

9. Kristallographischer Anhang

Kristallographische Daten der Kupferverbindungen

Tetrabutylammonium-cyano(bromo)cuprat(I) 1	83
Tetrabutylammonium-cyano(iodo)cuprat(I) 2	87
Bis(triphenylphosphoranyliden)ammonium-cyano(diiodo)dicuprat(I) 3	91
Tetramethylammonium-thiocyanato(bromo)cuprat(I) 4	94
Tetramethylammonium-(triiodo)dicuprat(I) 5	96
Tetrabutylammonium-tetracyanotricuprat(I)-acetonitrilsolvat 6	98
Acetonitril(cyano)kupfer(I) 7	101
Acetonitril(thiocyanato)kupfer(I) 8	103
Tetrabutylammonium-(dibromo)cuprat(I) 10	105

Kristallographische Daten der Silberverbindungen

Tetramethylammonium-(dibromo)argentat(I) 11	107
Tetraethylammonium-(tribromo)diargentat(I) 12	109
Tetraethylammonium-(trichloro)diargentat(I) 13	113
Tetrabutylammonium-(tetraiodo)triargentat(I) 14	117
<i>tert.</i> -Butylammonium-(hexaiodo)pentaargentat(I) 15	120
Pentacäsium-bis(chloro-tetracyano-tetraargentat(I))- tetrachloroargentat(I) 16	123
Hexakis(tetraethylammonium)-(undekaiodo)hexakisargentat(I)-iodid 17	126
Pentakis(tetraethylammonium)-(undekabromo)hexaargentat(I) 18	129
Bis(triphenylphosphoranyliden)ammonium- dicyanoargentat(I)-acetonitrilsolvat 19	134
Pentacäsium-tetrakis(dicyanoargentat(I))-iodid 20	137
Bis(triphenylphosphoranyliden)ammonium-dithiocyanatoargentat(I) 21	139
Bis(triphenylphosphoranyliden)ammonium-(chloroiodo)argentat(I) 22	142

Tetrabutylammonium-cyano(bromo)cuprat(I) 1

Tab. 1 Kristall- und Strukturdaten von 1.

Summenformel	C ₁₇ H ₃₆ Br Cu N ₂	
Molmasse	411.93 g/mol	
Meßtemperatur	203(2) K	
Kristallsystem, Raumgruppe	orthorhombisch, Pna2 ₁ (33)	
Zelldimensionen	a = 1749.56(11) pm	α = 90°.
	b = 1217.41(8) pm	β = 90°.
	c = 1924.34(12) pm	γ = 90°.
Volumen	4.0987(5) nm ³	
Z, Dichte (berechnet)	8, 1.335 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	3.013 mm ⁻¹	
F(000)	1728	
Kristalldimensionen	0.4 x 0.5 x 0.3 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	1.98 bis 27.55°.	
Bereich der Indizes	-22<=h<=22, -15<=k<=15, -24<=l<=24	
Anzahl gemessene Reflexe	39470	
Unabhängige Reflexe	9414 [R(int) = 0.0898]	
Vollständigkeit zu Theta = 27.55°	99.9 %	
Reflexe >2σ(I)°	6546	
Methode der Strukturverfeinerung	Kleinste Quadrateverfeinerung (Vollmatrix) an F ²	
Reflexe / festgehalten / Parameter	9414 / 1 / 381	
Goodness-of-fit gegen F ²	0.901	
R-Wert [I>2σ(I)]	R1 = 0.0399, wR2 = 0.0792	
R-Wert (alle Daten)	R1 = 0.0692, wR2 = 0.0858	
Absol. Strukturparameter (Flack-Par.)	0.076(8)	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.813 und -1.285 10 ⁻⁶ e · pm ⁻³	

Tab. 2 Atomkoordinaten (x 10⁴) und equivalente isotrope Temperaturfaktoren (pm²x 10⁻¹) für 1. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten Uij Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Br(1)	4970(1)	2067(1)	-1218(1)	22(1)
Cu(1)	5050(1)	2124(1)	-2486(1)	26(1)
Br(2)	2500(1)	1697(1)	-4886(1)	25(1)
Cu(2)	2516(1)	1927(1)	-3625(1)	25(1)
C(1)	3500(3)	1806(4)	-3216(2)	28(1)
N(11)	3500(3)	1806(4)	-3216(2)	28(1)
N(1)	4088(3)	1853(4)	-2928(2)	30(1)
C(11)	4088(3)	1853(4)	-2928(2)	30(1)
C(2)	6006(3)	2475(4)	-2908(2)	26(1)
N(22)	6006(3)	2475(4)	-2908(2)	26(1)
N(2)	1569(3)	2296(4)	-3202(2)	27(1)
C(22)	1569(3)	2296(4)	-3202(2)	27(1)
N(3)	4398(2)	9064(3)	51(2)	16(1)
C(311)	3611(2)	9283(3)	356(2)	18(1)
C(312)	3280(2)	10415(3)	210(2)	21(1)
C(313)	2461(3)	10472(4)	453(2)	29(1)
C(314)	2359(3)	10337(6)	1234(3)	55(2)
C(321)	4382(2)	9119(4)	-742(2)	19(1)
C(322)	3811(2)	8360(3)	-1088(2)	18(1)
C(323)	3873(2)	8473(3)	-1877(2)	21(1)
C(324)	3269(3)	7802(4)	-2261(2)	29(1)
C(331)	4620(3)	7909(4)	308(2)	20(1)
C(332)	5341(3)	7431(4)	-19(3)	28(1)
C(333)	5530(3)	6340(5)	329(3)	32(1)
C(334)	4971(3)	5426(5)	183(3)	50(2)
C(341)	4972(3)	9930(4)	278(2)	21(1)
C(342)	4980(3)	10164(4)	1060(2)	25(1)
C(343)	5621(3)	10968(4)	1236(2)	30(1)
C(344)	5539(3)	12089(4)	912(3)	32(1)

