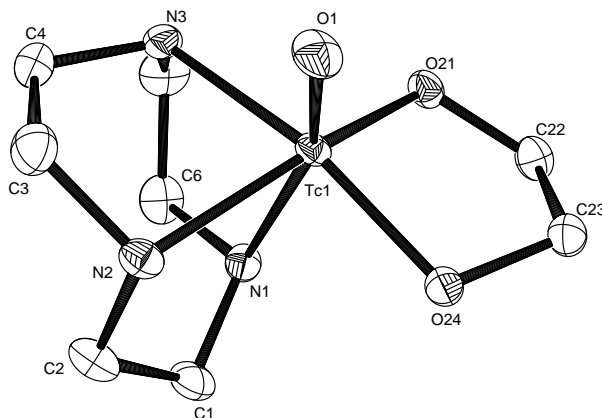


Abbildung 6.1: Ellipsoiddarstellung des $[\text{TcO}(\text{9aneN}_3)(\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{O})]^+$ -Kations. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit.

6.1.2 [TcO₃(9aneN₃)]BrTabelle 6.3: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von [TcO₃(9aneN₃)]Br.

Summenformel	C ₆ H ₁₅ BrN ₃ O ₃ Tc	
M (g/mol)	355.12	
Messtemperatur	293(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Hexagonal, P6 ₃	
Elementarzelle	a= 8.057(5) Å	α= 90°
	b= 8.057(5) Å	β= 90°
	c= 10.805(5) Å	γ= 120°
Volumen	607.4(6) Å ³	
Z	2	
Berechnete Dichte	1.942 g/cm ³	
Linearer Absorptionskoeffizient	4.463 mm ⁻¹	
F(000)	348	
Kristallgröße	0.34 x 0.30 x 0.21 mm ³	
Theta-Bereich	3.48 – 26.99°	
Indizes	-9 ≤ h ≤ 9, -9 ≤ k ≤ 9, -13 ≤ l ≤ 13	
Zahl der gemessenen Reflexe	1760	
Zahl der unabhängigen Reflexe	896 [R(int)= 0.0194]	
Absorptionskorrektur	empirisch (DIFABS)	
T _{min} , T _{max}	0.325, 0.755	
Zahl der verfeinerten Parameter	48	
Goof	0.700	
R ₁ / wR ₂ [I > 2σ(I)]	R1= 0.0253, wR2= 0.0751	
R ₁ / wR ₂ (alle Reflexe)	R1= 0.0381, wR2= 0.0877	
Flack-Parameter	0.02(1)	
Restelektronendichte	0.575 und -0.610 e · Å ⁻³	
Diffraktometer	CAD4, Enraf-Nonius	
Programm zur Strukturlösung	SHELXS 97 [141]	

Kristallographischer Anhang

Tabelle 6.4: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) von $[\text{TcO}_3(9\text{aneN}_3)]\text{Br}$.

	x	y	z	E(eq)
Tc(1)	6667	3333	9993(1)	43(1)
N(1)	5980(7)	1156(7)	11486(4)	46(1)
C(1)	4593(9)	1049(8)	12437(5)	54(1)
C(2)	7772(9)	1451(9)	12027(7)	58(1)
O(1)	4443(5)	1885(5)	9394(5)	57(1)
Br(1)	3333	-3333	10606(1)	50(1)

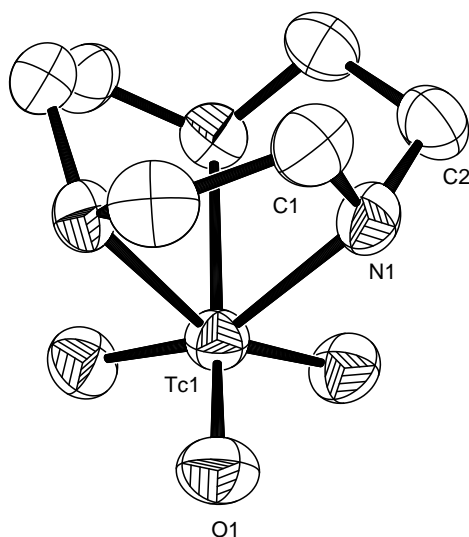


Abbildung 6.2: Ellipsoiddarstellung des $[\text{TcO}_3(9\text{aneN}_3)]^+$ -Kations. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit.

6.1.3 [TcCl₂(OH₂)(9aneN₃)]Cl

Tabelle 6.5: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von [TcCl₂(OH₂)(9aneN₃)]Cl.

Summenformel	C ₆ H ₁₇ Cl ₃ N ₃ OTc	
M (g/mol)	351.58	
Messtemperatur	293(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Monoklin, P2 ₁ /n	
Elementarzelle	a= 12.841(3) Å	α= 90°
	b= 12.973(3) Å	β= 90.16(1)°
	c= 7.801(1) Å	γ= 90°
Volumen	1299.6(4) Å ³	
Z	4	
Berechnete Dichte	1.797 g/cm ³	
Linearer Absorptionskoeffizient	1.701 mm ⁻¹	
F(000)	704	
Kristallgröße	0.08 x 0.08 x 0.03 mm ³	
Theta-Bereich	3.05 – 27.00°	
Indizes	0 ≤ h ≤ 16, -16 ≤ k ≤ 16, -5 ≤ l ≤ 1	
Zahl der gemessenen Reflexe	2544	
Zahl der unabhängigen Reflexe	1284 [R(int)= 0.1150]	
Absorptionskorrektur	keine	
Zahl der verfeinerten Parameter	106	
Goof	0.9	
R ₁ / wR ₂ [I > 2σ(I)]	R1= 0.0637, wR2= 0.1560	
R ₁ / wR ₂ (alle Reflexe)	R1= 0.1637, wR2= 0.2030	
Restelektronendichte	1.396 und -0.580 e · Å ⁻³	
Diffraktometer	CAD4, Enraf-Nonius	
Programm zur Strukturlösung	SIR 97 [140]	

Kristallographischer Anhang

Tabelle 6.6: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) von $[\text{TcCl}_2(\text{OH}_2)(9\text{aneN}_3)]\text{Cl}$.

	x	y	z	E(eq)
Tc(1)	2989(1)	2158(1)	-6(3)	47(1)
Cl(1)	4108(4)	3559(4)	-16(10)	63(3)
Cl(2)	3789(6)	1261(6)	-2124(15)	156(6)
O(1)	3773(9)	1277(8)	2190(20)	43(3)
N(1)	1714(14)	1113(10)	70(30)	44(8)
C(1)	1120(20)	1270(20)	-1430(50)	79(8)
C(2A)*	1480(40)	1960(30)	-2770(70)	52(14)
C(2B)*	970(40)	2380(30)	-2170(90)	65(15)
N(2)	1984(14)	2932(16)	-1700(30)	61(8)
C(3)	1470(30)	3770(30)	-1000(70)	113(12)
C(4A)*	1310(30)	3710(30)	920(70)	37(11)
C(4B)*	1630(30)	3970(20)	240(80)	29(9)
N(3)	1960(14)	2920(14)	1720(30)	75(10)
C(5A)*	980(30)	2320(30)	2070(70)	46(12)
C(5B)*	1580(40)	1840(40)	2650(80)	65(15)
C(6)	1029(18)	1289(16)	1460(40)	52(5)
Cl(10)	3132(5)	3778(4)	5033(11)	64(3)

* Diese Atome des 1,4,7-Trithiacyclononans befinden sich zu 50% auf fehlgeordneten Positionen. Aufgrund dieser Fehlordnung ist eine anisotrope Verfeinerung aller Kohlenstoffatome nicht möglich.

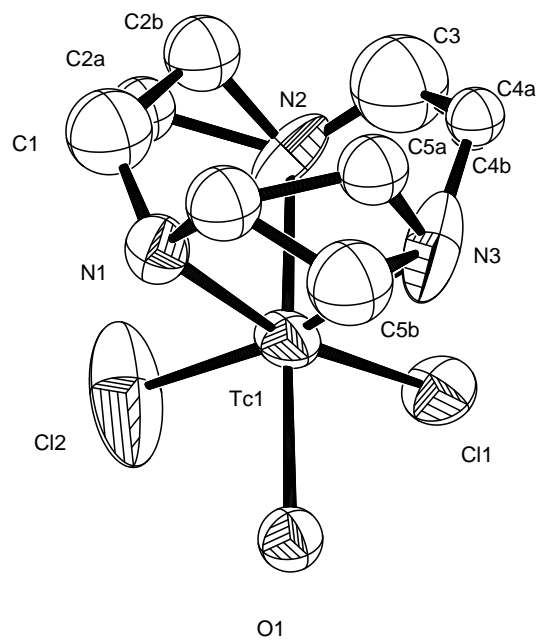


Abbildung 6.3: Ellipsoiddarstellung des $[TcCl_2(OH_2)(9aneN_3)]^+$ -Kations. Die Schwingungselipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit.

6.1.4 [TcO₂(L^{i-Pr})₄][TcO₄] · 1.5 THF

 Tabelle 6.7: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von [TcO₂(L^{i-Pr})₄][TcO₄] · 1.5 THF.

Summenformel	C ₅₀ H ₉₂ N ₈ O _{7.5} Tc ₂	
M (g/mol)	1121.32	
Messtemperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Triklin, P $\bar{1}$	
Elementarzelle	a= 12.302(5) Å	α = 100.13(1)°
	b= 16.386(5) Å	β = 98.19(1)°
	c= 16.688(5) Å	γ = 106.09(1)°
Volumen	3116(2) Å ³	
Z	2	
Berechnete Dichte	1.195 g/cm ³	
Linearer Absorptionskoeffizient	0.492 mm ⁻¹	
F(000)	1188	
Kristallgröße	0.4 x 0.2 x 0.2 mm ³	
Theta-Bereich	1.85 – 25.00°	
Indizes	-14 ≤ h ≤ 14, -19 ≤ k ≤ 19, -17 ≤ l ≤ 19	
Zahl der gemessenen Reflexe	25226	
Zahl der unabhängigen Reflexe	10913 [R(int)= 0.0304]	
Absorptionskorrektur	keine	
Zahl der verfeinerten Parameter	678	
Goof	0.913	
R ₁ / wR ₂ [I > 2σ(I)]	R1= 0.0540, wR2= 0.1467	
R ₁ / wR ₂ (alle Reflexe)	R1= 0.0722, wR2= 0.1613	
Restelektronendichte	1.680 und -1.516 e · Å ⁻³	
Diffraktometer	CCD, Bruker SMART	
Programm zur Strukturlösung	SIR 97 [140]	

Tabelle 6.8: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) von $[\text{TcO}_2(\text{L}^{\text{i-Pr}})_4][\text{TcO}_4] \cdot 1.5 \text{ THF}$.

	x	y	z	E(eq)
Tc(1)	7689(1)	1854(1)	7496(1)	17(1)
O(1)	6470(2)	1426(2)	6676(2)	20(1)
O(2)	8906(2)	2280(2)	8318(2)	25(1)
C(1)	6938(3)	823(3)	8149(3)	23(1)
N(2)	5796(3)	460(2)	8165(2)	23(1)
C(3)	5667(4)	-150(3)	8662(3)	32(1)
C(4)	6733(4)	-162(3)	8968(3)	35(1)
N(5)	7504(3)	429(2)	8642(2)	27(1)
C(6)	4848(3)	704(3)	7717(3)	26(1)
C(7)	4107(4)	-19(3)	6991(3)	40(1)
C(8)	4139(4)	1040(4)	8298(3)	40(1)
C(9)	8776(4)	595(3)	8789(3)	32(1)
C(10)	9109(5)	-204(4)	8442(4)	46(1)
C(11)	9347(5)	1009(4)	9698(3)	50(1)
C(12)	4525(5)	-673(4)	8806(4)	52(1)
C(13)	7066(6)	-663(4)	9579(4)	59(2)
C(21)	6810(3)	2721(2)	8152(3)	22(1)
N(22)	6072(3)	3109(2)	7800(2)	26(1)
C(23)	5694(4)	3593(3)	8419(3)	37(1)
C(24)	6208(4)	3515(3)	9155(3)	37(1)
N(25)	6884(3)	2968(2)	8982(2)	26(1)
C(26)	5753(4)	3032(3)	6898(3)	31(1)
C(27)	4483(5)	2550(4)	6557(4)	50(1)
C(28)	6154(5)	3901(3)	6660(3)	46(1)
C(29)	7595(4)	2687(3)	9614(3)	27(1)
C(30)	6864(4)	2145(3)	10107(3)	38(1)
C(31)	8590(5)	3455(3)	10161(3)	45(1)
C(32)	4846(6)	4083(4)	8261(4)	60(2)
C(33)	6108(6)	3938(4)	10011(4)	56(2)

Kristallographischer Anhang

	x	y	z	E(eq)
C(41)	8468(3)	2896(3)	6863(3)	22(1)
N(42)	8387(3)	2846(2)	6033(2)	24(1)
C(43)	9032(4)	3627(3)	5878(3)	32(1)
C(44)	9528(4)	4174(3)	6623(3)	36(1)
N(45)	9173(3)	3724(2)	7225(2)	26(1)
C(46)	7707(4)	2049(3)	5385(3)	25(1)
C(47)	6774(4)	2219(3)	4794(3)	38(1)
C(48)	8480(4)	1631(3)	4929(3)	36(1)
C(49)	9477(4)	4090(3)	8133(3)	33(1)
C(50)	9043(5)	4860(3)	8388(3)	44(1)
C(51)	10766(5)	4293(3)	8476(3)	45(1)
C(52)	9110(5)	3802(3)	5033(3)	47(1)
C(53)	10335(6)	5092(3)	6793(4)	58(2)
C(61)	8574(3)	991(3)	6858(2)	21(1)
N(62)	8093(3)	159(2)	6392(2)	24(1)
C(63)	9964(4)	445(3)	6441(3)	34(1)
C(64)	8945(4)	-177(3)	6130(3)	32(1)
N(65)	9728(3)	1163(2)	6886(2)	25(1)
C(66)	6834(4)	-309(3)	6192(3)	26(1)
C(67)	6532(4)	-1145(3)	6498(3)	40(1)
C(68)	6339(4)	-436(3)	5266(3)	39(1)
C(69)	10599(4)	2012(3)	7297(3)	31(1)
C(70)	11441(4)	1944(4)	8021(3)	48(1)
C(71)	11191(4)	2469(4)	6679(3)	45(1)
C(72)	8741(5)	-1089(3)	5634(3)	45(1)
C(73)	11143(5)	361(4)	6408(4)	50(1)
Tc(2)	9062(1)	1969(1)	12393(1)	60(1)
O(3)	8402(5)	1009(4)	11725(4)	107(2)
O(4)	9296(6)	2768(4)	11883(4)	105(2)
O(5)	10310(8)	1945(6)	12898(7)	206(6)
O(6)	8118(10)	2113(5)	13018(5)	168(4)

	x	y	z	E(eq)
O(81)*	3540(13)	3616(10)	4722(9)	122(5)
C(82)*	2810(20)	3591(16)	5252(12)	122(8)
C(83)*	2028(15)	4000(30)	5035(12)	202(19)
C(84)*	2057(15)	4169(14)	4297(19)	132(10)
C(85)*	2922(13)	3734(11)	3932(9)	77(4)
O(91)*	6366(11)	4255(8)	12373(10)	108(4)
C(92)*	6427(16)	3406(10)	12195(9)	80(5)
C(93)*	5759(18)	2892(12)	12747(12)	104(7)
C(94)*	5710(30)	3533(19)	13335(13)	200(18)
C(95)*	5781(16)	4315(10)	13013(7)	77(5)
O(101)*	3026(10)	3288(15)	163(8)	178(9)
C(102)*	3607(11)	3217(17)	888(10)	118(8)
C(103)*	2850(20)	3180(30)	1489(16)	220(20)
C(104)*	1799(15)	3025(14)	1143(11)	95(6)
C(105)*	1940(18)	3389(18)	376(10)	130(10)

* Die Positionen der Atome der Lösungsmittelmoleküle sind nur zu 50% besetzt.

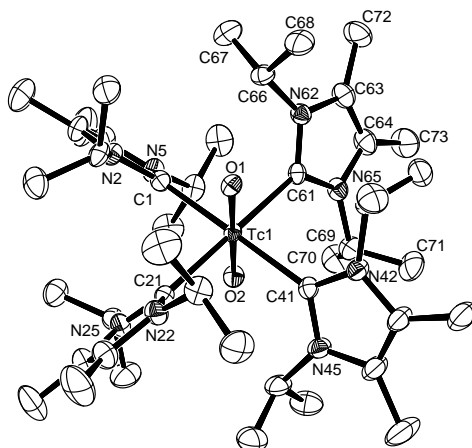


Abbildung 6.4: Ellipsoiddarstellung des $[\text{TcO}_2(\text{L}^i\text{-Pr})_4]^+$ -Kations. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Aus Gründen der Übersichtlichkeit sind nur die Kohlenstoffatome des Imidazolrings mit C61 vollständig benannt. Das in diesem Ring verwendete Schema gilt in gleicher Weise auch für die anderen Liganden.

6.1.5 [TcO(OH)(L^{Et})₄][TcO₄](PF₆)

 Tabelle 6.9: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von [TcO(OH)(L^{Et})₄][TcO₄](PF₆).

Summenformel	C ₃₆ H ₆₅ F ₆ N ₈ O ₆ PTc ₂	
M (g/mol)	1046.93	
Messtemperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Triklin, P $\bar{1}$	
Elementarzelle	a= 12.778(5) Å	α = 93.557(5)°
	b= 12.758(5) Å	β = 94.049(5)°
	c= 16.385(5) Å	γ = 117.975(5)°
Volumen	2339(2) Å ³	
Z	2	
Berechnete Dichte	1.486 g/cm ³	
Linearer Absorptionskoeffizient	0.698 mm ⁻¹	
F(000)	1080	
Kristallgröße	0.2 x 0.15 x 0.1 mm ³	
Theta-Bereich	3.13 – 25.00°	
Indizes	-15 ≤ h ≤ 15, -15 ≤ k ≤ 15, -18 ≤ l ≤ 19	
Zahl der gemessenen Reflexe	13783	
Zahl der unabhängigen Reflexe	7701 [R(int)= 0.1438]	
Absorptionskorrektur	keine	
Zahl der verfeinerten Parameter	535	
Goof	0.714	
R ₁ / wR ₂ [I > 2σ(I)]	R1= 0.0708, wR2= 0.1431	
R ₁ / wR ₂ (alle Reflexe)	R1= 0.2166, wR2= 0.1805	
Restelektronendichte	0.518 und -0.535 e · Å ⁻³	
Diffraktometer	IPDS, STOE	
Programm zur Strukturlösung	SHELXS 97 [141]	

Tabelle 6.10: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) von $[\text{TcO}(\text{OH})(\text{L}^{\text{Et}})_4][\text{TcO}_4](\text{PF}_6)$.

	x	y	z	E(eq)
Tc(1)	7239(1)	2761(1)	7499(1)	57(1)
O(1)	6512(6)	2035(5)	6485(3)	42(2)
O(2)	7969(6)	3483(5)	8514(3)	40(2)
C(1)	7563(9)	4494(9)	7102(6)	46(3)
N(2)	6863(7)	4727(7)	6583(5)	42(2)
C(3)	7388(11)	5885(9)	6395(6)	47(3)
C(4)	8488(11)	6396(9)	6814(6)	47(3)
N(5)	8584(7)	5544(7)	7249(5)	42(2)
C(6)	5542(14)	3560(20)	5710(30)	290(20)
C(7)	5280(40)	3877(19)	6343(9)	310(30)
C(8)	9625(11)	5786(10)	7784(7)	62(3)
C(9)	9692(13)	6419(12)	8618(8)	94(4)
C(10)	6867(11)	6402(10)	5837(7)	73(4)
C(11)	9478(10)	7639(9)	6858(7)	68(3)
C(21)	8899(10)	3046(8)	7084(6)	48(3)
N(22)	9355(7)	3353(6)	6363(5)	42(2)
C(23)	10391(10)	3359(9)	6296(6)	52(3)
C(24)	10690(9)	3054(10)	7021(7)	56(3)
N(25)	9768(7)	2834(7)	7492(5)	51(2)
C(26)	8768(10)	3645(9)	5663(6)	52(3)
C(27)	8138(13)	2622(12)	4991(7)	80(4)
C(28)	9827(11)	2578(12)	8361(7)	65(3)
C(29)	10569(13)	3557(13)	8970(7)	83(4)
C(30)	11116(12)	3709(14)	5598(7)	94(5)
C(31)	11754(11)	2870(13)	7266(8)	85(4)
C(41)	6983(9)	1069(9)	7904(6)	47(3)
N(42)	7162(8)	220(7)	7504(5)	49(2)
C(43)	6947(11)	-709(9)	7992(7)	57(3)
C(44)	6615(10)	-424(9)	8698(6)	50(3)

Kristallographischer Anhang

	x	y	z	E(eq)
N(45)	6630(7)	653(7)	8641(5)	45(2)
C(46)	7452(13)	168(11)	6649(7)	72(4)
C(47)	6449(14)	-584(11)	6040(7)	82(4)
C(48)	6375(10)	1242(10)	9336(6)	56(3)
C(49)	7346(14)	1841(13)	10002(7)	83(4)
C(50)	7160(15)	-1756(12)	7711(8)	96(5)
C(51)	6286(13)	-1119(12)	9431(7)	90(4)
C(61)	5487(10)	2444(9)	7902(6)	45(3)
N(62)	4456(7)	1412(7)	7758(5)	45(2)
C(63)	3598(9)	1510(10)	8177(6)	47(3)
C(64)	4120(9)	2618(9)	8605(6)	45(3)
N(65)	5265(8)	3138(7)	8401(5)	40(2)
C(66)	4246(11)	364(9)	7208(7)	65(3)
C(67)	3632(14)	324(11)	6369(8)	90(4)
C(68)	6444(19)	4435(12)	9320(20)	241(17)
C(99)	6050(20)	4530(40)	8669(9)	310(30)
C(70)	2314(11)	495(11)	8132(8)	84(4)
C(71)	3641(11)	3169(11)	9171(7)	74(4)
P(1)	0	0	0	69(2)
F(1)	-1046(13)	-1228(13)	-14(9)	241(8)
F(2)	799(12)	-604(13)	-46(8)	206(6)
F(3)	-215(13)	-96(18)	-871(10)	357(17)
P(2)	0	0	5000	75(3)
F(4)	1315(16)	1124(15)	5014(12)	235(6)
F(5)	-592(14)	837(12)	4936(9)	208(6)
F(6)	-140(30)	-208(16)	4440(20)	340(20)
Tc(2)	6561(2)	3436(2)	2497(2)	165(1)
O(3)	7958(14)	3916(19)	2986(15)	247(9)
O(4)	6210(20)	2154(16)	2007(13)	269(11)
O(5)	6260(30)	4111(18)	1777(14)	360(20)
O(6)	5906(19)	3850(30)	3187(14)	291(12)

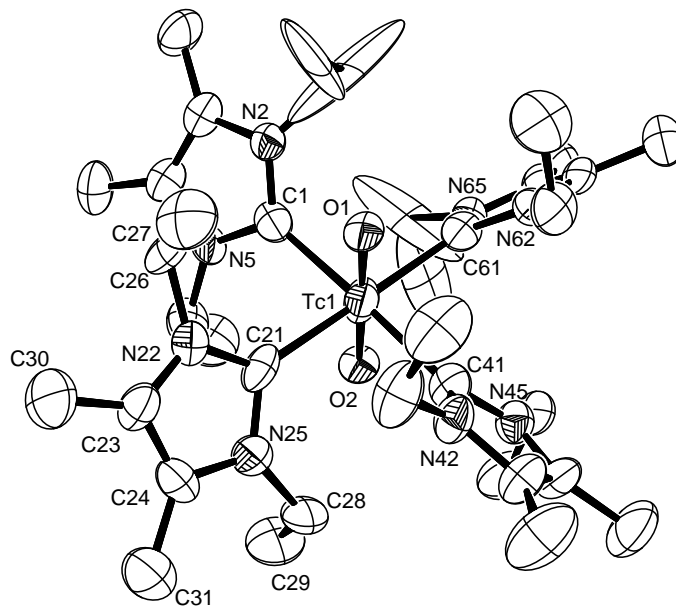


Abbildung 6.5: Ellipsoiddarstellung des $[\text{TcO}(\text{OH})(\text{L}^{\text{Et}})_4]^{2+}$ -Kations. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Aus Gründen der Übersichtlichkeit sind nur die Kohlenstoffatome des Imidazolringes mit C21 vollständig benannt. Das in diesem Ring verwendete Schema gilt in gleicher Weise auch für die anderen Liganden.