N(4)	2375(2)	8735(3)	3744(2)	15(1)
C(411)	1646(2)	9389(3)	3654(2)	16(1)
C(412)	1363(2)	9542(4)	2909(2)	20(1)
C(413)	570(2)	10067(4)	2932(2)	23(1)
C(414)	242(3)	10296(5)	2211(3)	33(1)
C(421)	2621(2)	8834(4)	4501(2)	17(1)
C(422)	2001(2)	8552(4)	5028(2)	23(1)
C(423)	2312(2)	8665(4)	5765(3)	27(1)
C(424)	1685(3)	8608(5)	6310(3)	46(2)
C(431)	3022(2)	9170(3)	3290(2)	16(1)
C(432)	3194(2)	10385(3)	3340(2)	21(1)
C(433)	3850(2)	10668(4)	2847(2)	21(1)
C(434)	3995(3)	11890(4)	2804(2)	27(1)
C(441)	2225(2)	7547(3)	3539(2)	20(1)
C(442)	2890(2)	6760(3)	3671(2)	19(1)
C(443)	2734(2)	5639(4)	3350(2)	24(1)
C(444)	3388(3)	4842(4)	3479(3)	37(1)

Tab. 3 Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für 1.

Br(1)-Cu(1)	244.48(6)	N(4)-C(421)	152.3(5)
Cu(1)-C(2)	190.8(5)	N(4)-C(441)	152.2(5)
Cu(1)-N(1)	191.4(5)	N(4)-C(431)	152.5(5)
Br(2)-Cu(2)	244.27(7)	C(411)-C(412)	153.0(5)
Cu(2)-C(1)	189.8(5)	C(412)-C(413)	152.8(6)
Cu(2)-N(2)	190.1(5)	C(413)-C(414)	152.7(6)
C(1)-N(1)	117.0(5)	C(421)-C(422)	152.5(6)
C(2)-C(22)#1	116.9(5)	C(422)-C(423)	152.5(6)
C(2)-N(2)#1	116.9(5)	C(423)-C(424)	151.9(7)
N(2)-N(22)#2	116.9(5)	C(431)-C(432)	151.2(6)
N(2)-C(2)#2	116.9(5)	C(432)-C(433)	152.9(6)
N(3)-C(341)	152.0(5)	C(433)-C(434)	151.1(6)
N(3)-C(311)	152.0(5)	C(441)-C(442)	152.8(6)
N(3)-C(321)	152.8(5)	C(442)-C(443)	152.2(6)
N(3)-C(331)	154.1(6)	C(443)-C(444)	152.0(6)
C(311)-C(312)	152.2(6)		
C(312)-C(313)	151.0(6)	C(2)-Cu(1)-N(1)	128.36(19)
C(313)-C(314)	152.1(7)	C(2)-Cu(1)-Br(1)	118.72(13)
C(321)-C(322)	151.5(6)	N(1)-Cu(1)-Br(1)	112.87(12)
C(322)-C(323)	152.8(6)	C(1)-Cu(2)-N(2)	129.17(19)
C(323)-C(324)	152.8(6)	C(1)-Cu(2)-Br(2)	114.43(13)
C(331)-C(332)	152.5(6)	N(2)-Cu(2)-Br(2)	116.23(13)
C(332)-C(333)	152.4(7)	N(1)-C(1)-Cu(2)	171.8(4)
C(333)-C(334)	150.8(8)	C(1)-N(1)-Cu(1)	172.8(4)
C(341)-C(342)	153.1(5)	C(22)#1-C(2)-Cu(1)	176.0(4)
C(342)-C(343)	152.6(7)	N(2)#1-C(2)-Cu(1)	176.0(4)
C(343)-C(344)	150.7(7)	N(22)#2-N(2)-Cu(2)	176.4(4)
N(4)-C(411)	151.4(5)	C(2)#2-N(2)-Cu(2)	176.4(4)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

#1 $x+1/2, -y+1/2, z$ #2 $x-1/2, -y+1/2, z$

Tab. 4 Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für 1.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^2 U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Br(1)	23(1)	32(1)	12(1)	4(1)	2(1)	1(1)
Cu(1)	26(1)	34(1)	16(1)	-1(1)	1(1)	5(1)
Br(2)	32(1)	29(1)	13(1)	-5(1)	-1(1)	7(1)
Cu(2)	28(1)	33(1)	15(1)	-1(1)	-2(1)	2(1)
C(1)	27(3)	44(3)	13(2)	-6(2)	6(2)	2(2)

N(11)	27(3)	44(3)	13(2)	-6(2)	6(2)	2(2)
N(1)	33(3)	43(3)	13(2)	-3(2)	4(2)	4(2)
C(11)	33(3)	43(3)	13(2)	-3(2)	4(2)	4(2)
C(2)	27(3)	41(3)	10(3)	-4(2)	-8(2)	2(2)
N(22)	27(3)	41(3)	10(3)	-4(2)	-8(2)	2(2)
N(2)	27(3)	44(3)	11(2)	1(2)	-9(2)	2(2)
C(22)	27(3)	44(3)	11(2)	1(2)	-9(2)	2(2)
N(3)	19(2)	24(2)	6(2)	4(2)	2(2)	-3(2)
C(311)	20(2)	27(2)	8(2)	2(2)	3(2)	-2(2)
C(312)	30(2)	24(2)	7(2)	2(2)	-2(2)	2(2)
C(313)	31(3)	38(3)	19(2)	4(2)	-4(2)	2(2)
C(314)	49(4)	90(5)	25(3)	25(3)	24(3)	33(3)
C(321)	25(2)	29(2)	4(2)	0(2)	3(2)	-2(2)
C(322)	24(2)	25(2)	6(2)	4(2)	3(2)	-5(2)
C(323)	23(2)	34(2)	7(2)	3(2)	1(2)	-3(2)
C(324)	31(3)	43(3)	13(3)	-2(2)	-2(2)	-1(2)
C(331)	23(2)	23(2)	14(2)	3(2)	3(2)	1(2)
C(332)	27(2)	35(3)	22(3)	8(2)	5(2)	6(2)
C(333)	33(3)	42(3)	22(3)	-2(2)	1(2)	11(2)
C(334)	69(4)	32(3)	48(4)	3(3)	3(4)	6(3)
C(341)	20(2)	29(3)	13(3)	2(2)	2(2)	-5(2)
C(342)	33(3)	36(3)	6(2)	1(2)	0(2)	-5(2)
C(343)	31(3)	47(3)	13(3)	-3(2)	-8(2)	-3(2)
C(344)	34(3)	38(3)	23(3)	-9(2)	-2(2)	-3(2)
N(4)	16(2)	21(2)	9(2)	-1(2)	0(2)	-1(1)
C(411)	17(2)	25(2)	6(2)	-1(2)	1(2)	2(2)
C(412)	27(2)	24(2)	8(2)	-2(2)	-3(2)	2(2)
C(413)	22(2)	33(3)	14(2)	4(2)	-2(2)	2(2)
C(414)	32(3)	46(3)	20(3)	8(2)	-7(2)	10(2)
C(421)	19(2)	24(2)	9(2)	-1(2)	-4(2)	1(2)
C(422)	21(2)	37(3)	10(2)	4(2)	1(2)	-2(2)
C(423)	36(3)	35(3)	10(2)	4(2)	-2(2)	1(2)
C(424)	42(3)	85(4)	13(3)	9(3)	4(2)	4(3)
C(431)	15(2)	27(2)	5(2)	0(2)	3(2)	-1(2)
C(432)	29(2)	24(2)	10(2)	-1(2)	5(2)	-1(2)
C(433)	20(2)	28(3)	15(2)	-1(2)	-2(2)	-2(2)
C(434)	24(2)	34(3)	25(3)	12(2)	3(2)	-1(2)
C(441)	19(2)	25(3)	15(3)	-3(2)	0(2)	-2(2)
C(442)	21(2)	22(2)	14(2)	2(2)	3(2)	-1(2)
C(443)	28(2)	25(2)	18(3)	-3(2)	-1(2)	-2(2)
C(444)	44(3)	28(3)	39(3)	-9(2)	-5(3)	6(2)

Tab. 5 Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für 1.

	x	y	z	U(eq)
H(31A)	3253	8724	173	22
H(31B)	3640	9182	866	22
H(31C)	3586	10980	454	25
H(31D)	3304	10568	-295	25
H(31E)	2165	9890	215	35
H(31F)	2243	11189	313	35
H(31G)	2283	9559	1344	82
H(31H)	1913	10759	1387	82
H(31I)	2816	10608	1474	82
H(32A)	4266	9883	-882	23
H(32B)	4899	8940	-918	23
H(32C)	3287	8551	-936	22
H(32D)	3915	7591	-950	22
H(32E)	3818	9257	-2005	26
H(32F)	4387	8229	-2026	26
H(32G)	3339	7020	-2156	43
H(32H)	3322	7919	-2763	43

H(32I)	2759	8035	-2112	43
H(33A)	4692	7938	818	24
H(33B)	4189	7403	214	24
H(33C)	5772	7949	41	34
H(33D)	5259	7316	-523	34
H(33E)	6044	6103	174	39
H(33F)	5554	6457	838	39
H(33G)	4487	5578	421	75
H(33H)	5182	4729	352	75
H(33I)	4882	5376	-318	75
H(34A)	4859	10622	29	25
H(34B)	5489	9689	136	25
H(34C)	4483	10479	1203	30
H(34D)	5058	9470	1319	30
H(34E)	5644	11055	1747	36
H(34F)	6113	10646	1084	36
H(34G)	5478	12011	408	48
H(34H)	5996	12526	1010	48
H(34I)	5089	12457	1106	48
H(41A)	1725	10125	3861	19
H(41B)	1237	9023	3924	19
H(41C)	1336	8823	2670	23
H(41D)	1720	10021	2648	23
H(41E)	218	9573	3186	27
H(41F)	601	10767	3194	27
H(41G)	561	10840	1974	49
H(41H)	-280	10580	2257	49
H(41I)	234	9614	1941	49
H(42A)	2795	9596	4586	21
H(42B)	3064	8342	4579	21
H(42C)	1822	7790	4951	27
H(42D)	1560	9052	4966	27
H(42E)	2686	8071	5852	33
H(42F)	2583	9376	5808	33
H(42G)	1343	9240	6257	70
H(42H)	1915	8621	6774	70
H(42I)	1393	7928	6250	70
H(43A)	3494	8762	3409	19
H(43B)	2899	8998	2800	19
H(43C)	3337	10575	3823	25
H(43D)	2734	10814	3213	25
H(43E)	4321	10297	3009	25
H(43F)	3730	10386	2377	25
H(43G)	3536	12259	2628	41
H(43H)	4424	12030	2489	41
H(43I)	4118	12174	3267	41
H(44A)	2096	7524	3039	24
H(44B)	1774	7280	3800	24
H(44C)	3364	7070	3469	22
H(44D)	2969	6676	4178	22
H(44E)	2258	5334	3549	28
H(44F)	2658	5725	2843	28
H(44G)	3861	5146	3287	56
H(44H)	3274	4139	3253	56
H(44I)	3448	4728	3980	56

Tetrabutylammonium-cyano(iodo)cuprat(I) 2

Tab. 1 Kristall- und Strukturdaten von 2.