6.1.6 [TcN(L^{Et})₄]Cl₂

 Tabelle 6.11: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von [TcN(L^{Et})₄]Cl₂.

Summenformel	C ₃₆ H ₆₄ Cl ₂ N ₉ Tc	
M (g/mol)	791.87	
Messtemperatur	293(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Monoklin, P2 ₁ /n	
Elementarzelle	a= 11.498(2) Å	α= 90°
	b= 28.649(5) Å	β= 94.87(2)°
	c= 14.131(2) Å	γ= 90°
Volumen	4638(1) Å ³	
Z	4	
Berechnete Dichte	1.134 g/cm ³	
Linearer Absorptionskoeffizient	0.458 mm ⁻¹	
F(000)	1680	
Kristallgröße	0.2 x 0.1 x 0.1 mm ³	
Theta-Bereich	3.06 – 26.00°	
Indizes	-1 ≤ h ≤ 14, 0 ≤ k ≤ 35, -17 ≤ l ≤ 17	
Zahl der gemessenen Reflexe	10557	
Zahl der unabhängigen Reflexe	9012 [R(int)= 0.0335]	
Absorptionskorrektur	keine	
Zahl der verfeinerten Parameter	469	
Goof	0.933	
R ₁ / wR ₂ [I > 2σ(I)]	R1= 0.0588, wR2= 0.1611	
R ₁ / wR ₂ (alle Reflexe)	R1= 0.1059, wR2= 0.1984	
Restelektronendichte	1.093 und -0.415 e · Å ⁻³	
Diffraktometer	CAD4, Enraf-Nonius	
Programm zur Strukturlösung	SHELXS 97 [141]	

Tabelle 6.12: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) von $[\text{TcN}(\text{L}^{\text{Et}})_4]\text{Cl}_2$.

	x	y	z	E(eq)
Tc	2289(1)	1564(1)	2562(1)	32(1)
N(10)	2363(4)	1957(1)	3374(3)	41(1)
C(1)	3551(4)	1846(2)	1633(3)	38(1)
N(2)	3790(4)	2304(1)	1511(3)	41(1)
C(3)	4697(5)	2355(2)	898(4)	50(1)
C(4)	4987(5)	1929(2)	641(4)	53(1)
N(5)	4292(4)	1622(1)	1088(3)	42(1)
C(6)	3165(5)	2702(2)	1854(4)	48(1)
C(7)	2321(6)	2914(2)	1087(5)	62(2)
C(8)	4351(5)	1109(2)	953(4)	51(1)
C(9)	5439(6)	893(2)	1402(5)	69(2)
C(10)	5199(6)	2823(2)	691(5)	67(2)
C(11)	5830(7)	1784(3)	-55(6)	80(2)
C(21)	3621(4)	1087(2)	3153(3)	34(1)
N(22)	4573(4)	1193(1)	3769(3)	43(1)
C(23)	5241(5)	800(2)	4013(4)	51(1)
C(24)	4716(5)	442(2)	3548(4)	50(1)
N(25)	3726(4)	619(1)	3033(3)	40(1)
C(26)	4930(5)	1658(2)	4105(5)	56(2)
C(27)	5838(6)	1871(2)	3554(6)	74(2)
C(28)	2885(5)	329(2)	2444(4)	48(1)
C(29)	2186(6)	12(2)	3030(5)	64(2)
C(30)	6290(6)	810(3)	4687(5)	76(2)
C(31)	5098(6)	-61(2)	3488(6)	74(2)
C(41)	1001(4)	1105(2)	3141(3)	37(1)
N(42)	870(4)	1039(2)	4080(3)	42(1)
C(43)	-87(5)	746(2)	4202(4)	54(1)
C(44)	-533(5)	620(2)	3326(4)	55(1)
N(45)	135(4)	848(2)	2683(3)	44(1)
C(46)	1643(5)	1196(2)	4895(4)	49(1)
C(47)	2490(6)	837(2)	5272(4)	60(2)

Kristallographischer Anhang

	x	y	z	E(eq)
C(48)	-62(5)	782(2)	1656(4)	55(1)
C(49)	-1177(6)	1018(3)	1241(6)	80(2)
C(50)	-495(6)	619(3)	5147(5)	74(2)
C(51)	-1491(6)	284(3)	3031(6)	87(2)
C(61)	921(4)	1863(2)	1586(3)	38(1)
N(62)	94(4)	2173(2)	1777(3)	43(1)
C(63)	-612(5)	2291(2)	965(4)	50(1)
C(64)	-233(5)	2048(2)	252(4)	48(1)
N(65)	723(4)	1792(2)	628(3)	40(1)
C(66)	-101(6)	2371(2)	2707(4)	62(2)
C(67)	-1048(7)	2113(3)	3170(5)	92(3)
C(68)	1430(5)	1494(2)	50(4)	51(1)
C(69)	2152(6)	1774(2)	-596(4)	63(2)
C(70)	-1582(6)	2635(3)	970(5)	71(2)
C(71)	-736(6)	2001(3)	-759(4)	66(2)
Cl(1)*	50(7)	1174(2)	7392(3)	135(2)
Cl(2)*	4946(6)	1343(2)	6946(6)	147(3)
Cl(3)**	7265(13)	1177(5)	8024(14)	163(5)
Cl(4)**	-227(15)	502(5)	8944(11)	170(6)
Cl(5)**	6310(20)	533(5)	9216(10)	238(12)
Cl(6)**	2020(20)	255(5)	9991(12)	214(10)

* Die Positionen dieser Atome sind nur zu 50% besetzt.

** Die Positionen dieser Atome sind nur zu 25% besetzt.

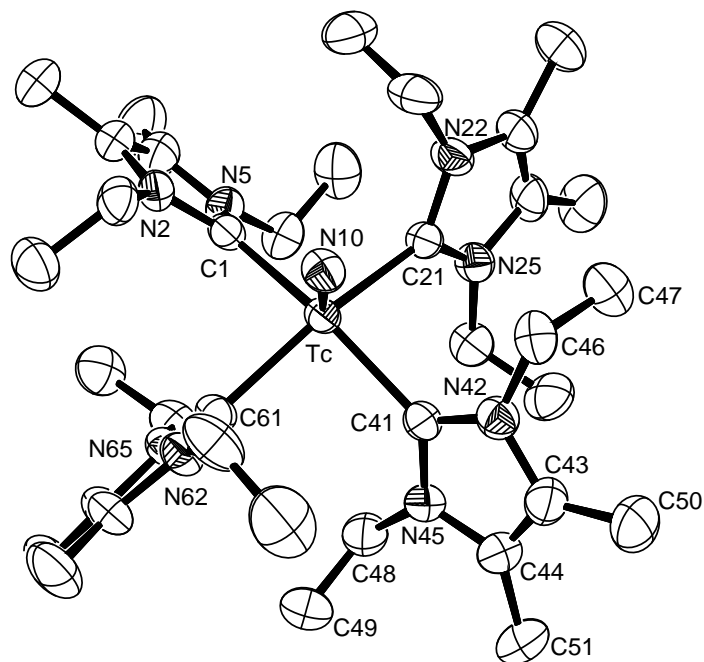


Abbildung 6.6: Ellipsoiddarstellung des $[\text{TcN}(\text{L}^{\text{Et}})_4]^{2+}$ -Kations. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Aus Gründen der Übersichtlichkeit sind nur die Kohlenstoffatome des Imidazolringes mit C41 vollständig benannt. Das in diesem Ring verwendete Schema gilt in gleicher Weise auch für die anderen Liganden.

6.1.7 [TcCl₂(L^{Et})₄]Cl

 Tabelle 6.13: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von [TcCl₂(L^{Et})₄]Cl.

Summenformel	C ₃₆ H ₆₄ Cl ₃ N ₈ Tc	
M (g/mol)	813.30	
Messtemperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Tetragonal, I $\bar{4}$ 2d	
Elementarzelle	a= 19.965(1) Å	$\alpha = 90^\circ$
	b= 19.965(1) Å	$\beta = 90^\circ$
	c= 22.368(1) Å	$\gamma = 90^\circ$
Volumen	8915.8(7) Å ³	
Z	8	
Berechnete Dichte	1.212 g/cm ³	
Linearer Absorptionskoeffizient	0.535 mm ⁻¹	
F(000)	3440	
Kristallgröße	0.71 x 0.55 x 0.35 mm ³	
Theta-Bereich	1.37 – 26.73°	
Indizes	-25 ≤ h ≤ 25, -25 ≤ k ≤ 19, -28 ≤ l ≤ 28	
Zahl der gemessenen Reflexe	34576	
Zahl der unabhängigen Reflexe	4735 [R(int)= 0.1118]	
Absorptionskorrektur	keine	
Zahl der verfeinerten Parameter	219	
Goof	0.979	
R ₁ / wR ₂ [I > 2σ(I)]	R1= 0.0419, wR2= 0.1194	
R ₁ / wR ₂ (alle Reflexe)	R1= 0.0488, wR2= 0.1288	
Restelektronendichte	1.804 und -0.957 e · Å ⁻³	
Diffraktometer	IPDS, STOE	
Programm zur Strukturlösung	SHELXS 86 [141]	

Tabelle 6.14: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) von $[\text{TcCl}_2(\text{L}^{\text{Et}})_4]\text{Cl}$.

	x	y	z	E(eq)
Tc(1)	2402(1)	2500	1250	20(1)
Cl(1)	2385(1)	1462(1)	1750(1)	29(1)
C(1)	1626(2)	2888(2)	1867(2)	23(1)
N(2)	1617(2)	2855(2)	2482(1)	26(1)
C(3)	1058(2)	3170(2)	2720(2)	32(1)
C(4)	687(2)	3396(2)	2250(2)	29(1)
N(5)	1047(2)	3222(2)	1736(2)	25(1)
C(6)	2104(2)	2507(3)	2869(2)	33(1)
C(7)	1811(3)	1870(3)	3132(2)	51(1)
C(8)	796(2)	3383(2)	1140(2)	27(1)
C(9)	807(3)	4136(2)	1017(2)	39(1)
C(10)	955(2)	3278(3)	3374(2)	43(1)
C(11)	25(2)	3735(2)	2244(2)	38(1)
C(21)	3212(2)	2860(2)	1848(2)	25(1)
N(22)	3793(2)	2542(2)	2004(1)	28(1)
C(23)	4209(2)	2947(2)	2347(2)	34(1)
C(24)	3893(2)	3541(2)	2410(2)	29(1)
N(25)	3285(2)	3477(2)	2108(2)	26(1)
C(26)	3976(2)	1844(2)	1877(2)	37(1)
C(27)	3907(4)	1404(3)	2435(3)	63(2)
C(28)	2791(2)	4028(2)	2105(2)	31(1)
C(29)	3025(3)	4639(2)	1757(3)	45(1)
C(30)	4896(2)	2742(3)	2548(3)	51(1)
C(31)	4097(3)	4143(2)	2748(2)	39(1)
Cl(2)	2500	4143(1)	-6250	33(1)

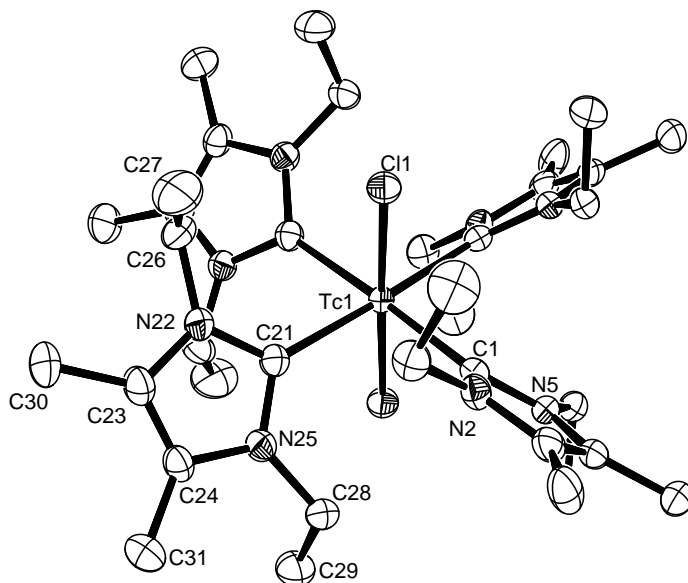


Abbildung 6.7: Ellipsoiddarstellung des $[\text{TcCl}_2(\text{L}^{\text{Et}})_4]^+$ -Kations. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Aus Gründen der Übersichtlichkeit sind nur die Kohlenstoffatome des Imidazolringes mit C21 vollständig benannt. Das in diesem Ring verwendete Schema gilt in gleicher Weise auch für die anderen Liganden.

6.1.8 [TcN(L^{Et})₂(OSiMe₂OSiMe₂O)]Tabelle 6.15: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von [TcN(L^{Et})₂(OSiMe₂OSiMe₂O)].

Summenformel	C ₂₂ H ₄₄ N ₅ O ₃ Si ₂ Tc	
M (g/mol)	580.80	
Messtemperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Monoklin, P2 ₁ /n	
Elementarzelle	a= 10.057(2) Å	α= 90°
	b= 18.112(3) Å	β= 95.44(1)°
	c= 15.597(3) Å	γ= 90°
Volumen	2828.2(9) Å ³	
Z	4	
Berechnete Dichte	1.364 g/cm ³	
Linearer Absorptionskoeffizient	0.625 mm ⁻¹	
F(000)	1224	
Kristallgröße	0.58 x 0.43 x 0.43 mm ³	
Theta-Bereich	2.25 – 30.55°	
Indizes	-14 ≤ h ≤ 14, -25 ≤ k ≤ 25, -19 ≤ l ≤ 22	
Zahl der gemessenen Reflexe	34332	
Zahl der unabhängigen Reflexe	8631 [R(int)= 0.0228]	
Absorptionskorrektur	keine	
Zahl der verfeinerten Parameter	298	
Goof	1.071	
R ₁ / wR ₂ [I > 2σ(I)]	R1= 0.0296, wR2= 0.0790	
R ₁ / wR ₂ (alle Reflexe)	R1= 0.0360, wR2= 0.0842	
Restelektronendichte	0.741 und -0.768 e · Å ⁻³	
Diffraktometer	CCD, Bruker SMART	
Programm zur Strukturlösung	SHELXS 97 [141]	

Tabelle 6.16: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) von $[\text{TcN}(\text{L}^{\text{Et}})_2(\text{OSiMe}_2\text{OSiMe}_2\text{O})]$.

	x	y	z	E(eq)
Tc	4848(1)	670(1)	7003(1)	13(1)
N(10)	3520(2)	333(1)	6476(1)	19(1)
C(1)	5031(2)	-101(1)	8035(1)	15(1)
N(2)	4243(2)	-679(1)	8224(1)	16(1)
C(3)	4702(2)	-1008(1)	9013(1)	18(1)
C(4)	5799(2)	-628(1)	9322(1)	18(1)
N(5)	5988(2)	-76(1)	8716(1)	16(1)
C(6)	2975(2)	-893(1)	7755(1)	20(1)
C(7)	1791(2)	-529(1)	8126(1)	26(1)
C(8)	7079(2)	459(1)	8811(1)	21(1)
C(9)	8422(2)	123(1)	8658(2)	31(1)
C(10)	4059(2)	-1671(1)	9364(1)	25(1)
C(11)	6671(2)	-722(1)	10144(1)	25(1)
C(21)	6376(2)	130(1)	6377(1)	16(1)
N(22)	6351(2)	-516(1)	5927(1)	17(1)
C(23)	7626(2)	-707(1)	5711(1)	19(1)
C(24)	8468(2)	-172(1)	6034(1)	20(1)
N(25)	7684(2)	345(1)	6425(1)	18(1)
C(26)	5177(2)	-986(1)	5716(1)	20(1)
C(27)	5147(2)	-1634(1)	6337(1)	25(1)
C(28)	8213(2)	1062(1)	6727(1)	22(1)
C(29)	8416(2)	1575(1)	5980(2)	29(1)
C(30)	7886(2)	-1385(1)	5207(1)	24(1)
C(31)	9956(2)	-111(1)	6067(1)	27(1)
O(1)	5387(1)	1606(1)	6368(1)	19(1)
Si(1)	5121(1)	2465(1)	6535(1)	18(1)
O(3)	3738(1)	2584(1)	7013(1)	21(1)

	x	y	z	E(eq)
Si(2)	3408(1)	2075(1)	7847(1)	16(1)
O(2)	4429(1)	1391(1)	7966(1)	18(1)
C(46)	6518(2)	2900(1)	7239(2)	34(1)
C(47)	4913(2)	2982(1)	5491(1)	27(1)
C(48)	3616(2)	2678(1)	8822(1)	23(1)
C(49)	1633(2)	1767(1)	7641(1)	26(1)

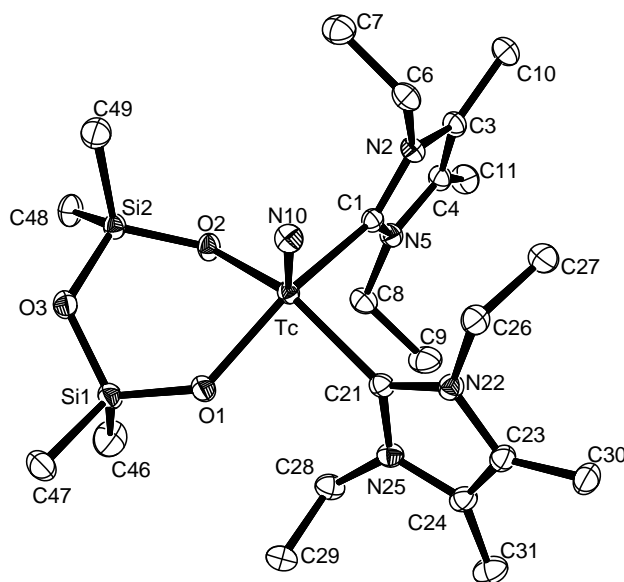


Abbildung 6.8: Ellipsoiddarstellung von $[\text{TcN}(\text{L}^{\text{Et}})_2(\text{OSiMe}_2\text{OSiMe}_2\text{O})]$. Die Schwingungselipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit.

6.1.9 [TcN(L^{Et})(PMe₂Ph)(OSiMe₂OSiMe₂O)]

 Tabelle 6.17: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von [TcN(L^{Et})(PMe₂Ph)(OSiMe₂OSiMe₂O)].