Summenformel	C ₁₇ H ₃₆ Cu I N ₂	
Molmasse	458.92 g/mol	
Meßtemperatur	203(2) K	
Kristallsystem, Raumgruppe	monoklin, P2 ₁ /c (14)	
Zelldimensionen	a = 2168.3(2) pm b = 1223.3(2) pm c = 1763.2(3) pm	$\alpha = 90^\circ$ $\beta = 111.710(10)^\circ$ $\gamma = 90^\circ$
Volumen	4.3451(11) nm ³	
Z, Dichte (berechnet)	8, 1.403 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	2.424 mm ⁻¹	
F(000)	1872	
Kristalldimensionen	0.2 x 0.3 x 0.25 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	2.49 bis 23.00°.	
Bereich der Indizes	-21<=h<=23, -3<=k<=13, -18<=l<=0	
Anzahl gemessene Reflexe	7121	
Unabhängige Reflexe	5596 [R(int) = 0.0303]	
Vollständigkeit zu Theta = 23.00°	92.5 %	
Reflexe >2sigma(I)°	3951	
Methode der Strukturverfeinerung	Kleinste Quadrateverfeinerung (Vollmatrix) an F ²	
Reflexe / festgehalten / Parameter	5596 / 0 / 315	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.011	
R-Wert [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0344, wR2 = 0.0788	
R-Wert (alle Daten)	R1 = 0.0697, wR2 = 0.0904	
Größte und kleinste Restelektronendichte	1.045 und -0.734 10 ⁻⁶ e · pm ⁻³	

Tab. 2. Atomkoordinaten (x 10⁴) und equivalente isotrope Temperaturfaktoren (pm²x 10⁻¹) für 2.
U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten Uij Tensors.

	x	y	z	U(eq)
I(1)	638(1)	6995(1)	4507(1)	27(1)
I(2)	4276(1)	6955(1)	3830(1)	27(1)
Cu(1)	1931(1)	7156(1)	5228(1)	29(1)
Cu(2)	2975(1)	6964(1)	3175(1)	30(1)
N(1)	2350(3)	6893(5)	4465(4)	35(2)
C(11)	2350(3)	6893(5)	4465(4)	35(2)
C(1)	2597(3)	6856(5)	3993(4)	37(2)
N(11)	2597(3)	6856(5)	3993(4)	37(2)
N(2)	2572(3)	7209(4)	2036(4)	27(2)
C(22)	2572(3)	7209(4)	2036(4)	27(2)
C(2)	2300(3)	7554(4)	6346(4)	29(2)
N(22)	2300(3)	7554(4)	6346(4)	29(2)
N(3)	4319(2)	8896(3)	1560(2)	19(1)
C(311)	4131(3)	7716(4)	1617(3)	21(1)
C(312)	4211(3)	6944(5)	992(3)	27(1)
C(313)	4018(3)	5806(5)	1133(3)	33(2)
C(314)	4150(3)	4971(5)	575(4)	47(2)
C(321)	4303(3)	9515(4)	2300(3)	21(1)
C(322)	3619(3)	9640(4)	2349(3)	25(1)
C(323)	3695(3)	10197(5)	3156(3)	26(1)
C(324)	3032(3)	10279(5)	3266(4)	35(2)
C(331)	5019(3)	8977(4)	1562(3)	22(1)
C(332)	5559(3)	8416(5)	2269(3)	25(1)
C(333)	6235(3)	8685(6)	2246(4)	45(2)
C(334)	6800(3)	8185(6)	2951(4)	50(2)
C(341)	3843(3)	9379(4)	771(3)	20(1)
C(342)	3912(3)	10596(4)	663(3)	25(1)
C(343)	3466(3)	10962(5)	-176(4)	39(2)
C(344)	3520(3)	12187(5)	-280(4)	48(2)
N(4)	713(2)	8766(3)	2188(2)	20(1)

C(411)	1171(3)	9240(4)	1778(3)	22(1)
C(412)	1106(3)	10446(5)	1602(3)	24(1)
C(413)	1526(3)	10755(5)	1104(3)	30(1)
C(414)	1538(3)	11961(5)	979(4)	42(2)
C(421)	0(3)	8854(4)	1591(3)	23(1)
C(422)	-508(3)	8303(4)	1873(3)	26(1)
C(423)	-1205(3)	8520(6)	1276(4)	46(2)
C(424)	-1726(4)	8029(6)	1572(5)	55(2)
C(431)	913(3)	7586(4)	2416(3)	21(1)
C(432)	772(3)	6806(4)	1709(3)	26(1)
C(433)	1010(3)	5669(5)	1999(4)	37(2)
C(434)	855(4)	4850(6)	1306(5)	56(2)
C(441)	775(3)	9414(4)	2957(3)	22(1)
C(442)	1468(3)	9535(4)	3590(3)	24(1)
C(443)	1425(3)	10123(5)	4328(3)	31(1)
C(444)	2103(3)	10279(5)	4997(4)	39(2)

Tab. 3. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **2**.

I(2)-Cu(2)	262.26(9)	N(4)-C(431)	151.8(7)
I(1)-Cu(1)	262.19(9)	N(4)-C(441)	153.3(6)
Cu(2)-N(2)	189.4(6)	N(4)-C(411)	154.2(6)
Cu(2)-C(1)	191.0(7)	C(411)-C(412)	150.4(8)
Cu(1)-C(2)	189.7(7)	C(412)-C(413)	152.7(8)
Cu(1)-N(1)	190.7(7)	C(413)-C(414)	149.4(8)
N(1)-C(1)	114.7(7)	C(421)-C(422)	152.4(7)
N(2)-N(22)#1	117.5(7)	C(422)-C(423)	151.2(9)
N(2)-C(2)#1	117.5(7)	C(423)-C(424)	153.0(10)
C(2)-C(22)#2	117.5(7)	C(431)-C(432)	151.0(8)
C(2)-N(2)#2	117.5(7)	C(432)-C(433)	150.6(8)
N(3)-C(341)	151.3(7)	C(433)-C(434)	151.9(9)
N(3)-C(311)	151.3(7)	C(441)-C(442)	151.2(7)
N(3)-C(321)	152.0(6)	C(442)-C(443)	151.9(8)
N(3)-C(331)	152.1(6)	C(443)-C(444)	151.9(8)
C(311)-C(312)	151.0(7)		
C(312)-C(313)	150.1(8)	N(2)-Cu(2)-C(1)	130.8(2)
C(313)-C(314)	151.7(8)	N(2)-Cu(2)-I(2)	117.84(15)
C(321)-C(322)	152.6(7)	C(1)-Cu(2)-I(2)	111.07(16)
C(322)-C(323)	153.0(7)	C(2)-Cu(1)-N(1)	130.4(2)
C(323)-C(324)	152.5(8)	C(2)-Cu(1)-I(1)	119.16(15)
C(331)-C(332)	152.2(8)	N(1)-Cu(1)-I(1)	110.35(16)
C(332)-C(333)	151.8(8)	C(1)-N(1)-Cu(1)	172.5(6)
C(333)-C(334)	151.4(9)	N(1)-C(1)-Cu(2)	173.3(6)
C(341)-C(342)	151.5(8)	N(22)#1-N(2)-Cu(2)	174.0(5)
C(342)-C(343)	150.5(8)	C(2)#1-N(2)-Cu(2)	174.0(5)
C(343)-C(344)	152.0(8)	C(22)#2-C(2)-Cu(1)	175.3(5)
N(4)-C(421)	151.7(7)	N(2)#2-C(2)-Cu(1)	175.3(5)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

#1 x,-y+3/2,z-1/2 #2 x,-y+3/2,z+1/2

Tab. 4. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **2**.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
I(1)	25(1)	39(1)	15(1)	1(1)	6(1)	-4(1)
I(2)	26(1)	38(1)	19(1)	5(1)	10(1)	8(1)
Cu(1)	30(1)	40(1)	18(1)	4(1)	9(1)	2(1)
Cu(2)	32(1)	38(1)	22(1)	4(1)	12(1)	6(1)
N(1)	28(3)	57(4)	17(3)	10(3)	5(3)	11(3)
C(11)	28(3)	57(4)	17(3)	10(3)	5(3)	11(3)

C(1)	26(3)	61(4)	19(3)	7(3)	3(3)	9(3)
N(11)	26(3)	61(4)	19(3)	7(3)	3(3)	9(3)
N(2)	26(3)	39(3)	21(4)	4(3)	11(3)	1(2)
C(22)	26(3)	39(3)	21(4)	4(3)	11(3)	1(2)
C(2)	24(3)	35(3)	32(5)	2(3)	16(3)	3(3)
N(22)	24(3)	35(3)	32(5)	2(3)	16(3)	3(3)
N(3)	21(3)	27(3)	8(2)	0(2)	3(2)	-2(2)
C(311)	21(3)	24(3)	17(3)	3(2)	6(3)	1(2)
C(312)	37(4)	29(3)	15(3)	-3(3)	11(3)	1(3)
C(313)	41(4)	30(3)	25(3)	-2(3)	7(3)	1(3)
C(314)	63(5)	35(4)	35(4)	-7(3)	7(4)	-3(3)
C(321)	22(3)	29(3)	13(3)	-6(2)	8(3)	0(2)
C(322)	26(3)	29(3)	17(3)	-3(2)	4(3)	-2(3)
C(323)	28(3)	31(3)	19(3)	-4(3)	8(3)	3(3)
C(324)	30(4)	49(4)	26(4)	-12(3)	10(3)	0(3)
C(331)	22(3)	19(3)	26(3)	-4(2)	12(3)	-2(2)
C(332)	19(3)	34(3)	23(3)	-3(3)	10(3)	2(3)
C(333)	25(4)	63(5)	42(4)	13(4)	6(3)	6(3)
C(334)	29(4)	65(5)	51(5)	1(4)	11(3)	6(4)
C(341)	23(3)	24(3)	12(3)	-1(2)	6(2)	-1(2)
C(342)	20(3)	30(3)	23(3)	0(3)	4(3)	0(2)
C(343)	43(4)	27(3)	35(4)	5(3)	2(3)	0(3)
C(344)	52(5)	31(4)	43(4)	11(3)	-4(4)	0(3)
N(4)	26(3)	21(3)	12(2)	-2(2)	8(2)	5(2)
C(411)	23(3)	30(3)	16(3)	1(2)	10(3)	0(3)
C(412)	23(3)	33(3)	14(3)	0(2)	6(3)	7(3)
C(413)	42(4)	32(3)	15(3)	-2(3)	8(3)	-5(3)

Tab. 5. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **2**.