Summenformel	C ₂₁ H ₃₉ N ₃ O ₃ PSi ₂ Tc	
M (g/mol)	566.70	
Messtemperatur	293(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Monoklin, P2 ₁ /n	
Elementarzelle	a= 9.294(2) Å	α= 90°
	b= 35.556(7) Å	β= 115.40(1)°
	c= 9.554(1) Å	γ= 90°
Volumen	2852.0(9) Å ³	
Z	4	
Berechnete Dichte	1.320 g/cm ³	
Linearer Absorptionskoeffizient	0.669 mm ⁻¹	
F(000)	1184	
Kristallgröße	0.5 x 0.45 x 0.4 mm ³	
Theta-Bereich	3.34 – 24.99°	
Indizes	-1 ≤ h ≤ 11, 0 ≤ k ≤ 42, -11 ≤ l ≤ 10	
Zahl der gemessenen Reflexe	5670	
Zahl der unabhängigen Reflexe	4794 [R(int)= 0.1107]	
Absorptionskorrektur	keine	
Zahl der verfeinerten Parameter	280	
Goof	0.863	
R ₁ / wR ₂ [I > 2σ(I)]	R1= 0.0602, wR2= 0.1325	
R ₁ / wR ₂ (alle Reflexe)	R1= 0.1452, wR2= 0.1997	
Restelektronendichte	0.665 und -0.719 e · Å ⁻³	
Diffraktometer	CAD4, Enraf-Nonius	
Programm zur Strukturlösung	SHELXS 97 [141]	

Tabelle 6.18: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) von $[\text{TcN}(\text{L}^{\text{Et}})(\text{PMe}_2\text{Ph})(\text{OSiMe}_2\text{OSiMe}_2\text{O})]$.

	x	y	z	E(eq)
Tc	3799(1)	1199(1)	5578(1)	47(1)
N(10)	4960(11)	1217(3)	4764(10)	76(3)
P	5424(3)	754(1)	7454(3)	61(1)
C(21)	4814(12)	712(3)	9014(11)	59(3)
C(22)	5622(13)	892(3)	10414(13)	72(3)
C(23)	5050(15)	888(4)	11537(14)	83(4)
C(24)	3652(17)	706(4)	11259(16)	88(4)
C(25)	2812(18)	528(4)	9848(17)	94(4)
C(26)	3358(14)	531(3)	8738(14)	79(3)
C(27)	5349(17)	279(3)	6711(14)	97(4)
C(28)	7536(12)	862(4)	8371(14)	93(4)
C(1)	4633(10)	1639(2)	7142(10)	45(2)
N(2)	5855(8)	1891(2)	7470(9)	53(2)
C(3)	5957(12)	2129(3)	8648(12)	60(3)
C(4)	4822(11)	2041(3)	9067(11)	56(2)
N(5)	4018(8)	1737(2)	8143(9)	47(2)
C(6)	6838(12)	1905(3)	6630(15)	74(3)
C(7)	6072(15)	2130(4)	5161(16)	92(4)
C(8)	2645(10)	1552(3)	8198(11)	53(2)
C(9)	1143(12)	1781(3)	7428(13)	70(3)
C(10)	7222(13)	2439(3)	9275(16)	88(4)
C(11)	4490(15)	2191(4)	10367(14)	85(4)
O(2)	1835(7)	1536(2)	4498(7)	56(2)
Si(2)	379(3)	1495(1)	2848(3)	50(1)
O(3)	-249(8)	1057(2)	2524(7)	68(2)
Si(1)	404(4)	714(1)	3770(4)	70(1)
O(1)	2221(8)	765(2)	4907(8)	75(2)
C(46)	-1296(13)	1790(4)	2781(14)	82(4)
C(47)	872(15)	1623(3)	1223(13)	79(3)
C(48)	-756(19)	703(6)	4940(20)	145(8)
C(49)	86(18)	285(4)	2607(18)	125(6)

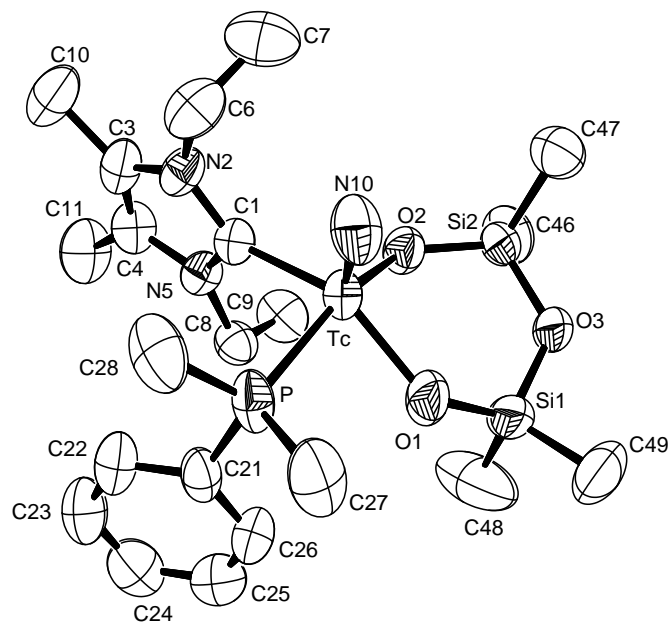


Abbildung 6.9: Ellipsoiddarstellung von $[\text{TcN}(\text{L}^{\text{Et}})(\text{PMe}_2\text{Ph})(\text{OSiMe}_2\text{OSiMe}_2\text{O})]$. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit.

6.2 Re-Komplexe

6.2.1 $[\text{ReO}_2(\text{L}^{\text{i-Pr}})_4][\text{ReO}_4] \cdot 1.5 \text{ THF}$

Tabelle 6.19: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von $[\text{ReO}_2(\text{L}^{\text{i-Pr}})_4][\text{ReO}_4] \cdot 1.5 \text{ THF}$.

Summenformel	$\text{C}_{50}\text{H}_{92}\text{N}_8\text{O}_{7.5}\text{Re}_2$	
M (g/mol)	1297.72	
Messtemperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Triklin, $\text{P}\bar{1}$	
Elementarzelle	a= 12.311(5) Å	$\alpha = 100.403(5)^\circ$
	b= 16.525(5) Å	$\beta = 97.834(5)^\circ$
	c= 16.743(5) Å	$\gamma = 106.272(5)^\circ$
Volumen	3152(2) Å ³	
Z	2	
Berechnete Dichte	1.367 g/cm ³	
Linearer Absorptionskoeffizient	3.885 mm ⁻¹	
F(000)	1316	
Kristallgröße	0.17 x 0.25 x 0.42 mm ³	
Theta-Bereich	1.26 – 30.56°	
Indizes	-16 ≤ h ≤ 17, -23 ≤ k ≤ 23, -23 ≤ l ≤ 23	
Zahl der gemessenen Reflexe	39568	
Zahl der unabhängigen Reflexe	18931 [R(int)= 0.0213]	
Absorptionskorrektur	semiempirisch (SADABS)	
$T_{\text{min}}, T_{\text{max}}$	0.798197, 1	
Zahl der verfeinerten Parameter	686	
Goof	1.095	
R_1 / wR_2 [I > 2σ(I)]	R1= 0.0370, wR2= 0.1117	
R_1 / wR_2 (alle Reflexe)	R1= 0.0483, wR2= 0.1187	
Restelektronendichte	2.888 und -0.719 e · Å ⁻³	
Diffraktometer	CCD, Bruker SMART	
Programm zur Strukturlösung	SIR 97 [140]	

Tabelle 6.20: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) von $[\text{ReO}_2(\text{L}^{\text{i-Pr}})_4][\text{ReO}_4] \cdot 1.5 \text{ THF}$.

	x	y	z	E(eq)
Re(1)	7700(1)	1861(1)	7501(1)	20(1)
O(1)	6462(2)	1422(2)	6667(2)	29(1)
O(2)	8925(2)	2295(2)	8328(2)	31(1)
C(1)	8475(3)	2889(2)	6868(2)	25(1)
N(2)	8389(3)	2838(2)	6035(2)	26(1)
C(3)	9014(4)	3620(3)	5874(3)	35(1)
C(4)	9513(4)	4175(3)	6624(3)	40(1)
N(5)	9160(3)	3723(2)	7225(2)	30(1)
C(6)	9102(5)	3804(3)	5040(3)	54(1)
C(7)	10304(6)	5095(3)	6790(4)	66(2)
C(8)	7734(3)	2049(2)	5387(2)	29(1)
C(9)	8513(4)	1645(3)	4929(3)	41(1)
C(10)	6790(4)	2198(3)	4805(3)	44(1)
C(11)	9478(4)	4092(3)	8133(3)	37(1)
C(12)	10769(5)	4301(3)	8460(3)	51(1)
C(13)	9036(5)	4856(3)	8388(3)	51(1)
C(21)	6823(3)	2713(2)	8153(2)	24(1)
N(22)	6084(3)	3101(2)	7805(2)	31(1)
C(23)	5703(4)	3580(3)	8418(3)	40(1)
C(24)	6210(4)	3499(3)	9154(3)	39(1)
N(25)	6891(3)	2962(2)	8988(2)	29(1)
C(26)	4846(6)	4067(4)	8255(4)	65(2)
C(27)	6112(6)	3919(4)	10008(3)	63(2)
C(28)	5759(4)	3027(3)	6899(3)	35(1)
C(29)	4488(4)	2534(4)	6554(4)	55(1)
C(30)	6163(5)	3900(3)	6666(3)	51(1)
C(31)	7584(3)	2683(3)	9613(2)	31(1)
C(32)	6853(4)	2141(3)	10111(3)	43(1)
C(33)	8580(5)	3449(3)	10162(3)	50(1)
C(41)	6948(3)	835(2)	8150(2)	24(1)

	x	y	z	E(eq)
N(42)	5816(3)	474(2)	8167(2)	27(1)
C(43)	5682(4)	-139(3)	8656(3)	36(1)
C(44)	6752(4)	-140(3)	8967(3)	38(1)
N(45)	7515(3)	444(2)	8639(2)	30(1)
C(46)	4534(5)	-671(4)	8802(4)	57(1)
C(47)	7080(6)	-639(4)	9576(4)	62(2)
C(48)	4858(3)	714(3)	7732(2)	32(1)
C(49)	4138(4)	1043(4)	8310(3)	47(1)
C(50)	4107(4)	-27(3)	6998(3)	48(1)
C(51)	8791(4)	609(3)	8785(3)	37(1)
C(52)	9122(5)	-187(4)	8449(3)	50(1)
C(53)	9362(5)	1021(4)	9700(3)	54(1)
C(61)	8585(3)	1010(2)	6866(2)	25(1)
N(62)	8106(3)	176(2)	6405(2)	27(1)
C(63)	8967(4)	-158(3)	6141(3)	36(1)
C(64)	9983(4)	474(3)	6449(3)	36(1)
N(65)	9745(3)	1187(2)	6884(2)	29(1)
C(66)	8764(5)	-1065(3)	5652(4)	53(1)
C(67)	11161(4)	390(4)	6415(4)	54(1)
C(68)	6850(3)	-296(2)	6204(2)	30(1)
C(69)	6361(4)	-427(3)	5279(3)	46(1)
C(70)	6548(4)	-1130(3)	6513(3)	45(1)
C(71)	10617(3)	2040(3)	7286(3)	35(1)
C(72)	11207(4)	2494(4)	6676(4)	53(1)
C(73)	11476(5)	1977(4)	8009(4)	55(1)
Re(2A)*	8989(2)	1938(1)	12407(1)	55(1)
Re(2B)*	9236(9)	2030(3)	12371(2)	57(1)
O(3)	8399(6)	1001(5)	11727(5)	127(3)
O(4)	10302(9)	1943(6)	12926(7)	216(6)
O(5)	9314(7)	2760(5)	11856(5)	131(3)
O(6)	8142(11)	2116(6)	13033(5)	190(5)
O(81)**	3377(18)	3553(10)	4777(14)	169(9)

	x	y	z	E(eq)
C(82)**	2290(30)	3647(17)	5068(15)	176(15)
C(83)**	2190(20)	4409(15)	4984(17)	140(10)
C(84)**	2096(16)	4113(12)	4252(15)	102(6)
C(85)**	2946(16)	3766(13)	3980(11)	93(5)
O(86)**	3101(13)	3494(12)	203(10)	126(5)
C(87)**	3290(20)	2926(13)	540(20)	153(13)
C(88)**	2670(30)	2890(17)	1239(17)	167(13)
C(89)**	2230(30)	3420(20)	1300(17)	204(19)
C(90)**	2200(20)	3580(20)	484(13)	139(10)
O(91)**	6417(16)	3409(11)	12189(9)	142(6)
C(92)**	5830(19)	2926(13)	12775(13)	112(7)
C(93)**	5920(30)	3650(20)	13379(14)	183(16)
C(94)**	5843(19)	4307(13)	13017(10)	100(6)
C(95)**	6303(14)	4192(9)	12350(10)	76(4)

* Diese Atome befinden sich zu 50% auf fehlgeordneten Positionen.

** Die Positionen dieser Atome sind nur zu 50% besetzt.

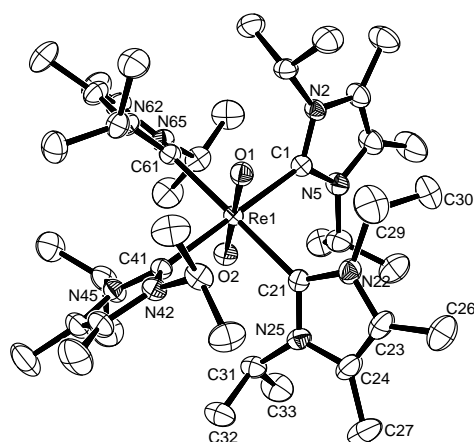


Abbildung 6.10: Ellipsoiddarstellung des $[\text{ReO}_2(\text{L}^{\text{i-Pr}})_4]^+$ -Kations. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Aus Gründen der Übersichtlichkeit sind nur die Kohlenstoffatome des Imidazolringes mit C21 vollständig benannt. Das in diesem Ring verwendete Schema gilt in gleicher Weise auch für die anderen Liganden.

6.2.2 $[\text{ReNCl}(\text{L}^{\text{Et}})_4]\text{Cl} \cdot \text{C}_6\text{H}_6$ Tabelle 6.21: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von $[\text{ReNCl}(\text{L}^{\text{Et}})_4]\text{Cl} \cdot \text{C}_6\text{H}_6$.

Summenformel	$\text{C}_{42}\text{H}_{70}\text{Cl}_2\text{N}_9\text{Re}$	
M (g/mol)	958.17	
Messtemperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Tetragonal, $\bar{I}42d^*$	
Elementarzelle	a= 20.012(1) Å	$\alpha = 90^\circ$
	b= 20.012(1) Å	$\beta = 90^\circ$
	c= 22.580(1) Å	$\gamma = 90^\circ$
Volumen	9042.3(4) Å ³	
Z	8	
Berechnete Dichte	1.408 g/cm ³	
Linearer Absorptionskoeffizient	2.845 mm ⁻¹	
F(000)	3952	
Kristallgröße	0.08 x 0.06 x 0.05 mm ³	
Theta-Bereich	3.54 – 29.27°	
Indizes	$-27 \leq h \leq 27, -27 \leq k \leq 22, -30 \leq l \leq 30$	
Zahl der gemessenen Reflexe	43246	
Zahl der unabhängigen Reflexe	6049 [R(int)= 0.0871]	
Absorptionskorrektur	numerisch (Integration)	
T_{min}, T_{max}	0.6309, 0.7647	
Zahl der verfeinerten Parameter	276	
Goof	1.034	
R_1 / wR_2 [$I > 2\sigma(I)$]	$R_1 = 0.0300, wR_2 = 0.0610$	
R_1 / wR_2 (alle Reflexe)	$R_1 = 0.0361, wR_2 = 0.0625$	
Flack-Parameter	0.013(8)	
Restelektronendichte	0.584 und -1.078 e · Å ⁻³	
Diffraktometer	IPDS, STOE	
Programm zur Strukturlösung	SIR 97 [140]	

* Das es sich hier bei um die richtige Raumgruppe handelt wurde durch Strukturlösung und -verfeinerung in der nicht-isomorphen Raumgruppe $\bar{I}4$ überprüft.

Tabelle 6.22: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) von $[\text{ReNCl}(\text{L}^{\text{Et}})_4]\text{Cl} \cdot \text{C}_6\text{H}_6$.

	x	y	z	E(eq)
Re(1)	2500	7641(1)	8750	23(1)
N(10)*	1747(2)	7658(2)	8389(2)	9(1)
Cl(1)*	1404(1)	7655(1)	8232(1)	56(1)
C(1)	2855(2)	6851(2)	8154(2)	24(1)
N(2)	3464(2)	6780(2)	7892(1)	25(1)
C(3)	3504(2)	6194(2)	7564(2)	30(1)
C(4)	2917(2)	5881(2)	7620(2)	35(1)
N(5)	2520(2)	6287(1)	7976(1)	29(1)
C(6)	4024(2)	7252(2)	7930(2)	31(1)
C(7)	4571(2)	6997(3)	8338(3)	58(2)
C(8)	1811(2)	6129(2)	8104(2)	37(1)
C(9)	1362(3)	6305(5)	7587(3)	71(2)
C(10)	4104(2)	6006(2)	7207(2)	40(1)
C(11)	2684(3)	5220(2)	7384(2)	53(1)
C(21)	2868(2)	8411(2)	8139(2)	24(1)
N(22)	3224(2)	8975(1)	8266(2)	24(1)
C(23)	3392(2)	9323(2)	7755(2)	27(1)
C(24)	3153(2)	8967(2)	7297(2)	29(1)
N(25)	2834(2)	8413(1)	7536(1)	26(1)
C(26)	3409(2)	9207(2)	8855(2)	28(1)
C(27)	4144(2)	9116(3)	8981(2)	49(1)
C(28)	2470(2)	7938(2)	7159(2)	34(1)
C(29)	1798(3)	8216(3)	6965(3)	56(1)
C(30)	3739(2)	9988(2)	7760(2)	38(1)
C(31)	3249(2)	9058(2)	6646(2)	39(1)
C(41)*	4844(12)	-458(11)	867(10)	93(9)
C(42)*	4611(16)	-810(20)	1324(12)	430(50)
C(43)*	4777(12)	-276(15)	1655(14)	124(14)

	x	y	z	E(eq)
C(46)*	5110(20)	114(13)	665(8)	107(13)
C(44)*	5090(20)	316(19)	1635(15)	180(20)
C(45)*	5191(17)	580(11)	1094(10)	131(14)
Cl(21)	2500	10890(1)	8750	33(1)

* Die Positionen dieser Atome sind nur zu 50% besetzt. N10 konnte aufgrund der Fehlordnung nicht anisotrop verfeinert werden. Da es sich dabei um eine reale Fehlordnung und kein Raumgruppenproblem handelt, wurde durch Strukturlösung und -verfeinerung in der nicht-isomorphen Raumgruppe $I\bar{4}$ überprüft.

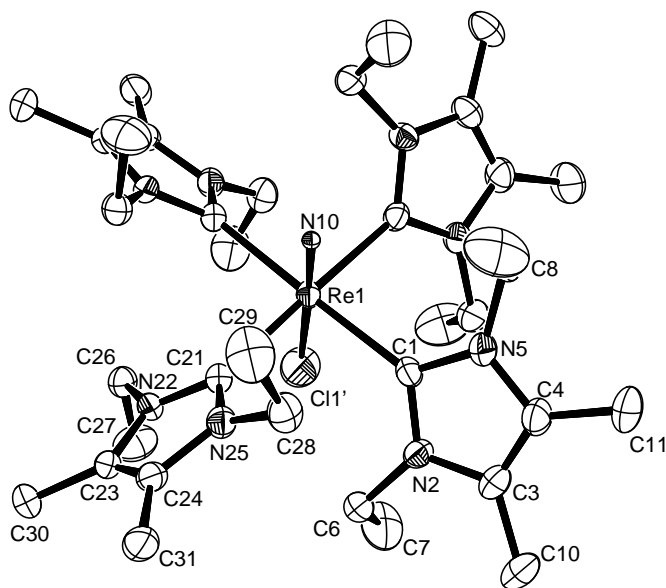


Abbildung 6.11: Ellipsoiddarstellung des $[\text{ReNCl}(\text{L}^{\text{Et}})_4]^+$ -Kations. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit.

6.2.3 $[\{\text{ReN}(\text{PMe}_2\text{Ph})_3\}\{\text{ReO}_3\text{N}\}]_2 \cdot 4\text{MeOH}$

 Tabelle 6.23: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von $[\{\text{ReN}(\text{PMe}_2\text{Ph})_3\}\{\text{ReO}_3\text{N}\}]_2 \cdot 4\text{MeOH}$.