	x	y	z	U(eq)
H(31A)	4398	7445	2156	25
H(31B)	3671	7695	1569	25
H(31C)	3934	7184	448	32
H(31D)	4669	6949	1030	32
H(31E)	3549	5795	1046	40
H(31F)	4264	5602	1696	40
H(31G)	3873	5125	19	71
H(31H)	4054	4252	719	71
H(31I)	4608	5010	633	71
H(32A)	4487	10238	2301	26
H(32B)	4591	9142	2788	26
H(32C)	3415	8928	2320	30
H(32D)	3336	10077	1895	30
H(32E)	4005	9784	3605	32
H(32F)	3876	10924	3167	32
H(32G)	2733	10724	2840	52
H(32H)	3099	10604	3786	52
H(32I)	2846	9562	3242	52
H(33A)	5132	9744	1566	26
H(33B)	5020	8666	1056	26
H(33C)	5538	8661	2782	30
H(33D)	5490	7631	2231	30
H(33E)	6255	8421	1737	54
H(33F)	6290	9472	2260	54
H(33G)	6778	8429	3457	74
H(33H)	7216	8405	2922	74
H(33I)	6765	7402	2920	74
H(34A)	3393	9235	736	24
H(34B)	3904	9002	320	24
H(34C)	3799	10991	1070	30
H(34D)	4370	10764	745	30
H(34E)	3010	10776	-263	46

H(34F)	3587	10580	-582	46
H(34G)	3240	12563	-51	72
H(34H)	3381	12358	-850	72
H(34I)	3972	12414	-4	72
H(41A)	1627	9089	2128	27
H(41B)	1084	8855	1268	27
H(41C)	1255	10853	2111	29
H(41D)	645	10629	1300	29
H(41E)	1976	10496	1384	36
H(41F)	1348	10395	577	36
H(41G)	1106	12203	626	63
H(41H)	1856	12129	734	63
H(41I)	1661	12327	1495	63
H(42A)	-30	8531	1076	28
H(42B)	-114	9621	1493	28
H(42C)	-428	7521	1919	31
H(42D)	-461	8579	2407	31
H(42E)	-1258	8209	750	55
H(42F)	-1275	9303	1206	55
H(42G)	-1753	7255	1476	83
H(42H)	-2150	8358	1280	83
H(42I)	-1600	8166	2145	83
H(43A)	1385	7566	2738	25
H(43B)	683	7326	2761	25
H(43C)	298	6790	1396	31
H(43D)	991	7064	1353	31
H(43E)	803	5428	2373	44
H(43F)	1486	5687	2298	44
H(43G)	414	4975	918	84
H(43H)	885	4122	1520	84
H(43I)	1168	4935	1042	84
H(44A)	595	10140	2791	26
H(44B)	501	9062	3213	26
H(44C)	1742	9950	3366	29
H(44D)	1668	8820	3750	29
H(44E)	1219	10832	4159	37
H(44F)	1145	9705	4542	37
H(44G)	2304	9579	5174	59
H(44H)	2054	10656	5449	59
H(44I)	2379	10703	4790	59

Bis(triphenylphosphoranyliden)ammonium-cyano(diiodo)dicutrat(I) **3**

Tab. 1. Kristall- und Strukturdaten von **3**.

Summenformel	C ₃₇ H ₃₀ Cu ₂ I ₂ N ₂ P ₂	
Molmasse	945.45 g/mol	
Meßtemperatur	203(2) K	
Kristallsystem, Raumgruppe	monoklin, P2 ₁ /c (14)	
Zelldimensionen	a = 1368.63(6) pm	$\alpha = 90^\circ$.
	b = 1823.30(8) pm	$\beta = 90.400(2)^\circ$.
	c = 1443.59(6) pm	$\gamma = 90^\circ$.
Volumen	3.6023(3) nm ³	
Z, Dichte (berechnet)	4, 1.743 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	3.012 mm ⁻¹	
F(000)	1840	
Kristalldimensionen	0.44 x 0.12 x 0.08 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	1.49 bis 20.81°.	
Bereich der Indizes	-13<=h<=13, -18<=k<=18, -14<=l<=14	
Anzahl gemessene Reflexe	19836	
Unabhängige Reflexe	3769 [R(int) = 0.0648]	
Vollständigkeit zu Theta = 20.81°	100.0 %	
Reflexe >2sigma(I)°	2721	
Methode der Strukturverfeinerung	Kleinste Quadrateverfeinerung (Vollmatrix) an F ²	
Reflexe / festgehalten / Parameter	3769 / 0 / 397	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.067	
R-Wert [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0472, wR2 = 0.1184	
R-Wert (alle Daten)	R1 = 0.0721, wR2 = 0.1310	
Größte und kleinste Restelektronendichte	1.588 und -1.357 10 ⁻⁶ e · pm ⁻³	

Tab. 2. Atomkoordinaten (x 10⁴) und equivalente isotrope Temperaturfaktoren (pm²x 10⁻¹) für **3**.
U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten Uij Tensors.

	x	y	z	U(eq)
I(1)	3722(1)	1445(1)	601(1)	53(1)
I(2)	702(1)	1917(1)	554(1)	70(1)
Cu(1)	2281(1)	1930(1)	-379(1)	44(1)
Cu(2)	2298(1)	2041(1)	1468(1)	42(1)
N(1)	2346(6)	2450(5)	-2275(8)	24(3)
C(11)	2346(6)	2450(5)	-2275(8)	24(3)
C(1)	2345(6)	2251(5)	-1745(8)	25(3)
N(11)	2345(6)	2251(5)	-1745(8)	25(3)
P(1)	-2716(2)	4132(1)	1408(2)	23(1)
P(2)	-2601(2)	2946(1)	-59(2)	24(1)
N(2)	-2620(5)	3385(4)	887(5)	27(2)
C(112)	-3558(8)	5505(6)	-652(7)	45(3)
C(135)	-5188(8)	3477(7)	2679(7)	44(3)
C(131)	-3815(6)	4127(5)	2095(6)	22(2)
C(113)	-3548(7)	4955(5)	12(6)	28(2)
C(211)	-1545(6)	3163(6)	-752(6)	26(2)
C(226)	-3161(7)	1486(6)	-236(7)	36(3)
C(221)	-2599(6)	1995(5)	240(6)	25(2)
C(111)	-2800(6)	4920(5)	661(6)	22(2)
C(213)	-494(8)	4077(6)	-1391(7)	45(3)
C(216)	-1050(7)	2631(6)	-1227(7)	39(3)
C(236)	-3544(8)	3289(5)	-1724(7)	36(3)
C(133)	-5003(9)	4749(7)	3033(7)	53(3)
C(214)	-10(7)	3551(6)	-1863(7)	37(3)
C(224)	-2553(8)	524(6)	716(8)	45(3)
C(136)	-4331(7)	3489(5)	2199(6)	31(3)
C(222)	-2006(7)	1747(6)	947(7)	37(3)
C(121)	-1659(7)	4252(5)	2136(7)	29(2)
C(116)	-2080(7)	5459(5)	640(7)	33(3)
C(134)	-5512(8)	4105(7)	3102(7)	44(3)