Summenformel	$\text{C}_{52}\text{H}_{82}\text{N}_4\text{O}_{10}\text{P}_6\text{Re}_4$	
M (g/mol)	1853.84	
Messtemperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Monoklin, $\text{P}2_1/\text{c}$	
Elementarzelle	$a = 13.220(1)$ Å	$\alpha = 90^\circ$
	$b = 21.641(1)$ Å	$\beta = 95.86(1)^\circ$
	$c = 11.394(1)$ Å	$\gamma = 90^\circ$
Volumen	$3242.7(4)$ Å ³	
Z	2	
Berechnete Dichte	1.899 g/cm ³	
Linearer Absorptionskoeffizient	7.643 mm ⁻¹	
F(000)	1784	
Kristallgröße	0.2 x 0.1 x 0.1 mm ³	
Theta-Bereich	3.12 – 29.22°	
Indizes	$-18 \leq h \leq 17, -29 \leq k \leq 29, -14 \leq l \leq 15$	
Zahl der gemessenen Reflexe	64400	
Zahl der unabhängigen Reflexe	8745 [R(int)= 0.0613]	
Absorptionskorrektur	numerisch (Integration)	
T_{min}, T_{max}	0.701, 1.000	
Zahl der verfeinerten Parameter	351	
Goof	1.039	
R_1 / wR_2 [I>2sigma(I)]	R1= 0.0260, wR2= 0.0644	
R_1 / wR_2 (alle Reflexe)	R1= 0.0304, wR2= 0.0665	
Restelektronendichte	1.178 und -2.064 e · Å ⁻³	
Diffraktometer	IPDS, STOE	
Programm zur Strukturlösung	SHELXS 97 [141]	

Tabelle 6.24: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) von $[\{\text{ReN}(\text{PMe}_2\text{Ph})_3\}\{\text{ReO}_3\text{N}\}]_2 \cdot 4\text{MeOH}$.

	x	y	z	E(eq)
Re(1)	-8966(1)	147(1)	-2498(1)	15(1)
Re(2)	-8481(1)	-408(1)	-5704(1)	16(1)
P(1)	-9610(1)	-896(1)	-2159(1)	18(1)
P(2)	-8525(1)	1201(1)	-3073(1)	19(1)
P(3)	-7187(1)	-114(1)	-1898(1)	22(1)
O(1)	-8453(2)	-179(1)	-4193(2)	22(1)
O(3)	-7566(2)	9(1)	-6386(2)	28(1)
O(4)	-8205(2)	-1196(1)	-5768(2)	26(1)
N(2)	-9660(2)	-275(1)	-6463(3)	20(1)
N(10)	-9164(2)	373(1)	-1139(3)	24(1)
C(1)	-9019(2)	-1324(2)	-901(3)	21(1)
C(2)	-8834(3)	-1017(2)	174(3)	27(1)
C(3)	-8436(3)	-1334(2)	1179(4)	34(1)
C(4)	-8221(3)	-1963(2)	1111(4)	35(1)
C(5)	-8398(3)	-2269(2)	54(4)	33(1)
C(6)	-8800(3)	-1954(2)	-956(4)	26(1)
C(7)	-9609(3)	-1408(2)	-3412(3)	29(1)
C(8)	-10928(3)	-879(2)	-1837(3)	26(1)
C(11)	-7672(3)	1618(2)	-1983(3)	22(1)
C(12)	-6748(3)	1868(2)	-2244(4)	28(1)
C(13)	-6151(3)	2198(2)	-1377(4)	37(1)
C(14)	-6462(3)	2277(2)	-261(4)	38(1)
C(15)	-7377(3)	2024(2)	-5(4)	32(1)
C(16)	-7982(3)	1697(2)	-854(3)	26(1)
C(17)	-9606(3)	1726(2)	-3220(4)	29(1)
C(18)	-7975(3)	1277(2)	-4461(3)	28(1)
C(21)	-6792(2)	-922(2)	-1865(3)	24(1)
C(22)	-6448(3)	-1227(2)	-815(4)	32(1)
C(23)	-6117(3)	-1838(2)	-847(5)	42(1)
C(24)	-6114(3)	-2146(2)	-1911(5)	43(1)

	x	y	z	E(eq)
C(25)	-6454(3)	-1845(2)	-2945(5)	39(1)
C(26)	-6788(3)	-1240(2)	-2925(4)	31(1)
C(27)	-6750(3)	176(2)	-438(4)	37(1)
C(28)	-6261(3)	204(2)	-2810(4)	34(1)
O(30)	-4802(3)	-1436(2)	-5630(4)	51(1)
C(31)	-5677(4)	-1125(3)	-6108(6)	57(2)
O(40)	-4078(3)	-768(2)	-3618(4)	58(1)
C(41)	-3877(4)	-1075(3)	-2526(5)	57(1)

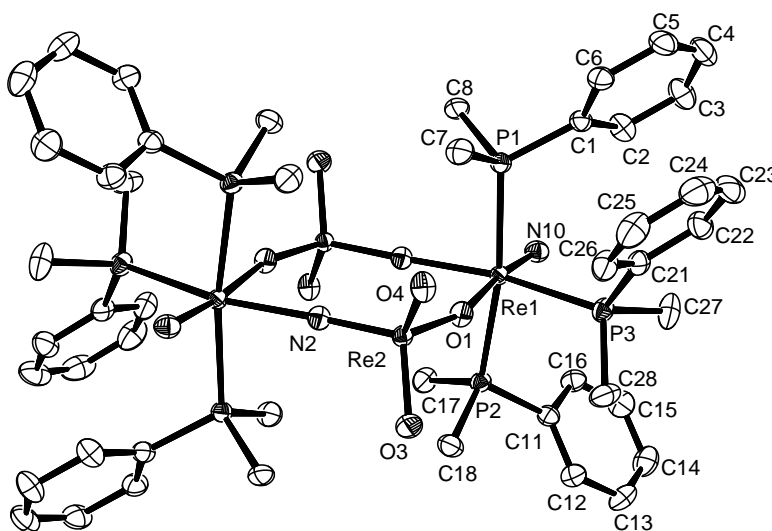


Abbildung 6.12: Ellipsoiddarstellung von $[\{\text{ReN}(\text{PMe}_2\text{Ph})_3\}\{\text{ReO}_3\text{N}\}]_2$. Die Schwingungselipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit.

6.2.4 $\{[\text{ReN}(\text{PMe}_2\text{Ph})_3]\{[\text{ReO}_3\text{N}]\}_2 \cdot 4\text{MeOH}$ (2. Modifikation)

Tabelle 6.25: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von $\{[\text{ReN}(\text{PMe}_2\text{Ph})_3]\{[\text{ReO}_3\text{N}]\}_2 \cdot 4\text{MeOH}$.

Summenformel	$\text{C}_{52}\text{H}_{82}\text{N}_4\text{O}_{10}\text{P}_6\text{Re}_4$	
M (g/mol)	1853.88	
Messtemperatur	193(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Monoklin, $\text{P}2_1/\text{c}$	
Elementarzelle	a= 16.171(2) Å	$\alpha = 90^\circ$
	b= 14.141(2) Å	$\beta = 118.83(1)^\circ$
	c= 15.816(2) Å	$\gamma = 90^\circ$
Volumen	3168.4(7) Å ³	
Z	2	
Berechnete Dichte	1.943 g/cm ³	
Linearer Absorptionskoeffizient	7.822 mm ⁻¹	
F(000)	1783	
Kristallgröße	0.1 x 0.1 x 0.1 mm ³	
Theta-Bereich	3.22 – 24.62°	
Indizes	$-18 \leq h \leq 18, -16 \leq k \leq 16, -14 \leq l \leq 18$	
Zahl der gemessenen Reflexe	12602	
Zahl der unabhängigen Reflexe	5216 [R(int)= 0.0910]	
Absorptionskorrektur	keine	
Zahl der verfeinerten Parameter	351	
Goof	1.115	
R ₁ / wR ₂ [I>2σ(I)]	R ₁ = 0.0439, wR ₂ = 0.1184	
R ₁ / wR ₂ (alle Reflexe)	R ₁ = 0.0460, wR ₂ = 0.1204	
Restelektronendichte	4.866* und -2.233 e · Å ⁻³	
Diffraktometer	IPDS, STOE	
Programm zur Strukturlösung	SHELXS 97 [141]	

* 1.025 Å vom Rheniumatom entfernt.

Tabelle 6.26: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) von $[\{\text{ReN}(\text{PMe}_2\text{Ph})_3\}\{\text{ReO}_3\text{N}\}]_2 \cdot 4\text{MeOH}$.

	x	y	z	E(eq)
Re(1)	2926(1)	206(1)	4507(1)	13(1)
Re(2)	5329(1)	-1086(1)	6288(1)	14(1)
P(1)	2724(1)	-1076(1)	3378(1)	18(1)
P(2)	3314(1)	1600(1)	5575(1)	18(1)
P(3)	2283(1)	-663(1)	5392(1)	19(1)
O(1)	4197(3)	-538(3)	5635(3)	21(1)
O(2)	5810(4)	-838(4)	7521(3)	27(1)
O(3)	5204(4)	-2296(3)	6141(4)	27(1)
N(1)	3901(4)	698(4)	4107(4)	16(1)
N(10)	1882(4)	651(4)	3698(4)	22(1)
C(1)	1752(5)	-1911(5)	3023(5)	19(1)
C(2)	846(5)	-1533(5)	2690(5)	25(2)
C(3)	78(5)	-2124(6)	2404(5)	31(2)
C(4)	216(6)	-3088(6)	2489(6)	33(2)
C(5)	1105(6)	-3469(5)	2804(6)	31(2)
C(6)	1867(5)	-2868(5)	3067(5)	26(2)
C(7)	2447(6)	-573(5)	2213(5)	29(2)
C(8)	3763(5)	-1807(5)	3730(6)	28(2)
C(11)	2367(5)	2082(5)	5774(5)	20(1)
C(12)	2545(6)	2468(5)	6637(6)	29(2)
C(13)	1806(7)	2855(6)	6755(6)	37(2)
C(14)	902(6)	2839(6)	6000(6)	40(2)
C(15)	713(6)	2480(6)	5115(6)	36(2)
C(16)	1448(5)	2093(5)	4995(6)	28(2)
C(17)	4302(5)	1461(5)	6778(5)	26(2)
C(18)	3601(6)	2626(5)	5062(6)	29(2)

	x	y	z	E(eq)
C(21)	2779(5)	-386(5)	6673(5)	23(2)
C(22)	3632(5)	-766(6)	7345(5)	28(2)
C(23)	4017(7)	-533(7)	8312(6)	40(2)
C(24)	3567(8)	80(7)	8611(7)	45(2)
C(25)	2704(8)	458(6)	7960(6)	41(2)
C(26)	2294(6)	227(5)	6986(6)	33(2)
C(27)	1018(5)	-507(7)	4890(6)	35(2)
C(28)	2441(7)	-1952(5)	5430(6)	39(2)
O(30)	1553(5)	-5473(5)	4220(5)	53(2)
C(31)	972(8)	-5070(8)	4540(8)	57(3)
O(40)	3401(5)	86(4)	676(4)	38(1)
C(41)	3748(7)	-867(5)	765(6)	40(2)

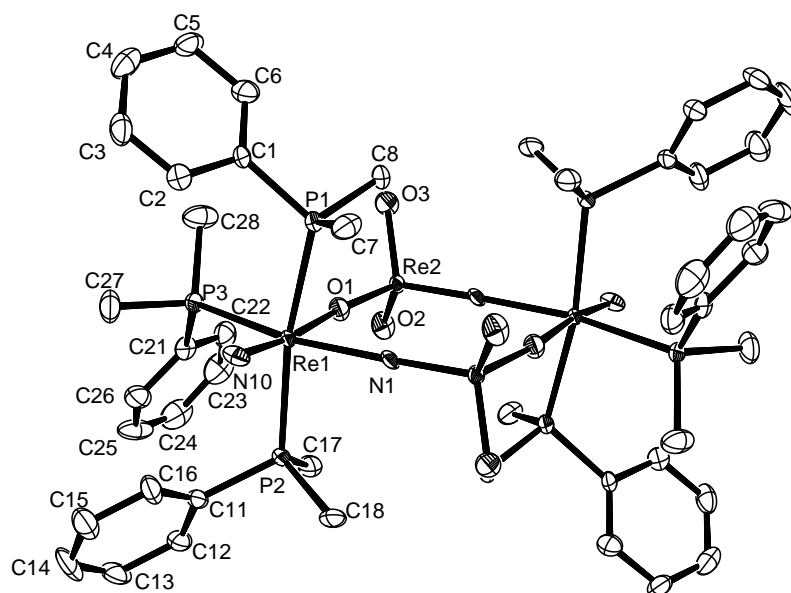


Abbildung 6.13: Ellipsoiddarstellung des $[\{\text{ReN}(\text{PMe}_2\text{Ph})_3\}\{\text{ReO}_3\text{N}\}]_2$ (2. Modifikation). Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit.

6.2.5 $[\{\text{ReN}(\text{PMe}_2\text{Ph})_3\}\{\text{ReO}_3\text{N}\}]_2 \cdot 3\text{MeOH} \cdot \text{H}_2\text{O}$

 Tabelle 6.27: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von $[\{\text{ReN}(\text{PMe}_2\text{Ph})_3\}\{\text{ReO}_3\text{N}\}]_2 \cdot 3\text{MeOH} \cdot \text{H}_2\text{O}$.

Summenformel	$\text{C}_{51}\text{H}_{78}\text{N}_4\text{O}_{10}\text{P}_6\text{Re}_4$	
M (g/mol)	1837.21	
Messtemperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Orthorhombisch, Pbc _a	
Elementarzelle	a= 23.767(2) Å	$\alpha = 90^\circ$
	b= 21.458(2) Å	$\beta = 90^\circ$
	c= 13.019(1) Å	$\gamma = 90^\circ$
Volumen	6640(1) Å ³	
Z	4	
Berechnete Dichte	1.838 g/cm ³	
Linearer Absorptionskoeffizient	7.464 mm ⁻¹	
F(000)	3527	
Kristallgröße	0.2 x 0.2 x 0.2 mm ³	
Theta-Bereich	3.24 – 29.34°	
Indizes	0 ≤ h ≤ 32, -29 ≤ k ≤ 29, -17 ≤ l ≤ 17	
Zahl der gemessenen Reflexe	34207	
Zahl der unabhängigen Reflexe	8982 [R(int)= 0.0381]	
Absorptionskorrektur	keine	
Zahl der verfeinerten Parameter	362	
Goof	1.109	
R ₁ / wR ₂ [I > 2σ(I)]	R1= 0.0381, wR2= 0.0933	
R ₁ / wR ₂ (alle Reflexe)	R1= 0.0494, wR2= 0.0969	
Restelektronendichte	1.616 und -2.151 e · Å ⁻³	
Diffraktometer	IPDS, STOE	
Programm zur Strukturlösung	SHELXS 97 [141]	

Tabelle 6.28: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) von $[\{\text{ReN}(\text{PMe}_2\text{Ph})_3\}\{\text{ReO}_3\text{N}\}]_2 \cdot 3\text{MeOH} \cdot \text{H}_2\text{O}$.

	x	y	z	E(eq)
Re(1)	1146(1)	650(1)	-5145(1)	20(1)
Re(2)	231(1)	-212(1)	-3231(1)	22(1)
P(1)	655(1)	1585(1)	-4530(1)	25(1)
P(2)	1589(1)	-363(1)	-5541(1)	25(1)
P(3)	1371(1)	1117(1)	-6811(1)	23(1)
N(2)	670(2)	172(2)	-4069(4)	23(1)
O(2)	420(2)	386(2)	-6161(4)	30(1)
O(3)	560(2)	-902(2)	-2834(4)	34(1)
O(4)	121(2)	265(3)	-2158(4)	37(1)
N(10)	1728(2)	890(3)	-4552(4)	28(1)
C(11)	1016(3)	2314(3)	-4784(5)	28(1)
C(12)	1576(3)	2370(3)	-4435(5)	33(1)
C(13)	1868(3)	2919(4)	-4587(6)	38(2)
C(14)	1619(4)	3413(3)	-5116(6)	40(2)
C(15)	1080(4)	3365(3)	-5445(6)	40(2)
C(16)	767(3)	2820(3)	-5273(6)	35(2)
C(17)	602(4)	1591(3)	-3136(5)	38(2)
C(18)	-59(3)	1691(4)	-4956(7)	41(2)
C(21)	2328(3)	-292(3)	-5904(5)	28(1)
C(22)	2541(3)	-510(3)	-6839(5)	33(1)
C(23)	3118(3)	-410(4)	-7066(6)	40(2)
C(24)	3463(3)	-116(4)	-6380(7)	45(2)
C(25)	3252(3)	85(4)	-5453(6)	37(2)
C(26)	2691(3)	4(3)	-5214(6)	31(1)
C(27)	1259(3)	-860(4)	-6495(7)	43(2)
C(28)	1644(3)	-858(3)	-4431(6)	38(2)
C(31)	2012(3)	1577(3)	-6883(5)	27(1)
C(32)	2527(3)	1282(4)	-6952(7)	40(2)
C(33)	3029(3)	1623(4)	-7004(8)	48(2)
C(34)	3005(4)	2269(4)	-7019(7)	47(2)

	x	y	z	E(eq)
C(35)	2491(4)	2565(4)	-6975(7)	47(2)
C(36)	1992(3)	2228(3)	-6900(6)	35(2)
C(37)	1440(3)	567(3)	-7871(5)	36(2)
C(38)	831(3)	1629(3)	-7330(5)	32(1)
O(41)	4493(5)	918(5)	-4198(6)	110(4)
C(41)	4674(6)	856(7)	-5183(8)	74(3)
O(61)*	4032(8)	2000(6)	-3605(11)	73(5)
C(61)*	3643(10)	2121(11)	-4398(16)	69(6)
O(51)*	4508(4)	2802(4)	-2115(8)	30(2)

* Die Positionen dieser Atome sind nur zu 50% besetzt.

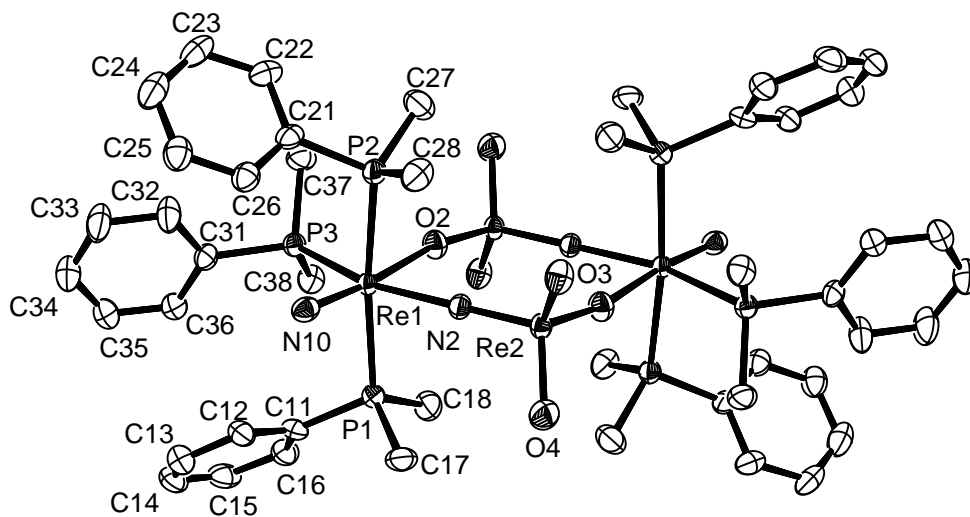


Abbildung 6.14: Ellipsoiddarstellung des Komplexmoleküls in $[\{\text{ReN}(\text{PMe}_2\text{Ph})_3\}]\{\text{ReO}_3\text{N}\}_2 \cdot 3\text{MeOH} \cdot \text{H}_2\text{O}$. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit.

6.2.6 $[\{\text{ReN}(\text{OH}_2)(\text{L}^{\text{Et}})_2\}_2\text{O}][\text{ReO}_3\text{N}]$ Tabelle 6.29: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von $[\{\text{ReN}(\text{OH}_2)(\text{L}^{\text{Et}})_2\}_2\text{O}][\text{ReO}_3\text{N}]$.

Summenformel	$\text{C}_{36}\text{H}_{64}\text{N}_{11}\text{O}_6\text{Re}_3$	
M (g/mol)	1305.58	
Messtemperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Triklin, $\text{P}\bar{1}$	
Elementarzelle	a= 9.729(1) Å	$\alpha = 76.61(1)^\circ$
	b= 10.278(2) Å	$\beta = 73.21(1)^\circ$
	c= 15.266(2) Å	$\gamma = 79.09(1)^\circ$
Volumen	1409.5(3) Å ³	
Z	1	
Berechnete Dichte	1.538 g/cm ³	
Linearer Absorptionskoeffizient	6.468 mm ⁻¹	
F(000)	630	
Kristallgröße	0.10 x 0.04 x 0.01 mm ³	
Theta-Bereich	2.30 – 25.00°	
Indizes	$-11 \leq h \leq 10, -12 \leq k \leq 12, -16 \leq l \leq 18$	
Zahl der gemessenen Reflexe	9382	
Zahl der unabhängigen Reflexe	4768 [R(int)= 0.1165]	
Absorptionskorrektur	numerisch (Integration)	
T_{\min}, T_{\max}	0.7029, 0.8239	
Zahl der verfeinerten Parameter	267	
Goof	1.136	
R_1 / wR_2 [I>2sigma(I)]	R1= 0.0999, wR2= 0.2474	
R_1 / wR_2 (alle Reflexe)	R1= 0.1415, wR2= 0.2786	
Restelektronendichte	3.780* und -1.851 e · Å ⁻³	
Diffraktometer	IPDS, STOE	
Programm zur Strukturlösung	SIR 97 [140]	

* 1.023 Å vom Rheniumatom entfernt.

Tabelle 6.30: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) von $[\{\text{ReN}(\text{OH}_2)(\text{L}^{\text{Et}})_2\}_2\text{O}][\text{ReO}_3\text{N}]$.

	x	y	z	E(eq)
Re(1)	3606(1)	1389(1)	4753(1)	65(1)
N(10)	1972(16)	894(19)	5321(10)	65(4)
O(1)*	5000	0	5000	78(6)
O(2)	2863(13)	3466(11)	3979(10)	60(3)
C(1)	3711(19)	761(19)	3434(12)	54(4)
N(2)	2677(17)	471(18)	3157(11)	64(4)
C(3)	3200(20)	100(30)	2298(15)	80(6)
C(4)	4580(20)	210(30)	2037(13)	75(6)
N(5)	4930(16)	630(17)	2729(9)	57(4)
C(6)	1160(20)	450(30)	3644(17)	83(7)
C(7)	250(30)	1790(40)	3470(30)	135(14)
C(8)	6300(20)	970(20)	2708(14)	61(5)
C(9)	6570(30)	2400(30)	2160(20)	97(9)
C(10)	2360(30)	-410(40)	1810(20)	111(10)
C(11)	5660(30)	-90(40)	1172(17)	107(10)
C(21)	3690(20)	2315(17)	5894(14)	58(5)
N(22)	4854(19)	2654(16)	6010(13)	67(4)
C(23)	4520(20)	3200(20)	6820(19)	77(6)
C(24)	3110(30)	3240(20)	7190(16)	72(6)
N(25)	2614(18)	2639(15)	6622(11)	57(4)
C(26)	6310(20)	2540(20)	5390(20)	92(9)
C(27)	6650(30)	3870(30)	4690(30)	137(16)
C(28)	1070(20)	2510(20)	6796(15)	66(5)
C(29)	250(30)	3670(30)	6310(20)	95(8)
C(30)	5570(40)	3650(30)	7160(40)	133(14)
C(31)	2110(40)	3700(30)	8058(18)	108(10)
Re(2)**	9832(3)	448(2)	9974(2)	81(1)

	x	y	z	E(eq)
N(30)**	9460(80)	-720(60)	11080(50)	110(20)
O(31)**	11010(50)	1400(60)	10000(30)	135(19)
O(32)**	8440(60)	1580(70)	9640(50)	170(30)
O(33)**	10650(40)	-220(100)	9040(20)	170(40)

* O1 konnte nicht anisotrop verfeinert werden.

** Die Positionen dieser Atome sind nur zu 50% besetzt. N30 konnte nicht anisotrop verfeinert werden.

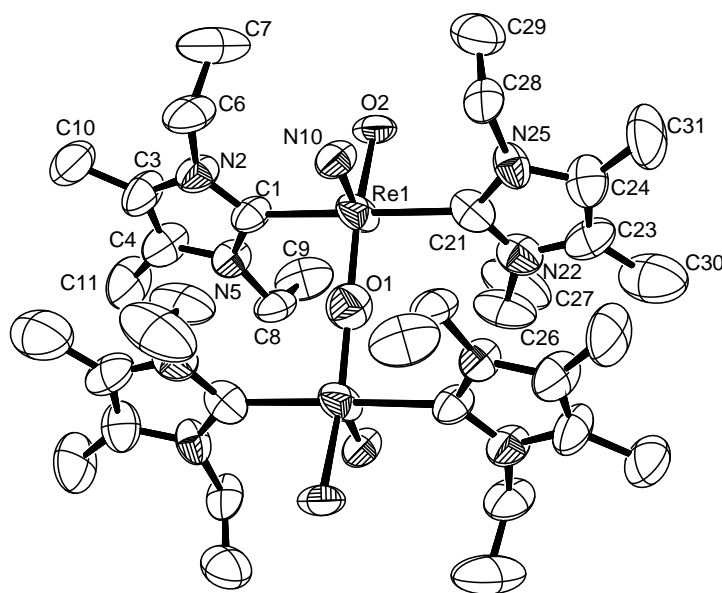


Abbildung 6.15: Ellipsoiddarstellung des Komplex-Kations in $[\{\text{ReN}(\text{OH}_2)(\text{L}^{\text{Et}})_2\}_2\text{O}]\text{[ReO}_3\text{N}]$. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit.

6.2.7 [Re(NPh)Cl(L^{Et})₄](PF₆)₂

 Tabelle 6.31: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von [Re(NPh)Cl(L^{Et})₄](PF₆)₂.

Summenformel	C ₄₂ H ₆₉ ClF ₁₂ N ₉ P ₂ Re	
M (g/mol)	1211.65	
Messtemperatur	293(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Triklin, P $\bar{1}$	
Elementarzelle	a= 13.414(5) Å	α = 80.206(5)°
	b= 13.776(5) Å	β = 79.967(5)°
	c= 16.066(5) Å	γ = 66.879(5)°
Volumen	2672(2) Å ³	
Z	2	
Berechnete Dichte	1.506 g/cm ³	
Linearer Absorptionskoeffizient	2.464 mm ⁻¹	
F(000)	1228	
Kristallgröße	0.44 x 0.22 x 0.18 mm ³	
Theta-Bereich	3.034 – 27.619°	
Indizes	-19 ≤ h ≤ 15, -19 ≤ k ≤ 19, -23 ≤ l ≤ 21	
Zahl der gemessenen Reflexe	33120	
Zahl der unabhängigen Reflexe	16097 [R(int)= 0.0248]	
Absorptionskorrektur	semiempirisch (SADABS)	
T _{min} , T _{max}	0.745244, 1	
Zahl der verfeinerten Parameter	604	
Goof	0.935	
R ₁ / wR ₂ [I > 2σ(I)]	R1= 0.0343, wR2= 0.0889	
R ₁ / wR ₂ (alle Reflexe)	R1= 0.0505, wR2= 0.0996	
Restelektronendichte	1.241 und -0.854 e · Å ⁻³	
Diffraktometer	CCD, Bruker SMART	
Programm zur Strukturlösung	SIR 97 [140]	

Tabelle 6.32: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) von $[\text{Re}(\text{NPh})\text{Cl}(\text{L}^{\text{Et}})_4](\text{PF}_6)_2$.

	x	y	z	E(eq)
Re(1)	8116(1)	3174(1)	7524(1)	31(1)
Cl(1)	9052(1)	3710(1)	6223(1)	42(1)
C(1)	6725(3)	3532(2)	6806(2)	37(1)
N(2)	6707(3)	3201(2)	6066(2)	47(1)
C(3)	5623(4)	3435(4)	5935(3)	65(1)
C(4)	4962(4)	3924(4)	6590(3)	62(1)
N(5)	5638(2)	3998(2)	7108(2)	45(1)
C(6)	7645(4)	2697(3)	5454(2)	56(1)
C(7)	7739(5)	3444(4)	4659(3)	79(2)
C(8)	5171(3)	4551(3)	7855(3)	57(1)
C(9)	4609(4)	5749(4)	7662(4)	77(1)
C(10)	5352(6)	3078(7)	5192(4)	117(3)
C(11)	3748(4)	4242(5)	6797(4)	91(2)
C(21)	7518(2)	4868(2)	7694(2)	35(1)
N(22)	7210(2)	5756(2)	7117(2)	42(1)
C(23)	7063(3)	6666(3)	7460(3)	53(1)
C(24)	7262(3)	6364(3)	8270(3)	50(1)
N(25)	7532(2)	5271(2)	8409(2)	40(1)
C(26)	6971(3)	5820(3)	6243(2)	50(1)
C(27)	7738(5)	6176(4)	5562(3)	71(1)
C(28)	7690(3)	4687(3)	9248(2)	51(1)
C(29)	6587(4)	4907(4)	9809(3)	73(1)
C(30)	6675(6)	7767(4)	6998(4)	88(2)
C(31)	7323(5)	7003(4)	8903(3)	73(1)
C(41)	9584(2)	2880(2)	8124(2)	33(1)
N(42)	10147(2)	3511(2)	8121(2)	40(1)
C(43)	10924(3)	3074(3)	8688(3)	49(1)
C(44)	10858(3)	2149(3)	9053(2)	47(1)
N(45)	10046(2)	2028(2)	8703(2)	37(1)
C(46)	10042(3)	4504(3)	7574(2)	46(1)

	x	y	z	E(eq)
C(47)	11007(4)	4357(4)	6871(3)	64(1)
C(48)	9765(3)	1092(3)	8944(2)	45(1)
C(49)	10680(4)	79(3)	8654(3)	62(1)
C(50)	11645(5)	3599(4)	8851(4)	78(2)
C(51)	11482(4)	1396(4)	9730(3)	67(1)
C(61)	8996(3)	1589(2)	7063(2)	36(1)
N(62)	10057(2)	1130(2)	6698(2)	42(1)
C(63)	10238(4)	166(3)	6430(2)	57(1)
C(64)	9303(4)	15(3)	6612(3)	57(1)
N(65)	8539(3)	877(2)	7017(2)	44(1)
C(66)	10965(3)	1502(3)	6620(2)	50(1)
C(67)	11408(4)	1766(4)	5707(3)	70(1)
C(68)	7450(3)	915(3)	7386(3)	54(1)
C(69)	7508(4)	139(4)	8180(3)	69(1)
C(70)	11369(5)	-588(4)	6090(4)	91(2)
C(71)	9034(6)	-882(4)	6433(3)	84(2)
N(1)	7417(2)	2784(2)	8435(2)	36(1)
C(81)	6831(3)	2438(3)	9146(2)	48(1)
C(82)	5910(3)	2240(4)	9058(3)	62(1)
C(83)	5391(5)	1845(5)	9780(4)	86(2)
C(84)	5735(5)	1653(5)	10541(4)	97(2)
C(85)	6631(5)	1881(4)	10629(3)	81(2)
C(86)	7193(4)	2277(3)	9934(2)	57(1)
P(1)	9013(1)	3049(1)	11664(1)	66(1)
F(1)	7994(4)	4114(3)	11564(4)	140(2)
F(2)	8946(4)	2763(4)	10781(3)	142(2)
F(3)	10020(4)	1970(3)	11741(3)	134(2)
F(4)	9167(7)	3351(5)	12502(4)	193(3)
F(5)	9761(4)	3631(4)	11198(4)	147(2)
F(6)	8278(5)	2471(4)	12126(5)	206(3)
P(2)	5779(1)	9049(1)	2639(2)	94(1)
F(7)	6619(9)	8166(6)	3107(10)	324(7)
F(8)	4935(6)	9980(6)	2101(7)	247(5)

	x	y	z	E(eq)
F(9)	6097(9)	9889(8)	2909(12)	374(10)
F(10)	5356(7)	8296(5)	2380(7)	237(4)
F(11)	4950(14)	9232(12)	3364(6)	349(7)
F(12)	6588(11)	8970(17)	1934(11)	556(16)

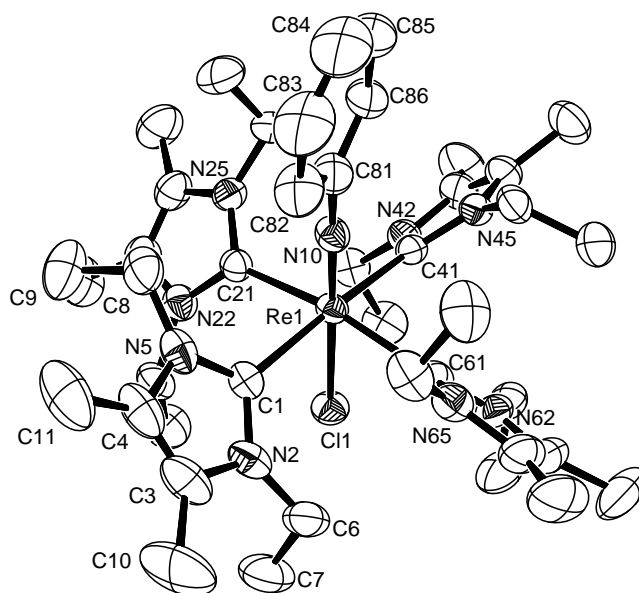


Abbildung 6.16: Ellipsoiddarstellung des $[\text{Re}(\text{NPh})\text{Cl}(\text{L}^{\text{Et}})_4]^{2+}$ -Kations. Die Schwingungselipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Aus Gründen der Übersichtlichkeit sind nur die Kohlenstoffatome des Imidazolringes mit C1 vollständig benannt. Das in diesem Ring verwendete Schema gilt in gleicher Weise auch für die anderen Liganden.

6.2.8 [Re(NPh)Br(L^{Et})₄](PF₆)₂ · 0.5 MeOH

 Tabelle 6.33: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von [Re(NPh)Br(L^{Et})₄](PF₆)₂ · 0.5 MeOH.

Summenformel	C _{42.5} H ₇₁ BrF ₁₂ N ₉ O _{0.5} P ₂ Re	
M (g/mol)	1272.13	
Messtemperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Triklin, P $\bar{1}$	
Elementarzelle	a= 13.444(5) Å	α = 80.199(5)°
	b= 13.674(5) Å	β = 80.098(5)°
	c= 16.141(5) Å	γ = 66.365(5)°
Volumen	2661(2) Å ³	
Z	2	
Berechnete Dichte	1.588 g/cm ³	
Linearer Absorptionskoeffizient	3.177 mm ⁻¹	
F(000)	1282	
Kristallgröße	0.27 x 0.16 x 0.08 mm ³	
Theta-Bereich	2.74 – 24.00°	
Indizes	-15 ≤ h ≤ 15, -15 ≤ k ≤ 15, -18 ≤ l ≤ 17	
Zahl der gemessenen Reflexe	15598	
Zahl der unabhängigen Reflexe	8054 [R(int)= 0.0442]	
Absorptionskorrektur	numerisch (Integration)	
T _{min} , T _{max}	0.5331, 0.7561	
Zahl der verfeinerten Parameter	618	
Goof	1.128	
R ₁ / wR ₂ [I > 2σ(I)]	R1= 0.0797, wR2= 0.1893	
R ₁ / wR ₂ (alle Reflexe)	R1= 0.0883, wR2= 0.01947	
Restelektronendichte	2.634 und -2.601 e · Å ⁻³	
Diffraktometer	IPDS, STOE	
Programm zur Strukturlösung	SHELXS 97 [141]	

Tabelle 6.34: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) von $[\text{Re}(\text{NPh})\text{Br}(\text{L}^{\text{Et}})_4](\text{PF}_6)_2$.

	x	y	z	E(eq)
Re	6933(1)	6792(1)	7484(1)	32(1)
Br	6017(2)	6175(2)	8919(1)	83(1)
N(10)	7603(8)	7218(7)	6555(7)	36(2)
C(81)	8208(10)	7577(12)	5841(9)	48(3)
C(82)	7842(11)	7722(10)	5104(11)	54(4)
C(83)	8408(12)	8110(12)	4383(9)	57(4)
C(84)	9281(14)	8298(13)	4471(11)	68(5)
C(85)	9657(12)	8123(12)	5252(12)	62(4)
C(86)	9111(11)	7735(11)	5949(9)	50(3)
C(1)	5488(9)	7087(8)	6890(7)	30(2)
N(2)	5016(8)	7938(8)	6300(6)	36(2)
C(3)	4217(10)	7799(10)	5940(8)	43(3)
C(4)	4161(11)	6860(11)	6307(8)	45(3)
N(5)	4920(8)	6433(8)	6882(6)	36(2)
C(6)	5255(11)	8912(10)	6071(8)	42(3)
C(7)	4339(12)	9917(10)	6366(9)	48(3)
C(8)	5006(11)	5450(10)	7455(9)	42(3)
C(9)	4088(13)	5608(13)	8155(10)	60(4)
C(10)	3579(12)	8565(12)	5249(9)	52(3)
C(11)	3468(14)	6321(13)	6140(11)	62(4)
C(21)	7535(9)	5075(9)	7294(7)	33(2)
N(22)	7478(8)	4687(8)	6585(6)	39(2)
C(23)	7729(10)	3606(10)	6707(8)	41(3)
C(24)	7958(10)	3273(10)	7520(9)	44(3)
N(25)	7840(9)	4173(8)	7863(7)	41(2)
C(26)	7313(11)	5292(10)	5732(8)	46(3)
C(27)	8386(12)	5110(12)	5178(9)	56(4)
C(28)	8103(13)	4083(13)	8736(8)	53(3)
C(29)	7280(30)	3770(20)	9435(12)	126(11)

Kristallographischer Anhang

	x	y	z	E(eq)
C(30)	7655(13)	2956(12)	6070(10)	53(4)
C(31)	8330(16)	2135(12)	7981(11)	67(4)
C(41)	8337(9)	6416(10)	8179(8)	36(3)
N(42)	9425(8)	5930(9)	7848(7)	42(2)
C(43)	10133(12)	5955(12)	8365(10)	52(3)
C(44)	9510(13)	6445(12)	9036(10)	55(4)
N(45)	8422(9)	6718(8)	8911(7)	42(2)
C(46)	9839(11)	5369(11)	7072(9)	47(3)
C(47)	10377(12)	4172(12)	7256(11)	61(4)
C(48)	7498(12)	7233(11)	9539(9)	51(3)
C(49)	7454(18)	6466(14)	10352(10)	80(6)
C(50)	11317(13)	5667(14)	8127(13)	71(5)
C(51)	9850(18)	6712(19)	9761(13)	89(6)
C(61)	6070(11)	8375(10)	7967(7)	40(3)
N(62)	6501(9)	9128(8)	7995(7)	42(2)
C(63)	5766(12)	9984(10)	8413(9)	50(3)
C(64)	4821(12)	9823(11)	8601(9)	51(3)
N(65)	5012(8)	8846(8)	8327(6)	38(2)
C(66)	7589(11)	9088(11)	7608(10)	50(3)
C(67)	7538(13)	9856(11)	6811(10)	58(4)
C(68)	4123(11)	8462(10)	8399(8)	44(3)
C(69)	3659(16)	8222(15)	9317(11)	74(5)
C(70)	6016(16)	10904(13)	8561(10)	66(4)
C(71)	3735(16)	10562(13)	8976(12)	82(6)
P(1)	5998(3)	6985(3)	3323(3)	52(1)
F(1)	7014(8)	5882(7)	3454(7)	80(3)
F(2)	6058(9)	7288(9)	4216(7)	88(3)
F(3)	4970(9)	8092(8)	3244(7)	84(3)
F(4)	5889(12)	6675(11)	2461(9)	116(5)
F(5)	6773(11)	7586(9)	2901(10)	119(5)
F(6)	5211(8)	6393(9)	3800(9)	97(4)
P(2)	929(3)	8938(3)	7518(3)	60(1)

	x	y	z	E(eq)
F(7)	-7(14)	9913(12)	6914(16)	175(9)
F(8)	1839(16)	8056(14)	7937(18)	190(10)
F(9)	1733(15)	9520(20)	7131(16)	187(10)
F(10)	1340(20)	8420(30)	6680(20)	281(18)
F(11)	520(40)	9540(30)	8230(20)	400(30)
F(12)	249(18)	8246(14)	7560(20)	222(14)
O(99)*	-1410(30)	9660(30)	9460(20)	111(11)
C(99)*	-940(70)	10040(120)	9980(50)	290(80)

* Die Positionen dieser Atome sind nur zu 50% besetzt.

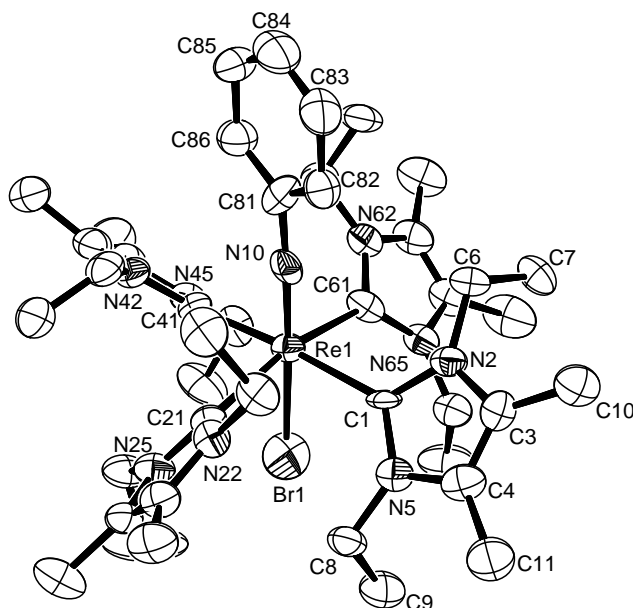


Abbildung 6.17: Ellipsoiddarstellung des $[\text{Re}(\text{NPh})\text{Br}(\text{L}^{\text{Et}})_4]^{2+}$ -Kations. Die Schwingungselipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Aus Gründen der Übersichtlichkeit sind nur die Kohlenstoffatome des Imidazolringes mit C1 vollständig benannt. Das in diesem Ring verwendete Schema gilt in gleicher Weise auch für die anderen Liganden.

6.2.9 [Re(NPh)(OH)(L^{Et})₄](PF₆)₂ · 0.25 MeOH

 Tabelle 6.35: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von [Re(NPh)(OH)(L^{Et})₄](PF₆)₂ · 0.25 MeOH.

Summenformel	C _{42.25} H ₇₁ F ₁₂ N ₉ O _{1.25} P ₂ Re	
M (g/mol)	1201.22	
Messtemperatur	293(2) K	
Wellenlänge	0.71069 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Triklin, P $\bar{1}$	
Elementarzelle	a= 13.096(3) Å	α = 80.90(1)°
	b= 13.812(4) Å	β = 80.50(2)°
	c= 16.166(2) Å	γ = 68.03(2)°
Volumen	2660(1) Å ³	
Z	2	
Berechnete Dichte	1.500 g/cm ³	
Linearer Absorptionskoeffizient	2.428 mm ⁻¹	
F(000)	1221	
Kristallgröße	0.5 x 0.2 x 0.1 mm ³	
Theta-Bereich	3.04 – 24.00°	
Indizes	0 ≤ h ≤ 14, -14 ≤ k ≤ 15, -18 ≤ l ≤ 18	
Zahl der gemessenen Reflexe	8709	
Zahl der unabhängigen Reflexe	8087 [R(int)= 0.1853]	
Absorptionskorrektur	semiempirisch (PSI-Scans)	
T _{min} , T _{max}	0.38931, 0.79231	
Zahl der verfeinerten Parameter	623	
Goof	1.077	
R ₁ / wR ₂ [I > 2σ(I)]	R1= 0.0610, wR2= 0.1497	
R ₁ / wR ₂ (alle Reflexe)	R1= 0.0811, wR2= 0.1609	
Restelektronendichte	3.527* und -2.483 e · Å ⁻³	
Diffraktometer	CAD4, Enraf-Nonius	
Programm zur Strukturlösung	SIR 97 [140]	

* 0.944 Å vom Rheniumatom entfernt.