C(215)	-276(7)	2831(6)	-1798(8)	45(3)
C(223)	-1987(7)	1013(6)	1195(8)	43(3)
C(225)	-3151(8)	753(6)	5(7)	43(3)
C(132)	-4155(8)	4763(6)	2519(7)	44(3)
C(115)	-2115(8)	6005(6)	-23(9)	48(3)
C(235)	-4354(9)	3435(6)	-2273(8)	49(3)
C(233)	-5378(8)	3214(6)	-959(8)	41(3)
C(114)	-2843(10)	6015(6)	-656(8)	52(3)
C(231)	-3644(6)	3117(5)	-799(7)	25(2)
C(232)	-4570(7)	3070(5)	-425(7)	34(3)
C(212)	-1272(7)	3885(6)	-823(7)	41(3)
C(122)	-789(8)	3915(6)	1870(7)	40(3)
C(126)	-1656(9)	4649(7)	2937(8)	59(3)
C(234)	-5261(8)	3397(6)	-1870(9)	47(3)
C(123)	63(9)	3984(8)	2390(11)	69(4)
C(124)	25(12)	4387(10)	3199(13)	99(7)
C(125)	-811(13)	4714(9)	3462(9)	82(5)

Tab. 3. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **3**.

I(1)-Cu(2)	256.61(15)	Cu(2)-I(1)-Cu(1)	62.66(4)
I(1)-Cu(1)	257.70(15)	Cu(2)-I(2)-Cu(1)	63.14(4)
I(2)-Cu(2)	255.34(15)	C(1)-Cu(1)-I(2)	123.3(2)
I(2)-Cu(1)	255.45(15)	C(1)-Cu(1)-I(1)	125.9(2)
Cu(1)-C(1)	205.8(13)	I(2)-Cu(1)-I(1)	110.76(5)
Cu(1)-Cu(2)	267.41(18)	C(1)-Cu(1)-Cu(2)	158.9(2)
Cu(2)-C(11)#1	203.9(13)	I(2)-Cu(1)-Cu(2)	58.41(4)
Cu(2)-N(1)#1	203.9(13)	I(1)-Cu(1)-Cu(2)	58.47(4)
N(1)-C(1)	84.8(9)	C(11)#1-Cu(2)-I(2)	121.5(2)
N(1)-Cu(2)#2	203.9(13)	N(1)#1-Cu(2)-I(2)	121.5(2)
P(1)-N(2)	156.2(8)	C(11)#1-Cu(2)-I(1)	127.3(2)
P(1)-C(121)	179.6(10)	N(1)#1-Cu(2)-I(1)	127.3(2)
P(1)-C(111)	180.0(9)	I(2)-Cu(2)-I(1)	111.15(5)
P(1)-C(131)	180.7(9)	C(11)#1-Cu(2)-Cu(1)	157.2(2)
P(2)-N(2)	158.3(8)	N(1)#1-Cu(2)-Cu(1)	157.2(2)
P(2)-C(221)	178.6(9)	I(2)-Cu(2)-Cu(1)	58.45(4)
P(2)-C(231)	180.4(9)	I(1)-Cu(2)-Cu(1)	58.87(4)
P(2)-C(211)	180.7(9)	C(1)-N(1)-Cu(2)#2	177.4(11)
		N(1)-C(1)-Cu(1)	170.8(11)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

#1 $x, -y+1/2, z+1/2$ #2 $x, -y+1/2, z-1/2$

Tab. 4. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **3**.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
I(1)	60(1)	67(1)	32(1)	-1(1)	-2(1)	24(1)
I(2)	42(1)	132(1)	37(1)	10(1)	1(1)	-22(1)
Cu(1)	54(1)	53(1)	24(1)	3(1)	2(1)	-3(1)
Cu(2)	51(1)	51(1)	25(1)	-2(1)	2(1)	-4(1)
P(1)	27(2)	22(2)	21(2)	1(1)	0(1)	-2(1)
P(2)	27(2)	21(2)	23(2)	-1(1)	2(1)	-2(1)
N(2)	31(5)	26(5)	24(5)	1(4)	1(4)	-4(4)
C(112)	51(8)	47(8)	37(7)	6(6)	4(6)	16(7)
C(135)	48(8)	47(8)	36(7)	12(6)	12(6)	-9(6)
C(131)	31(6)	17(6)	16(5)	4(5)	9(4)	5(5)
C(113)	31(6)	27(6)	27(6)	7(5)	4(5)	6(5)
C(211)	19(5)	38(7)	21(6)	-4(5)	1(4)	3(5)
C(226)	49(7)	27(7)	32(6)	2(5)	-7(5)	-2(6)
C(221)	29(6)	22(6)	23(6)	1(5)	-2(5)	-3(5)