Tabelle 6.36: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) von $[\text{Re}(\text{NPh})(\text{OH})(\text{L}^{\text{Et}})_4](\text{PF}_6)_2 \cdot 0.25 \text{ MeOH}$.

	x	y	z	E(eq)
Re	8139(1)	3118(1)	2547(1)	37(1)
C(1)	7574(7)	4770(7)	2728(5)	41(2)
N(2)	7548(6)	5204(6)	3452(4)	48(2)
C(3)	7335(9)	6284(8)	3301(7)	62(3)
C(4)	7188(10)	6557(8)	2474(7)	64(3)
N(5)	7322(6)	5636(6)	2139(5)	48(2)
C(6)	7667(9)	4654(8)	4283(6)	63(3)
C(7)	6565(11)	4852(10)	4817(7)	81(4)
C(8)	7226(10)	5651(9)	1241(6)	65(3)
C(9)	8151(13)	5861(10)	653(7)	88(4)
C(10)	7370(12)	6943(11)	3913(9)	91(4)
C(11)	6876(15)	7623(10)	1989(10)	102(5)
C(21)	9611(7)	2838(6)	3170(5)	41(2)
N(22)	10066(6)	2002(6)	3749(4)	46(2)
C(23)	10931(8)	2126(8)	4065(6)	55(2)
C(24)	11027(8)	3031(8)	3693(6)	53(2)
N(25)	10209(6)	3442(6)	3154(4)	43(2)
C(26)	9774(8)	1068(8)	3979(6)	55(2)
C(27)	10660(10)	89(8)	3653(7)	67(3)
C(28)	10114(9)	4414(7)	2610(6)	54(2)
C(29)	11011(9)	4287(10)	1863(7)	71(3)
C(30)	11561(10)	1377(10)	4733(7)	73(3)
C(31)	11811(11)	3543(10)	3812(8)	82(4)
C(41)	8980(8)	1551(7)	2089(5)	48(2)
N(42)	8526(7)	832(6)	2031(5)	49(2)
C(43)	9278(10)	0(8)	1612(6)	61(3)
C(44)	10201(9)	191(8)	1406(6)	61(3)
N(45)	10026(6)	1136(6)	1702(4)	49(2)
C(46)	7400(8)	867(8)	2404(7)	60(3)
C(47)	7478(10)	102(10)	3206(8)	82(4)

Kristallographischer Anhang

	x	y	z	E(eq)
C(48)	10913(8)	1553(7)	1596(6)	52(2)
C(49)	11207(11)	1953(10)	694(7)	76(3)
C(50)	8998(13)	-894(10)	1439(9)	85(4)
C(51)	11318(13)	-513(11)	1038(9)	99(5)
C(61)	6762(8)	3458(7)	1791(6)	50(2)
N(62)	5657(7)	3931(7)	2048(5)	60(2)
C(63)	5028(10)	3898(11)	1468(9)	80(4)
C(64)	5734(12)	3441(11)	825(9)	82(4)
N(65)	6785(8)	3170(7)	1027(5)	60(2)
C(66)	5174(8)	4466(9)	2803(7)	71(3)
C(67)	4687(11)	5672(10)	2630(9)	91(4)
C(68)	7799(12)	2659(9)	456(6)	75(3)
C(69)	8004(14)	3400(11)	-284(8)	100(5)
C(70)	3787(12)	4247(14)	1603(12)	119(6)
C(71)	5491(18)	3136(17)	26(12)	149(8)
N(10)	7414(6)	2723(6)	3446(5)	51(2)
C(81)	6815(8)	2392(8)	4150(6)	55(2)
C(82)	5859(8)	2198(8)	4067(7)	65(3)
C(83)	5295(10)	1836(11)	4753(10)	95(4)
C(84)	5687(13)	1651(13)	5527(9)	102(5)
C(85)	6573(11)	1862(10)	5627(8)	83(4)
C(86)	7159(9)	2221(9)	4938(6)	66(3)
O(1)	8938(5)	3573(5)	1499(3)	46(1)
P(1)	983(3)	6945(3)	3284(2)	82(1)
F(1)	1127(15)	7249(11)	4131(9)	197(7)
F(2)	291(10)	6287(9)	3811(9)	162(5)
F(3)	750(20)	6649(13)	2489(10)	247(10)
F(4)	1694(16)	7535(12)	2815(15)	262(10)
F(5)	2018(10)	5916(10)	3351(11)	194(7)
F(6)	-28(11)	7982(8)	3258(8)	161(5)
P(2)	4174(3)	905(3)	2267(4)	98(1)
F(7)	5104(13)	-34(14)	2631(16)	228(8)

	x	y	z	E(eq)
F(8)	3185(13)	1838(15)	2032(17)	257(10)
F(9)	4665(17)	1618(11)	2461(19)	303(14)
F(10)	3440(20)	600(20)	2943(18)	380(20)
F(11)	4900(40)	820(30)	1548(19)	420(30)
F(12)	3933(19)	240(20)	1700(20)	302(14)
O(2)*	6050(100)	-920(170)	200(70)	530(180)
C(99)*	6460(60)	210(70)	300(70)	150(40)

* Die Positionen dieser Atome sind nur zu 25% besetzt.

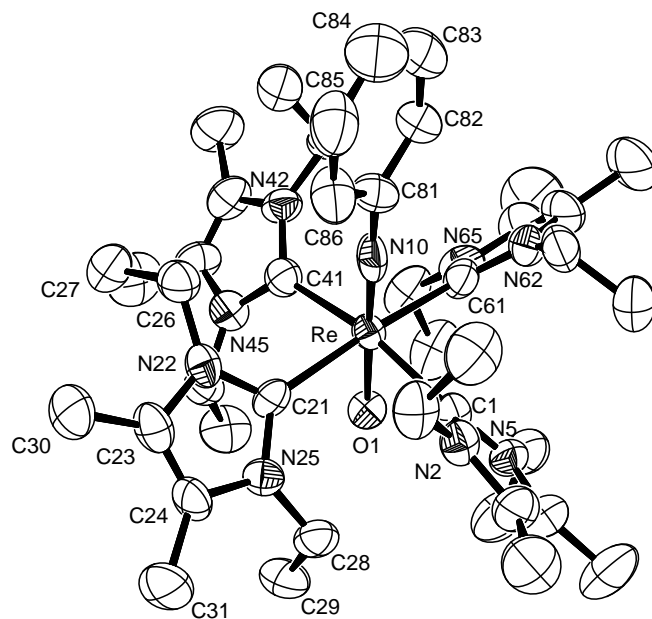


Abbildung 6.18: Ellipsoiddarstellung des $[\text{Re}(\text{NPh})(\text{OH})(\text{L}^{\text{Et}})_4]^{2+}$ -Kations. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Aus Gründen der Übersichtlichkeit sind nur die Kohlenstoffatome des Imidazolringes mit C21 vollständig benannt. Das in diesem Ring verwendete Schema gilt in gleicher Weise auch für die anderen Liganden.

6.2.10 [ReNCl₂(PMe₂Ph)₂(HL^{Ph})]

 Tabelle 6.37: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von [ReNCl₂(PMe₂Ph)₂(HL^{Ph})].

Summenformel	C ₃₆ H ₃₇ Cl ₂ N ₄ P ₂ Re	
M (g/mol)	844.74	
Messtemperatur	293(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Monoklin, P2 ₁ /c	
Elementarzelle	a= 10.825(2) Å	α= 90°
	b= 31.595(3) Å	β= 113.48(1)°
	c= 11.319(3) Å	γ= 90°
Volumen	3551(1) Å ³	
Z	4	
Berechnete Dichte	1.580 g/cm ³	
Linearer Absorptionskoeffizient	3.694 mm ⁻¹	
F(000)	1680	
Kristallgröße	0.22 x 0.20 x 0.18 mm ³	
Theta-Bereich	3.24 – 24°	
Indizes	-12 ≤ h ≤ 11, -36 ≤ k ≤ 0, -1 ≤ l ≤ 12	
Zahl der gemessenen Reflexe	6427	
Zahl der unabhängigen Reflexe	5500 [R(int)= 0.0761]	
Absorptionskorrektur	empirisch (DIFABS)	
T _{min} , T _{max}	0.8321, 0.9772	
Zahl der verfeinerten Parameter	406	
Goof	0.957	
R ₁ / wR ₂ [I > 2σ(I)]	R1= 0.0574, wR2= 0.1053	
R ₁ / wR ₂ (alle Reflexe)	R1= 0.1725, wR2= 0.1414	
Restelektronendichte	0.738 und -0.917 e · Å ⁻³	
Diffraktometer	CAD4, Enraf-Nonius	
Programm zur Strukturlösung	SIR 97 [140]	

Tabelle 6.38: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) von $[\text{ReNCl}_2(\text{PMe}_2\text{Ph})_2(\text{HL}^{\text{Ph}})]$.

	x	y	z	E(eq)
Re(1)	6604(1)	1178(1)	3649(1)	48(1)
N(10)	7529(9)	1596(3)	4773(13)	76(4)
Cl(1)	7758(4)	1060(2)	2207(4)	94(2)
Cl(2)	5217(4)	511(1)	2823(4)	79(1)
C(1)	5331(13)	1567(4)	2053(13)	45(3)
C(2)	3795(13)	1851(4)	211(13)	48(3)
N(1)	4346(10)	1472(3)	835(10)	48(3)
N(2)	5295(10)	1996(4)	2041(11)	53(3)
N(3)	4333(10)	2178(3)	924(11)	53(3)
C(11)	3938(13)	1058(4)	177(13)	50(4)
C(12)	2718(14)	925(5)	-16(15)	67(4)
C(13)	2322(19)	561(6)	-707(17)	85(6)
C(14)	3050(30)	332(6)	-1179(18)	112(9)
C(15)	4250(20)	475(7)	-951(18)	104(7)
C(16)	4759(16)	859(5)	-239(15)	66(4)
C(21)	6176(14)	2295(5)	2953(13)	53(4)
C(22)	7420(15)	2314(5)	3056(15)	70(4)
C(23)	8219(15)	2629(6)	3951(17)	78(5)
C(24)	7730(20)	2907(5)	4563(18)	90(6)
C(25)	6488(18)	2896(5)	4419(18)	87(6)
C(26)	5703(15)	2582(5)	3563(14)	62(4)
C(31)	2745(14)	1860(4)	-1155(15)	56(4)
C(32)	1569(18)	2026(5)	-1359(17)	79(5)
C(33)	566(17)	2058(6)	-2680(20)	97(6)
C(34)	850(20)	1918(6)	-3720(20)	98(6)
C(35)	1999(17)	1747(6)	-3555(17)	88(6)
C(36)	2947(15)	1732(5)	-2260(15)	75(5)
P(1)	8207(4)	685(1)	5183(4)	58(1)
C(41)	8298(14)	623(5)	6867(15)	58(4)
C(42)	8648(16)	955(5)	7762(17)	84(6)

	x	y	z	E(eq)
C(43)	8646(19)	886(8)	9062(19)	107(7)
C(44)	8250(30)	509(9)	9370(20)	127(9)
C(45)	7910(30)	206(9)	8460(30)	169(12)
C(46)	7920(20)	261(7)	7250(20)	109(7)
C(47)	9831(14)	852(5)	5482(17)	98(6)
C(48)	8173(16)	157(4)	4575(16)	90(6)
P(2)	5185(4)	1214(2)	4818(4)	61(1)
C(51)	3492(13)	1318(4)	3775(13)	52(4)
C(52)	3108(15)	1742(5)	3438(17)	80(5)
C(53)	1790(20)	1826(7)	2690(20)	114(8)
C(54)	940(20)	1499(10)	2370(20)	124(10)
C(55)	1340(20)	1113(9)	2640(20)	137(10)
C(56)	2598(16)	1015(5)	3366(17)	79(5)
C(57)	5089(16)	781(6)	5836(17)	110(7)
C(58)	5617(15)	1653(6)	6015(17)	117(8)

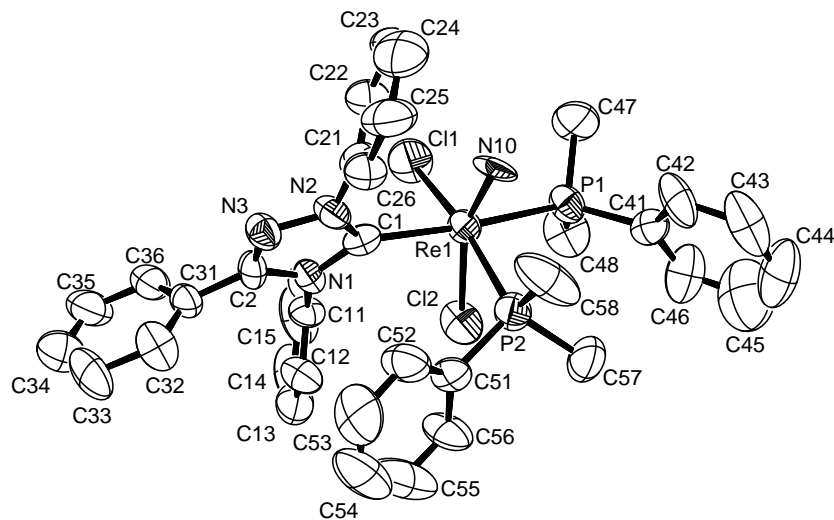


Abbildung 6.19: Ellipsoiddarstellung von $[\text{ReNCl}_2(\text{PMe}_2\text{Ph})_2(\text{HL}^{\text{Ph}})]$. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit.

6.2.11 [ReNCl(HL^{Ph})(L^{Ph})]Tabelle 6.39: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von [ReNCl(HL^{Ph})(L^{Ph})].

Summenformel	C ₄₀ H ₂₉ ClN ₇ Re	
M (g/mol)	829.35	
Messtemperatur	293(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Triklin, P $\bar{1}$	
Elementarzelle	a= 10.524(2) Å	α = 109.08(2)°
	b= 12.225(2) Å	β = 100.20(2)°
	c= 14.538(3) Å	γ = 96.85(1)°
Volumen	1708.0(5) Å ³	
Z	2	
Berechnete Dichte	1.613 g/cm ³	
Linearer Absorptionskoeffizient	3.676 mm ⁻¹	
F(000)	820	
Kristallgröße	0.2 x 0.1 x 0.05 mm ³	
Theta-Bereich	3.34 – 28.04°	
Indizes	-1 ≤ h ≤ 13, -16 ≤ k ≤ 16, -19 ≤ l ≤ 19	
Zahl der gemessenen Reflexe	9401	
Zahl der unabhängigen Reflexe	8133 [R(int)= 0.0269]	
Absorptionskorrektur	keine	
Zahl der verfeinerten Parameter	442	
Goof	1.033	
R ₁ / wR ₂ [I > 2σ(I)]	R1= 0.0563, wR2= 0.1346	
R ₁ / wR ₂ (alle Reflexe)	R1= 0.0834, wR2= 0.1475	
Restelektronendichte	2.195 und -3.462* e · Å ⁻³	
Diffraktometer	CAD4, Enraf-Nonius	
Programm zur Strukturlösung	SHELXS 97 [141]	

* 0.819 Å vom Rheniumatom entfernt.

Tabelle 6.40: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) von $[\text{ReNCl}(\text{HL}^{\text{Ph}})(\text{L}^{\text{Ph}})]$.

	x	y	z	E(eq)
Re(1)	5291(1)	6058(1)	7500(1)	47(1)
N(10)	4908(7)	6596(6)	6616(6)	70(2)
Cl(1)	4575(2)	7378(2)	8953(1)	58(1)
C(1)	7223(6)	6908(5)	8175(5)	45(1)
N(1)	7949(6)	7909(4)	8140(4)	47(1)
C(11)	7397(7)	8646(5)	7655(5)	51(2)
C(12)	6597(9)	9356(7)	8097(8)	71(2)
C(13)	6127(11)	10088(8)	7656(11)	99(4)
C(14)	6403(13)	10124(11)	6775(11)	108(4)
C(15)	7195(16)	9433(11)	6370(9)	112(5)
C(16)	7737(11)	8651(8)	6775(7)	80(3)
N(2)	8143(5)	6535(5)	8713(4)	45(1)
C(21)	7902(7)	5492(6)	8952(5)	50(1)
C(22)	8829(8)	4808(7)	8925(6)	64(2)
C(23)	8544(11)	3755(8)	9107(8)	80(3)
C(24)	7397(12)	3457(8)	9329(8)	80(3)
C(25)	6482(10)	4163(9)	9364(7)	78(2)
C(26)	6732(8)	5201(7)	9191(6)	64(2)
C(2)	9239(7)	8028(6)	8615(5)	49(1)
C(31)	10333(8)	8955(6)	8740(5)	56(2)
C(32)	10159(9)	10105(7)	8824(6)	66(2)
C(33)	11266(11)	10967(7)	8992(6)	76(3)
C(34)	12503(10)	10715(9)	9095(7)	81(3)
C(35)	12675(9)	9599(10)	9003(8)	82(3)
C(36)	11598(8)	8706(8)	8823(6)	67(2)
N(3)	9387(6)	7188(5)	8973(4)	51(1)
C(3)	5834(6)	4523(5)	6687(5)	46(1)
N(4)	6806(5)	4171(4)	6185(4)	46(1)
C(41)	7814(7)	4929(5)	6014(5)	48(1)
C(42)	7514(9)	5388(7)	5269(6)	61(2)
C(43)	8525(11)	6107(8)	5128(6)	73(2)

	x	y	z	E(eq)
C(44)	9770(10)	6340(7)	5696(7)	70(2)
C(45)	10039(9)	5894(7)	6425(7)	69(2)
C(46)	9061(8)	5163(7)	6581(6)	59(2)
N(5)	5140(6)	3510(5)	6606(5)	53(1)
C(51)	4014(7)	3524(6)	7012(6)	55(2)
C(52)	3254(8)	2495(7)	6962(6)	62(2)
C(53)	2174(9)	2596(8)	7380(7)	72(2)
C(54)	1876(9)	3680(8)	7803(7)	74(2)
C(55)	2659(8)	4703(7)	7837(7)	64(2)
C(56)	3770(6)	4660(6)	7445(6)	52(2)
C(4)	6592(7)	2947(5)	5840(5)	51(2)
C(61)	7373(7)	2224(6)	5250(6)	53(2)
C(62)	6938(10)	1692(8)	4226(7)	75(2)
C(63)	7660(12)	966(9)	3696(7)	84(3)
C(64)	8817(11)	793(7)	4138(8)	80(3)
C(65)	9277(11)	1336(8)	5142(8)	85(3)
C(66)	8581(9)	2061(8)	5701(7)	70(2)
N(6)	5572(6)	2530(5)	6099(5)	57(1)

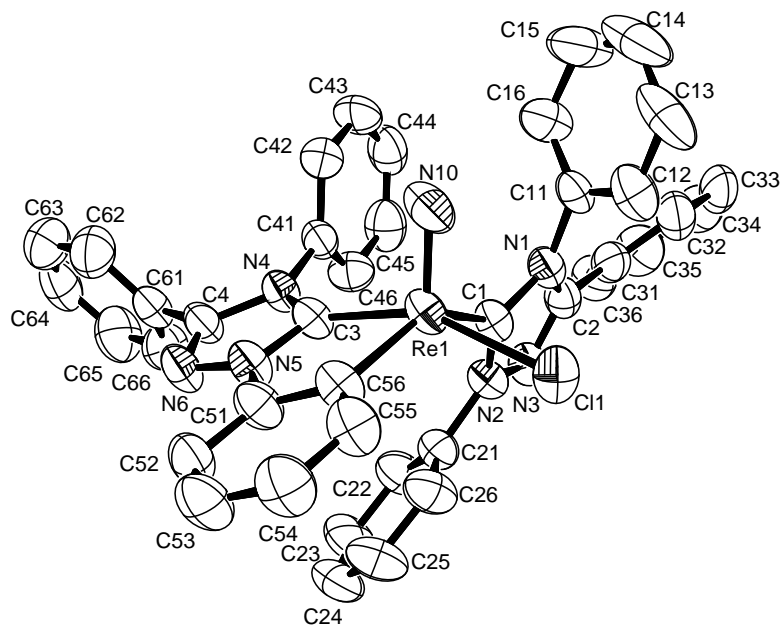


Abbildung 6.20: Ellipsoiddarstellung von $[\text{ReNCI}(\text{HL}^{\text{Ph}})(\text{L}^{\text{Ph}})]$. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit.

6.2.12 [ReN(NCS)(HL^{Ph})(L^{Ph})]Tabelle 6.41: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von [ReN(NCS)(HL^{Ph})(L^{Ph})].

Summenformel	C ₄₁ H ₂₉ N ₈ SRe	
M (g/mol)	851.98	
Messtemperatur	293(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Monoklin, P2 ₁ /c	
Elementarzelle	a= 15.229(3) Å	α= 90°
	b= 12.320(1) Å	β= 103.11(1)°
	c= 19.344(2) Å	γ= 90°
Volumen	3535.0(8) Å ³	
Z	4	
Berechnete Dichte	1.601 g/cm ³	
Linearer Absorptionskoeffizient	3.539 mm ⁻¹	
F(000)	1688	
Kristallgröße	0.6 x 0.4 x 0.2 mm ³	
Theta-Bereich	3.09 – 26.97°	
Indizes	-1 ≤ h ≤ 19, 0 ≤ k ≤ 15, -24 ≤ l ≤ 24	
Zahl der gemessenen Reflexe	8692	
Zahl der unabhängigen Reflexe	7645 [R(int)= 0.0535]	
Absorptionskorrektur	empirisch (DIFABS)	
T _{min} , T _{max}	0.169, 0.642	
Zahl der verfeinerten Parameter	460	
Goof	0.790	
R ₁ / wR ₂ [I > 2σ(I)]	R1= 0.0521, wR2= 0.1362	
R ₁ / wR ₂ (alle Reflexe)	R1= 0.0909, wR2= 0.1677	
Restelektronendichte	1.201 und -2.774 e · Å ⁻³	
Diffraktometer	CAD4, Enraf-Nonius	
Programm zur Strukturlösung	SIR 97 [140]	

Tabelle 6.42: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) von $[\text{ReN}(\text{NCS})(\text{HL}^{\text{Ph}})(\text{L}^{\text{Ph}})]$.

	x	y	z	E(eq)
Re(1)	2824(1)	368(1)	2206(1)	46(1)
N(10)	3882(5)	512(7)	2209(5)	68(2)
C(1)	2628(5)	1474(6)	2980(4)	45(2)
N(1)	3251(4)	1938(5)	3511(3)	48(1)
C(11)	4203(5)	1706(7)	3682(4)	50(2)
C(12)	4799(6)	2496(8)	3593(5)	64(2)
C(13)	5697(7)	2286(10)	3791(6)	80(3)
C(14)	6009(7)	1323(12)	4079(6)	88(4)
C(15)	5418(8)	537(9)	4176(6)	79(3)
C(16)	4490(7)	721(8)	3979(5)	62(2)
N(2)	1847(4)	1940(6)	3051(3)	51(2)
C(21)	979(5)	1735(7)	2645(4)	53(2)
C(22)	326(6)	2517(8)	2579(6)	70(3)
C(23)	-525(7)	2314(10)	2168(6)	81(3)
C(24)	-719(7)	1375(10)	1812(6)	80(3)
C(25)	-80(7)	577(9)	1876(6)	70(3)
C(26)	775(6)	754(8)	2308(5)	56(2)
N(3)	1967(5)	2711(6)	3582(4)	53(2)
C(2)	2825(5)	2697(6)	3863(4)	50(2)
C(31)	3278(5)	3388(7)	4441(4)	51(2)
C(32)	3041(7)	4475(8)	4445(5)	67(2)
C(33)	3473(9)	5146(9)	5001(6)	77(3)
C(34)	4114(8)	4743(10)	5537(6)	77(3)
C(35)	4366(7)	3667(9)	5540(5)	69(3)
C(36)	3945(7)	3000(8)	4994(4)	64(2)
C(3)	2255(5)	1389(6)	1358(4)	45(2)
N(4)	2215(4)	2439(5)	1158(3)	47(1)
C(41)	2615(6)	3332(7)	1603(4)	56(2)
C(42)	3527(8)	3420(9)	1798(5)	74(3)
C(43)	3902(12)	4295(12)	2209(7)	103(5)

	x	y	z	E(eq)
C(44)	3390(18)	5033(15)	2427(8)	133(8)
C(45)	2465(15)	4928(10)	2251(8)	117(6)
C(46)	2041(9)	4065(9)	1830(6)	84(3)
N(5)	1739(5)	892(5)	789(3)	49(2)
C(51)	1664(6)	-255(7)	773(5)	52(2)
C(52)	1177(7)	-785(8)	186(5)	64(2)
C(53)	1204(7)	-1911(9)	204(6)	74(3)
C(54)	1659(7)	-2446(8)	805(6)	71(3)
C(55)	2126(6)	-1872(7)	1380(5)	58(2)
C(56)	2168(5)	-735(7)	1390(4)	49(2)
N(6)	1367(5)	1568(6)	241(3)	53(2)
C(4)	1682(5)	2529(7)	472(4)	50(2)
C(61)	1483(6)	3517(7)	49(4)	56(2)
C(62)	2131(8)	4298(8)	52(5)	71(3)
C(63)	1924(12)	5186(8)	-393(7)	95(4)
C(64)	1109(13)	5295(10)	-839(7)	100(5)
C(65)	482(10)	4506(12)	-864(7)	101(4)
C(66)	661(7)	3613(9)	-419(6)	78(3)
N(20)	2799(5)	-889(6)	2905(4)	58(2)
C(20)	2937(6)	-1597(8)	3306(5)	60(2)
S(20)	3131(3)	-2596(3)	3851(2)	96(1)

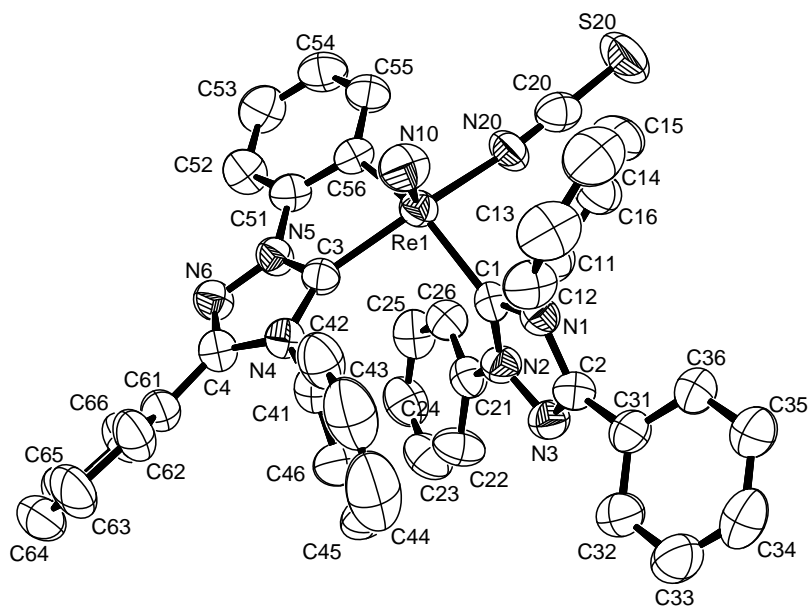


Abbildung 6.21: Ellipsoiddarstellung von $[\text{ReN}(\text{NCS})(\text{HL}^{\text{Ph}})(\text{L}^{\text{Ph}})]$. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit.

6.2.13 [ReN(CN)(HL^{Ph})(L^{Ph})]Tabelle 6.43: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von [ReN(CN)(HL^{Ph})(L^{Ph})].

Summenformel	C ₄₁ H ₂₉ N ₈ Re	
M (g/mol)	819.92	
Messtemperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Triklin, P $\bar{1}$	
Elementarzelle	a= 10.494(1) Å	α = 109.90(1)°
	b= 12.246(1) Å	β = 100.02(1)°
	c= 14.403(2) Å	γ = 96.45(1)°
Volumen	1684.2(3) Å ³	
Z	2	
Berechnete Dichte	1.617 g/cm ³	
Linearer Absorptionskoeffizient	3.651 mm ⁻¹	
F(000)	812	
Kristallgröße	0.2 x 0.1 x 0.04 mm ³	
Theta-Bereich	3.28 – 29.29°	
Indizes	-14 ≤ h ≤ 14, -16 ≤ k ≤ 16, -19 ≤ l ≤ 19	
Zahl der gemessenen Reflexe	15782	
Zahl der unabhängigen Reflexe	8758 [R(int)= 0.0452]	
Absorptionskorrektur	numerisch (Integration)	
T _{min} , T _{max}	0.6288, 1	
Zahl der verfeinerten Parameter	449	
Goof	0.841	
R ₁ / wR ₂ [I > 2σ(I)]	R1= 0.0514, wR2= 0.1276	
R ₁ / wR ₂ (alle Reflexe)	R1= 0.0743, wR2= 0.1419	
Restelektronendichte	4.541* und -2.581 e · Å ⁻³	
Diffraktometer	IPDS, STOE	
Programm zur Strukturlösung	SHELXS 97 [141]	

* 1.138 Å vom Rheniumatom entfernt.

Tabelle 6.44: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) von $[\text{ReN}(\text{CN})(\text{HL}^{\text{Ph}})(\text{L}^{\text{Ph}})]$.

	x	y	z	E(eq)
Re	271(1)	1111(1)	2490(1)	38(1)
C(10)	-298(6)	2179(5)	3763(5)	43(1)
N(11)	-594(7)	2730(6)	4488(6)	58(2)
C(1)	2224(6)	1961(5)	3141(5)	36(1)
N(1)	2932(5)	2954(4)	3119(4)	39(1)
N(2)	3146(5)	1571(4)	3674(4)	36(1)
N(3)	4397(5)	2241(5)	3944(4)	40(1)
C(2)	4240(6)	3093(5)	3594(5)	39(1)
C(11)	2360(7)	3738(5)	2675(5)	39(1)
C(12)	2637(10)	3742(7)	1775(6)	58(2)
C(13)	2117(12)	4539(9)	1390(8)	75(3)
C(14)	1348(11)	5258(10)	1875(11)	90(4)
C(15)	1089(9)	5211(7)	2769(8)	65(2)
C(16)	1575(8)	4452(6)	3177(7)	52(2)
C(21)	2926(7)	557(5)	3932(5)	39(1)
C(22)	3871(8)	-153(7)	3914(6)	53(2)
C(23)	3591(10)	-1177(7)	4099(7)	61(2)
C(24)	2414(10)	-1509(7)	4286(7)	59(2)
C(25)	1485(8)	-798(7)	4331(6)	55(2)
C(26)	1734(7)	260(7)	4158(6)	49(2)
C(31)	5342(7)	4045(6)	3739(5)	42(1)
C(32)	6603(8)	3805(7)	3860(6)	50(2)
C(33)	7664(8)	4704(7)	4046(6)	56(2)
C(34)	7470(8)	5805(7)	4101(6)	57(2)
C(35)	6225(9)	6041(6)	3985(6)	55(2)
C(36)	5148(8)	5171(6)	3797(5)	47(2)
C(3)	860(6)	-464(5)	1636(5)	37(1)
N(4)	1826(6)	-835(4)	1147(4)	39(1)
N(5)	116(6)	-1473(5)	1534(4)	42(1)
N(6)	562(6)	-2473(5)	1024(5)	45(1)

	x	y	z	E(eq)
C(4)	1609(7)	-2052(5)	796(5)	40(1)
C(41)	2871(7)	-55(5)	1012(5)	41(1)
C(42)	2573(8)	435(6)	289(5)	49(2)
C(43)	3614(9)	1165(7)	172(6)	57(2)
C(44)	4839(8)	1394(7)	753(6)	56(2)
C(45)	5118(8)	891(7)	1457(6)	55(2)
C(46)	4127(8)	146(6)	1578(5)	48(2)
C(51)	-1006(6)	-1458(6)	1963(5)	43(1)
C(52)	-1754(7)	-2480(6)	1927(6)	48(2)
C(53)	-2816(8)	-2392(6)	2368(6)	54(2)
C(54)	-3090(7)	-1271(7)	2854(7)	54(2)
C(55)	-2307(7)	-246(6)	2881(6)	48(2)
C(56)	-1230(6)	-294(5)	2437(5)	42(1)
C(61)	2444(7)	-2802(5)	226(5)	43(1)
C(62)	1955(9)	-3435(7)	-796(6)	58(2)
C(63)	2690(10)	-4177(7)	-1350(7)	64(2)
C(64)	3898(10)	-4266(7)	-886(7)	62(2)
C(65)	4383(10)	-3646(7)	149(7)	64(2)
C(66)	3659(9)	-2905(7)	708(6)	55(2)
N(10)	-215(7)	1621	1550	156(7)

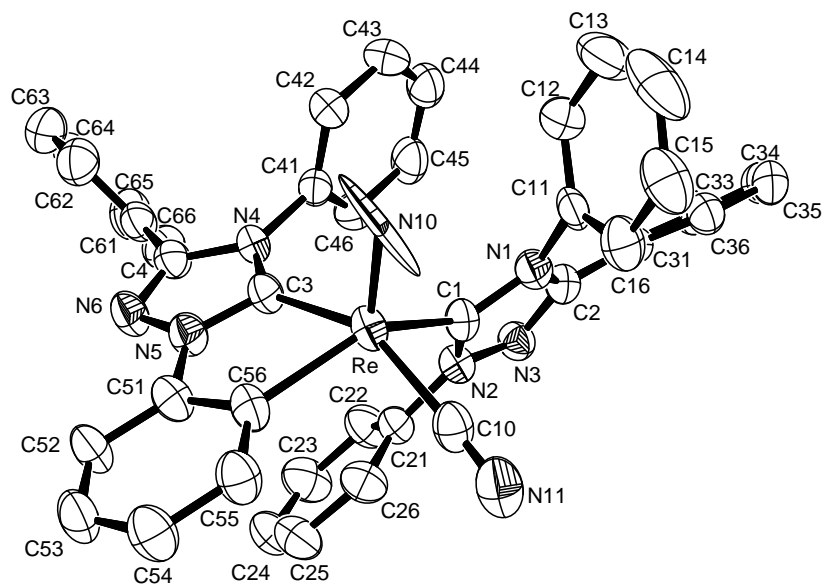


Abbildung 6.22: Ellipsoiddarstellung von $[\text{ReN}(\text{CN})(\text{HL}^{\text{Ph}})(\text{L}^{\text{Ph}})]$. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit.

6.2.14 [ReN(PyS)(HL^{Ph})(L^{Ph})] · 3 MeOHTabelle 6.45: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von [ReN(PyS)(HL^{Ph})(L^{Ph})] · 3 MeOH.

Summenformel	C ₄₈ H ₄₅ N ₈ O ₃ SRe	
M (g/mol)	1000.18	
Messtemperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Monoklin, P2 ₁ /c	
Elementarzelle	a= 9.777(5) Å	α= 90°
	b= 16.078(5) Å	β= 92.30(1)°
	c= 27.431(5) Å	γ= 90°
Volumen	4309(3) Å ³	
Z	4	
Berechnete Dichte	1.542 g/cm ³	
Linearer Absorptionskoeffizient	2.921 mm ⁻¹	
F(000)	2016	
Kristallgröße	0.29 x 0.27 x 0.05 mm ³	
Theta-Bereich	1.95 – 30.54°	
Indizes	-13 ≤ h ≤ 13, -22 ≤ k ≤ 20, -39 ≤ l ≤ 39	
Zahl der gemessenen Reflexe	52510	
Zahl der unabhängigen Reflexe	13115 [R(int)= 0.0303]	
Absorptionskorrektur	semiempirisch (SADABS)	
T _{min} , T _{max}	0.74482, 1	
Zahl der verfeinerten Parameter	554	
Goof	0.893	
R ₁ / wR ₂ [I > 2σ(I)]	R1= 0.0291, wR2= 0.0640	
R ₁ / wR ₂ (alle Reflexe)	R1= 0.0426, wR2= 0.0714	
Restelektronendichte	1.382 und -2.262 e · Å ⁻³	
Diffraktometer	CCD, Bruker SMART	
Programm zur Strukturlösung	SIR 97 [140]	

Tabelle 6.46: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) von $[\text{ReN}(\text{PyS})(\text{HL}^{\text{Ph}})(\text{L}^{\text{Ph}})] \cdot 3 \text{ MeOH}$.

	x	y	z	E(eq)
Re	7992(1)	723(1)	2335(1)	17(1)
N(10)	8934(2)	1530(2)	2183(1)	26(1)
C(1)	8885(2)	-260(2)	1964(1)	18(1)
C(2)	10041(3)	-1087(2)	1457(1)	22(1)
N(1)	9754(2)	-267(1)	1580(1)	18(1)
N(2)	8719(2)	-1090(1)	2050(1)	19(1)
N(3)	9415(2)	-1603(2)	1739(1)	23(1)
C(11)	10388(3)	428(2)	1344(1)	20(1)
C(12)	11803(3)	408(2)	1289(1)	24(1)
C(13)	12409(3)	1028(2)	1018(1)	30(1)
C(14)	11634(3)	1664(2)	818(1)	33(1)
C(15)	10234(3)	1697(2)	892(1)	31(1)
C(16)	9601(3)	1073(2)	1151(1)	25(1)
C(21)	8011(3)	-1470(2)	2434(1)	21(1)
C(22)	6868(2)	-1096(2)	2628(1)	21(1)
C(23)	6253(3)	-1467(2)	3020(1)	26(1)
C(24)	6729(3)	-2220(2)	3204(1)	28(1)
C(25)	7844(3)	-2605(2)	2997(1)	27(1)
C(26)	8488(3)	-2235(2)	2609(1)	24(1)
C(31)	10881(3)	-1348(2)	1053(1)	24(1)
C(32)	11937(3)	-1922(2)	1133(1)	32(1)
C(33)	12727(4)	-2163(2)	747(1)	42(1)
C(34)	12454(4)	-1840(2)	287(1)	44(1)
C(35)	11402(4)	-1284(2)	208(1)	40(1)
C(36)	10607(3)	-1034(2)	587(1)	30(1)
C(3)	8836(2)	346(2)	3017(1)	19(1)
C(4)	9821(3)	-97(2)	3718(1)	24(1)
N(4)	9984(2)	-16(2)	3221(1)	21(1)
N(5)	8046(2)	442(2)	3400(1)	22(1)

	x	y	z	E(eq)
N(6)	8610(3)	177(2)	3836(1)	27(1)
C(41)	11113(2)	-313(2)	2948(1)	20(1)
C(42)	11353(3)	-1164(2)	2929(1)	25(1)
C(43)	12383(3)	-1450(2)	2645(1)	31(1)
C(44)	13203(3)	-888(2)	2399(1)	34(1)
C(45)	12969(3)	-43(2)	2435(1)	33(1)
C(46)	11909(3)	255(2)	2709(1)	26(1)
C(51)	6764(3)	861(2)	3332(1)	23(1)
C(52)	5899(3)	969(2)	3715(1)	32(1)
C(53)	4714(3)	1435(2)	3625(1)	35(1)
C(54)	4455(3)	1775(2)	3166(1)	34(1)
C(55)	5334(3)	1633(2)	2789(1)	27(1)
C(56)	6526(3)	1150(2)	2856(1)	23(1)
C(61)	10873(3)	-381(2)	4078(1)	27(1)
C(62)	12238(3)	-172(2)	4034(1)	30(1)
C(63)	13204(4)	-402(2)	4398(1)	38(1)
C(64)	12802(4)	-837(3)	4799(1)	46(1)
C(65)	11453(5)	-1038(3)	4848(1)	54(1)
C(66)	10473(4)	-812(3)	4487(1)	45(1)
S	5988(1)	680(1)	1798(1)	21(1)
C(71)	6184(2)	47(2)	1274(1)	21(1)
N(72)	6269(3)	442(2)	845(1)	27(1)
C(73)	6361(3)	-25(2)	439(1)	34(1)
C(74)	6373(4)	-879(2)	438(1)	40(1)
C(75)	6256(3)	-1287(2)	880(1)	36(1)
C(76)	6155(3)	-825(2)	1300(1)	29(1)
C(81)	6590(4)	2621(2)	1155(2)	43(1)
O(81)	5760(3)	2170(2)	806(1)	47(1)
C(82)	3495(5)	3530(3)	272(2)	78(2)
O(82)	4150(4)	2855(2)	73(2)	82(1)
C(83)	8939(5)	6863(3)	829(2)	58(1)
O(83)	8912(4)	6703(2)	1335(1)	68(1)

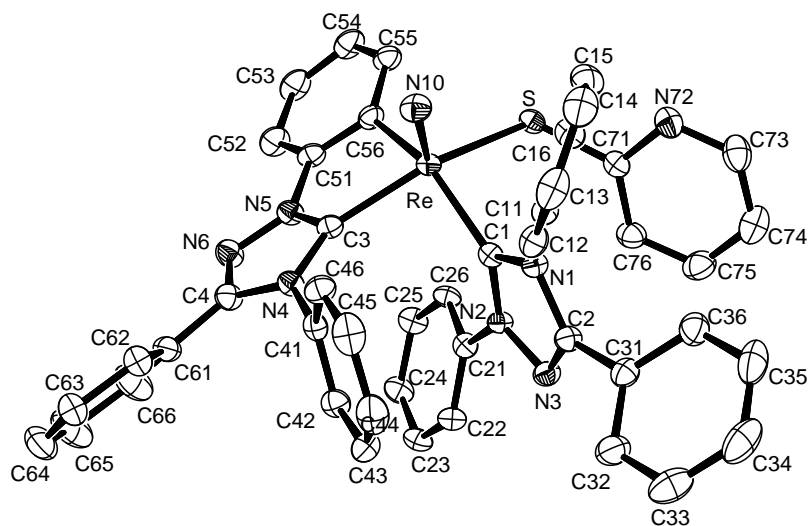


Abbildung 6.23: Ellipsoiddarstellung von $[\text{ReN}(\text{PyS})(\text{HL}^{\text{Ph}})(\text{L}^{\text{Ph}})]$. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit.

6.2.15 [ReOCl₂(OMe)(PPh₃)(HL^{Ph})]Tabelle 6.47: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von [ReOCl₂(OMe)(PPh₃)(HL^{Ph})].

Summenformel	C ₃₉ H ₃₃ Cl ₂ N ₃ O ₂ PRE	
M (g/mol)	863.75	
Messtemperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Monoklin, C2/c	
Elementarzelle	a= 34.116(3) Å	α= 90°
	b= 10.507(1) Å	β= 94.021(6)°
	c= 22.180(2) Å	γ= 90°
Volumen	7931(1) Å ³	
Z	8	
Berechnete Dichte	1.447 g/cm ³	
Linearer Absorptionskoeffizient	3.274 mm ⁻¹	
F(000)	3424	
Kristallgröße	0.18 x 0.13 x 0.07 mm ³	
Theta-Bereich	1.84 – 26.00°	
Indizes	-37 ≤ h ≤ 42, -11 ≤ k ≤ 12, -27 ≤ l ≤ 27	
Zahl der gemessenen Reflexe	18113	
Zahl der unabhängigen Reflexe	7610 [R(int)= 0.0634]	
Absorptionskorrektur	numerisch (Integration)	
T _{min} , T _{max}	0.6269, 0.7052	
Zahl der verfeinerten Parameter	434	
Goof	0.988	
R ₁ / wR ₂ [I > 2σ(I)]	R1= 0.0399, wR2= 0.1017	
R ₁ / wR ₂ (alle Reflexe)	R1= 0.0784, wR2= 0.1292	
Restelektronendichte	2.484 und -1.235 e · Å ⁻³	
Diffraktometer	IPDS, STOE	
Programm zur Strukturlösung	SIR 97 [140]	

Tabelle 6.48: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) von $[\text{ReOCl}_2(\text{OMe})(\text{PPh}_3)(\text{HL}^{\text{Ph}})]$.

	x	y	z	E(eq)
Re(1)	3674(1)	5033(1)	2964(1)	28(1)
O(1)	3231(2)	5732(6)	2881(3)	36(1)
Cl(1)	3521(1)	3838(2)	2020(1)	46(1)
Cl(2)	3973(1)	6624(2)	2339(1)	39(1)
C(1)	3848(2)	6129(8)	3746(3)	29(2)
N(1)	3617(2)	6883(7)	4077(3)	31(2)
C(11)	3195(3)	7084(8)	3992(4)	36(2)
C(12)	2961(3)	6547(9)	4408(4)	40(2)
C(13)	2556(3)	6750(11)	4327(5)	50(3)
C(14)	2400(3)	7489(12)	3851(5)	58(3)
C(15)	2642(3)	8019(11)	3454(5)	55(3)
C(16)	3044(3)	7854(9)	3522(4)	42(2)
N(2)	4203(2)	6218(7)	4037(3)	32(2)
C(21)	4583(2)	5702(10)	3904(4)	39(2)
C(22)	4767(3)	6203(11)	3420(4)	47(2)
C(23)	5139(3)	5736(13)	3317(5)	58(3)
C(24)	5318(3)	4829(13)	3682(4)	56(3)
C(25)	5137(3)	4355(13)	4159(5)	58(3)
C(26)	4757(3)	4814(11)	4269(4)	47(3)
N(3)	4209(2)	6964(7)	4556(3)	39(2)
C(2)	3845(3)	7357(8)	4569(4)	34(2)
C(31)	3718(3)	8210(9)	5039(4)	42(2)
C(32)	3491(3)	9261(10)	4903(5)	53(3)
C(33)	3406(4)	10137(12)	5350(5)	67(3)
C(34)	3559(5)	9936(14)	5936(5)	82(4)
C(35)	3757(5)	8860(16)	6076(5)	93(5)
C(36)	3850(4)	7990(11)	5632(5)	62(3)
P(1)	3379(1)	3297(2)	3537(1)	29(1)
C(41)	2863(2)	2992(9)	3328(3)	35(2)
C(42)	2606(3)	4022(9)	3238(4)	39(2)

	x	y	z	E(eq)
C(43)	2204(3)	3814(10)	3134(5)	47(2)
C(44)	2059(3)	2597(10)	3119(4)	45(2)
C(45)	2306(3)	1580(10)	3211(4)	45(2)
C(46)	2708(3)	1759(9)	3318(4)	39(2)
C(51)	3638(3)	1789(8)	3442(4)	36(2)
C(52)	3587(3)	1156(9)	2883(4)	43(2)
C(53)	3792(3)	52(11)	2794(5)	49(2)
C(54)	4048(3)	-434(10)	3240(5)	52(3)
C(55)	4102(3)	176(10)	3781(5)	54(3)
C(56)	3888(3)	1291(9)	3883(4)	44(2)
C(61)	3388(3)	3516(8)	4355(4)	34(2)
C(62)	3044(3)	3362(9)	4672(4)	42(2)
C(63)	3064(4)	3605(11)	5288(4)	55(3)
C(64)	3413(4)	3974(12)	5598(5)	66(3)
C(65)	3748(4)	4116(11)	5292(5)	58(3)
C(66)	3732(3)	3893(10)	4671(4)	44(2)
O(2)	4142(2)	4108(6)	3040(3)	36(1)
C(71)	4419(3)	3241(10)	2842(5)	47(2)

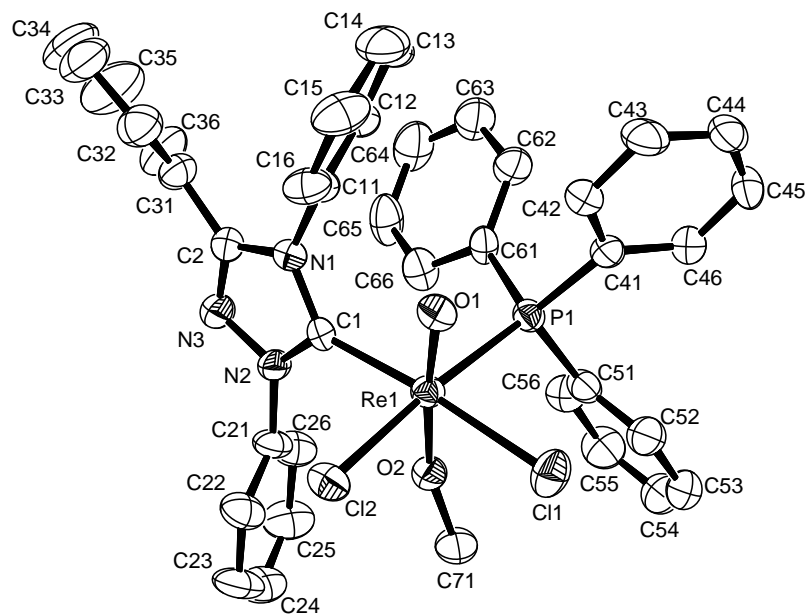


Abbildung 6.24: Ellipsoiddarstellung von $[\text{ReOCl}_2(\text{OMe})(\text{PPh}_3)(\text{HL}^{\text{Ph}})]$. Die Schwingungselipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit.

6.2.16 $[\text{ReOCl}_2(\text{OH})(\text{PPh}_3)(\text{HL}^{\text{Ph}})] \cdot \text{CH}_3\text{NO}_2$ Tabelle 6.49: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von $[\text{ReOCl}_2(\text{OH})(\text{PPh}_3)(\text{HL}^{\text{Ph}})] \cdot \text{CH}_3\text{NO}_2$.

Summenformel	$\text{C}_{39}\text{H}_{34}\text{Cl}_2\text{N}_4\text{O}_4\text{PRe}$	
M (g/mol)	910.77	
Messtemperatur	133(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Triklin, $\text{P}\bar{1}$	
Elementarzelle	a= 10.549(5) Å	$\alpha = 109.455(5)^\circ$
	b= 18.774(5) Å	$\beta = 101.833(5)^\circ$
	c= 21.136(5) Å	$\gamma = 101.783(5)^\circ$
Volumen	3691(2) Å ³	
Z	4	
Berechnete Dichte	1.639 g/cm ³	
Linearer Absorptionskoeffizient	3.527 mm ⁻¹	
F(000)	1808	
Kristallgröße	0.18 x 0.18 x 0.1 mm ³	
Theta-Bereich	1.20 – 23.26°	
Indizes	$-10 \leq h \leq 11, -20 \leq k \leq 18, -23 \leq l \leq 23$	
Zahl der gemessenen Reflexe	21369	
Zahl der unabhängigen Reflexe	10411 [R(int)= 0.1038]	
Absorptionskorrektur	semiempirisch (SADABS)	
T_{min}, T_{max}	0.687033, 1	
Zahl der verfeinerten Parameter	866	
Goof	1.043	
R_1 / wR_2 [I>2sigma(I)]	R1= 0.0766, wR2= 0.1746	
R_1 / wR_2 (alle Reflexe)	R1= 0.1351, wR2= 0.2058	
Restelektronendichte	1.575 und -2.079 e · Å ⁻³	
Diffraktometer	CCD, Bruker SMART	
Programm zur Strukturlösung	SIR 97 [140]	

Tabelle 6.50: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) von $[\text{ReOCl}_2\text{-(OH)(PPh}_3\text{)(HL}^{\text{Ph}})] \cdot \text{CH}_3\text{NO}_2$.

	x	y	z	E(eq)
Re(1)	2161(1)	5652(1)	8370(1)	24(1)
O(10)	1989(12)	6241(7)	7929(6)	33(3)
O(1)	2122(10)	4921(6)	8811(5)	23(2)
Cl(1)	4498(5)	6386(3)	9078(2)	35(1)
Cl(2)	1459(5)	6511(3)	9322(2)	33(1)
C(1)	2917(19)	4938(11)	7615(8)	37(5)
C(2)	3470(20)	4355(13)	6621(9)	52(6)
N(1)	2940(15)	4972(8)	6959(7)	33(4)
N(2)	3491(14)	4348(9)	7633(7)	34(4)
N(3)*	3815(15)	4005(9)	7020(7)	38(4)
C(11)*	2571(18)	5501(11)	6691(9)	32(4)
C(12)	3420(30)	6252(14)	6889(13)	87(9)
C(13)	3080(50)	6734(19)	6557(17)	147(18)
C(14)	1890(50)	6489(19)	6053(16)	112(14)
C(15)	990(30)	5845(19)	5907(12)	84(9)
C(16)	1330(20)	5278(14)	6186(10)	60(7)
C(21)	3763(19)	4033(11)	8147(9)	33(4)
C(22)	4670(20)	4453(10)	8781(10)	39(5)
C(23)	4990(20)	4125(11)	9285(10)	43(5)
C(24)	4350(20)	3338(12)	9101(10)	49(6)
C(25)	3450(20)	2894(11)	8444(10)	42(5)
C(26)	3135(18)	3249(11)	7963(9)	35(5)
C(31)*	3620(20)	4159(14)	5909(11)	55(6)
C(32)	3570(40)	3464(16)	5552(13)	109(13)
C(33)	3780(40)	3230(20)	4895(15)	121(14)
C(34)	3750(30)	3600(20)	4519(14)	109(13)
C(35)	3710(130)	4250(50)	4820(40)	690(140)
C(36)	3650(80)	4620(50)	5530(40)	350(40)
P(1)	-300(5)	4918(3)	7759(2)	28(1)

	x	y	z	E(eq)
C(71)	-1099(18)	4344(10)	8195(9)	29(4)
C(72)	-1962(18)	3562(10)	7826(10)	38(5)
C(73)	-2540(20)	3169(12)	8196(10)	46(5)
C(74)	-2330(20)	3531(11)	8898(9)	38(5)
C(75)	-1540(20)	4264(12)	9239(12)	50(6)
C(76)	-870(20)	4688(11)	8926(9)	39(5)
C(81)	-1329(19)	5583(10)	7683(8)	32(4)
C(82)	-2340(20)	5665(11)	7977(9)	38(5)
C(83)	-3090(20)	6182(14)	7914(11)	60(7)
C(84)	-2770(20)	6644(12)	7550(10)	55(6)
C(85)	-1735(18)	6581(10)	7246(8)	32(4)
C(86)	-1030(19)	6041(9)	7298(8)	30(4)
C(91)	-770(20)	4203(11)	6884(9)	37(5)
C(92)	-1870(20)	4094(11)	6305(9)	43(5)
C(93)	-2180(30)	3531(15)	5658(10)	77(8)
C(94)	-1480(30)	2984(13)	5547(11)	75(8)
C(95)	-351(18)	3031(11)	6068(8)	30(4)
C(96)	-60(20)	3662(11)	6732(9)	46(6)
Re(2)	6159(1)	9233(1)	7062(1)	30(1)
O(20)	7080(13)	9847(8)	6718(6)	45(3)
O(2)	5129(12)	8719(7)	7415(6)	39(3)
Cl(3)	7651(6)	8400(3)	6960(3)	57(2)
Cl(4)	4720(5)	8370(3)	5869(2)	45(1)
C(3)	7548(17)	9972(10)	8091(8)	23(4)
C(4)	8476(19)	10552(11)	9252(9)	33(5)
N(4)	7430(15)	9932(8)	8710(7)	32(4)
N(5)	8626(15)	10583(9)	8271(7)	32(4)
N(6)	9218(14)	10973(8)	8984(7)	30(3)
C(41)	6433(17)	9369(10)	8832(8)	26(4)
C(42)	5400(18)	9617(10)	9083(8)	32(4)
C(43)	4367(19)	9046(10)	9141(8)	29(4)
C(44)	4425(19)	8285(10)	8973(9)	36(5)

Kristallographischer Anhang

	x	y	z	E(eq)
C(45)	5540(20)	8038(10)	8728(9)	40(5)
C(46)	6522(19)	8619(9)	8673(8)	31(4)
C(51)	9274(19)	10878(10)	7820(9)	32(4)
C(52)	9907(19)	10414(11)	7411(9)	37(5)
C(53)	10470(20)	10727(13)	6965(10)	50(6)
C(54)	10370(20)	11429(12)	6945(10)	52(6)
C(55)	9830(20)	11891(12)	7388(11)	51(6)
C(56)	9245(18)	11626(10)	7864(10)	36(5)
C(61)	8738(18)	10808(11)	10010(8)	34(5)
C(62)	9027(17)	11584(11)	10435(9)	33(4)
C(63)	9430(20)	11860(12)	11167(8)	47(6)
C(64)	9488(19)	11317(11)	11468(9)	36(5)
C(65)	9201(19)	10528(13)	11068(9)	41(5)
C(66)	8776(18)	10247(11)	10340(9)	34(4)
P(2)	4522(6)	10019(3)	7117(2)	43(1)
C(101)*	2870(30)	9382(15)	6706(12)	61(6)
C(102)	2190(30)	9336(17)	6040(15)	99(11)
C(103)	840(50)	8720(30)	5670(20)	163(16)
C(104)	360(40)	8280(20)	5994(18)	106(11)
C(105)	910(40)	8260(20)	6610(20)	159(18)
C(106)	2280(20)	8894(14)	6970(13)	74(8)
C(111)*	4561(17)	10648(10)	7987(8)	24(4)
C(112)*	5800(20)	11202(12)	8458(10)	46(5)
C(113)	5890(20)	11684(10)	9101(10)	39(5)
C(114)	4780(30)	11669(12)	9348(10)	63(7)
C(115)	3560(20)	11112(12)	8906(10)	51(6)
C(116)	3460(20)	10619(10)	8246(9)	39(5)
C(121)	4730(30)	10706(14)	6688(11)	62(7)
C(122)	5340(30)	10581(18)	6138(13)	108(12)
C(123)	5440(40)	11100(20)	5782(15)	151(18)
C(124)	5200(30)	11833(15)	6069(11)	92(10)
C(125)	4680(20)	12001(15)	6620(10)	61(7)

	x	y	z	E(eq)
C(126)	4440(20)	11438(12)	6935(9)	52(6)
C(5)*	1480(20)	2991(15)	9965(12)	73(7)
N(7)	1640(20)	3606(12)	9666(10)	54(5)
O(3)	2382(19)	4251(11)	10049(12)	98(7)
O(4)	1020(19)	3465(13)	9042(10)	96(6)
C(6)	7810(30)	9240(20)	5400(14)	152(18)
N(8)	8230(30)	9020(20)	4801(16)	119(11)
O(5)	8250(30)	8309(18)	4465(12)	135(9)
O(6)	8610(40)	9490(20)	4545(18)	215(18)

* Diese Atome ließen sich nicht anisotrop verfeinern.

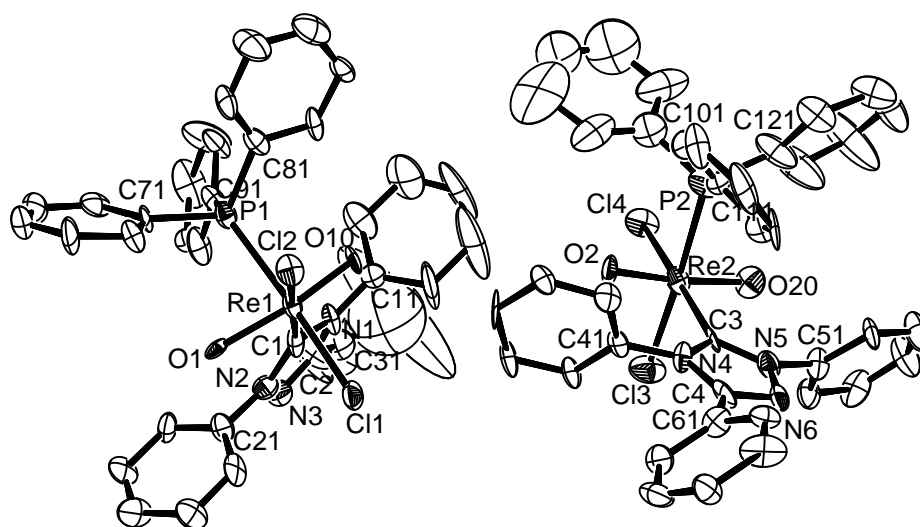


Abbildung 6.25: Ellipsoiddarstellung von $[\text{ReOCl}_2(\text{OH})(\text{PPh}_3)(\text{HL}^{\text{Ph}})]_2$. Die Schwingungselipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Aus Gründen der Übersichtlichkeit ist jeweils nur das erste Kohlenstoffatom eines Phenylringes benannt.

6.3 Imidazoliumsalz

6.3.1 (HL^{i-Pr})Cl

 Tabelle 6.51: Kristallographische Daten und Parameter der Strukturrechnung von (HL^{i-Pr})Cl.

Summenformel	C ₁₁ H ₂₁ ClN ₂	
M (g/mol)	216.75	
Messtemperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem, Raumgruppe	Monoklin, P2 ₁ /n	
Elementarzelle	a= 11.527(5) Å	α= 90°
	b= 7.645(5) Å	β= 105.455(5)°
	c= 15.025(5) Å	γ= 90°
Volumen	1276(1) Å ³	
Z	4	
Berechnete Dichte	1.128 g/cm ³	
Linearer Absorptionskoeffizient	0.269 mm ⁻¹	
F(000)	472	
Kristallgröße	0.48 x 0.08 x 0.08 mm ³	
Theta-Bereich	1.99 – 21.96°	
Indizes	-12 ≤ h ≤ 11, -8 ≤ k ≤ 8, -14 ≤ l ≤ 15	
Zahl der gemessenen Reflexe	7473	
Zahl der unabhängigen Reflexe	1553 [R(int)= 0.0313]	
Absorptionskorrektur	keine	
Zahl der verfeinerten Parameter	141	
Goof	0.827	
R ₁ / wR ₂ [I > 2σ(I)]	R ₁ = 0.0553, wR ₂ = 0.1662	
R ₁ / wR ₂ (alle Reflexe)	R ₁ = 0.0710, wR ₂ = 0.1888	
Restelektronendichte	0.485 und -0.433 e · Å ⁻³	
Diffraktometer	CCD, Bruker SMART	
Programm zur Strukturlösung	SHELXS 86 [141]	

Tabelle 6.52: Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) von $(\text{HL}^{\text{i-Pr}})\text{Cl}$.

	x	y	z	E(eq)
C(1)	5990(4)	907(6)	8355(3)	32(1)
N(2)	5338(3)	-459(5)	8462(2)	35(1)
C(3)	6072(4)	-1683(6)	9020(3)	35(1)
C(4)	7206(4)	-1021(5)	9234(3)	31(1)
N(5)	7132(3)	609(4)	8813(2)	28(1)
C(6)	5610(5)	-3360(6)	9300(3)	47(1)
C(7)	8368(4)	-1772(6)	9775(3)	40(1)
C(8)	4012(4)	-605(7)	8059(3)	46(1)
C(9)	3692(5)	-332(9)	7047(4)	65(2)
C(10A)*	3468(12)	130(60)	8685(18)	80(10)
C(10B)*	3348(14)	1180(40)	8362(18)	48(5)
C(11)	8143(3)	1856(6)	8930(3)	33(1)
C(12)	7941(4)	3063(7)	8106(4)	54(1)
C(13)	8303(4)	2837(6)	9829(3)	45(1)
Cl(1)	9793(1)	492(2)	2074(1)	41(1)

* Diese Atome befinden sich zu 50% auf fehlgeordneten Positionen.

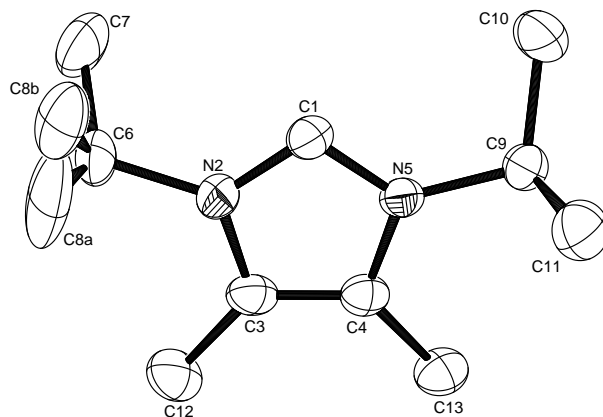


Abbildung 6.26: Ellipsoiddarstellung des $(\text{HL}^{\text{i-Pr}})^+$ -Kations. Die Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% der Aufenthaltswahrscheinlichkeit.

6.4 Hinterlegungsdaten

[TcO(9aneN ₃)(OCH ₂ CH ₂ O)]Br	CCDC - 291102
[TcO ₃ (9aneN ₃)]Br	CCDC - 291103
[TcCl ₂ (OH ₂)(9aneN ₃)]Cl	CCDC - 291104
[TcO ₂ (L ^{i-Pr}) ₄][TcO ₄] · 1.5 THF	CCDC - 237644
[TcN(L ^{Et}) ₄]Cl ₂	CCDC - 260946
[TcN(L ^{Et}) ₂ (OSiMe ₂ OSiMe ₂ O)]	CCDC - 260947
[TcN(L ^{Et})(PMe ₂ Ph)(OSiMe ₂ OSiMe ₂ O)]	CCDC - 260948
[ReO ₂ (L ^{i-Pr}) ₄][ReO ₄] · 1.5 THF	CCDC - 237643
[ReNCl(L ^{Et}) ₄]Cl · C ₆ H ₆	CCDC - 290928
{[ReN(PMe ₂ Ph) ₃]{ReO ₃ N}} ₂ · 4MeOH	CCDC - 272144
{[ReN(PMe ₂ Ph) ₃]{ReO ₃ N}} ₂ · 4MeOH (2. Modifikation)	CCDC - 272145
{[ReN(PMe ₂ Ph) ₃]{ReO ₃ N}} ₂ · 3MeOH · H ₂ O	CCDC - 272146
[Re(NPh)Cl(L ^{Et}) ₄](PF ₆) ₂	CCDC - 286138
[Re(NPh)Br(L ^{Et}) ₄](PF ₆) ₂ · 0.5 MeOH	CCDC - 286139
[Re(NPh)(OH)(L ^{Et}) ₄](PF ₆) ₂ · 0.25 MeOH	CCDC - 286140
[ReNCl ₂ (PMe ₂ Ph) ₂ (HL ^{Ph})]	CCDC - 213784
[ReNCl(HL ^{Ph})(L ^{Ph})]	CCDC - 263443
[ReN(NCS)(HL ^{Ph})(L ^{Ph})]	CCDC - 213785
[ReN(CN)(HL ^{Ph})(L ^{Ph})]	CCDC - 263444
[ReN(PyS)(HL ^{Ph})(L ^{Ph})]	CCDC - 263445
[ReOCl ₂ (OMe)(PPh ₃)(HL ^{Ph})]	CCDC - 290930
[ReOCl ₂ (OH)(PPh ₃)(HL ^{Ph})] · CH ₃ NO ₂	CCDC - 290929