C(111)	24(6)	20(6)	22(6)	5(4)	6(5)	4(5)
C(213)	49(7)	43(8)	43(7)	8(6)	6(6)	-16(6)
C(216)	41(7)	35(7)	41(7)	-6(6)	3(6)	-3(6)
C(236)	39(7)	29(6)	39(8)	10(5)	-5(6)	1(5)
C(133)	69(9)	52(9)	37(7)	0(6)	15(7)	13(7)
C(214)	37(7)	49(8)	25(6)	-8(6)	11(5)	-7(6)
C(224)	54(8)	23(7)	57(8)	6(6)	11(7)	2(6)
C(136)	43(7)	22(7)	28(6)	8(5)	9(5)	6(5)
C(222)	31(6)	39(8)	41(7)	0(6)	-4(6)	-6(5)
C(121)	44(7)	15(6)	30(7)	7(5)	-7(5)	-6(5)
C(116)	48(7)	19(6)	33(6)	5(5)	3(5)	-3(6)
C(134)	40(7)	62(9)	31(7)	19(7)	12(5)	9(7)
C(215)	36(7)	49(9)	52(8)	-11(6)	23(6)	-3(6)
C(223)	40(7)	35(8)	55(8)	11(6)	-14(6)	0(6)
C(225)	55(8)	25(7)	49(8)	-4(6)	-20(6)	-6(6)
C(132)	57(8)	33(7)	42(7)	0(6)	4(6)	-4(6)
C(115)	50(8)	28(7)	66(9)	2(7)	19(7)	-5(6)
C(235)	54(9)	44(8)	49(8)	18(6)	-11(7)	4(6)
C(233)	28(7)	41(7)	55(9)	-13(6)	-2(6)	-1(5)
C(114)	72(9)	40(8)	45(8)	21(6)	22(7)	6(8)
C(231)	21(6)	22(6)	33(7)	-3(5)	-2(5)	-2(4)
C(232)	31(7)	40(7)	30(6)	-9(5)	1(5)	3(5)
C(212)	51(7)	16(6)	55(8)	1(5)	21(6)	-1(5)
C(122)	45(7)	26(6)	48(7)	13(5)	-20(6)	-7(6)
C(126)	62(9)	71(9)	43(8)	-8(7)	-11(7)	-19(7)
C(234)	44(8)	32(7)	65(10)	-2(6)	-23(7)	8(6)
C(123)	38(8)	70(10)	101(12)	40(9)	-37(9)	-20(7)
C(124)	72(12)	114(15)	108(15)	69(13)	-70(12)	-61(12)
C(125)	96(12)	107(14)	42(9)	8(8)	-36(10)	-51(11)

Tab. 5. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **3**.

	x	y	z	U(eq)
H(112)	-4056	5523	-1093	54
H(135)	-5549	3046	2720	52
H(113)	-4046	4608	21	34
H(226)	-3552	1640	-727	43
H(213)	-307	4565	-1444	54
H(216)	-1227	2141	-1169	47
H(236)	-2924	3307	-1982	43
H(133)	-5225	5170	3327	63
H(214)	511	3681	-2238	44
H(224)	-2534	30	875	53
H(136)	-4095	3057	1938	37
H(222)	-1611	2079	1265	45
H(116)	-1574	5452	1073	40
H(134)	-6087	4092	3441	53
H(215)	57	2476	-2134	54
H(223)	-1592	855	1682	52
H(225)	-3544	418	-310	52
H(132)	-3809	5199	2456	53
H(115)	-1636	6366	-32	57
H(235)	-4288	3555	-2896	59
H(233)	-6000	3187	-705	49
H(114)	-2853	6380	-1105	63
H(232)	-4644	2939	193	41
H(212)	-1605	4244	-494	49
H(122)	-780	3637	1329	48
H(126)	-2226	4878	3131	70
H(234)	-5812	3500	-2228	57
H(123)	641	3765	2199	83
H(124)	583	4433	3566	118
H(125)	-820	4988	4006	98

Tetramethylammonium-thiocyanato(bromo)cuprat(I) 4

Tab. 1. Kristall- und Strukturdaten von 4.

Summenformel	C ₅ H ₁₂ Br Cu N ₂ S	
Molmasse	275.68 g/mol	
Meßtemperatur	293(2) K	
Kristallsystem, Raumgruppe	monoklin, P2 ₁ (4)	
Zelldimensionen	a = 589.1(4) pm b = 740.2(4) pm c = 1131.9(4) pm	$\alpha = 90^\circ$ $\beta = 96.02(3)^\circ$ $\gamma = 90^\circ$
Volumen	0.4908(5) nm ³	
Z, Dichte (berechnet)	2, 1.865 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	6.444 mm ⁻¹	
F(000)	272	
Kristalldimensionen	0.3 x 0.1 x 0.1 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	3.29 bis 30.01°	
Bereich der Indizes	-8<=h<=8, 0<=k<=10, -15<=l<=15	
Anzahl gemessene Reflexe	3063	
Unabhängige Reflexe	1536 [R(int) = 0.0242]	
Vollständigkeit zu Theta = 30.01°	99.9 %	
Reflexe >2sigma(I)°	1041	
Methode der Strukturverfeinerung	Kleinste Quadrateverfeinerung (Vollmatrix) an F ²	
Reflexe / festgehalten / Parameter	1536 / 1 / 92	
Goodness-of-fit gegen F ²	0.954	
R-Wert [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0271, wR2 = 0.0682	
R-Wert (alle Daten)	R1 = 0.0639, wR2 = 0.0825	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.656 und -0.518 10 ⁻⁶ e · pm ⁻³	

Tab. 2. Atomkoordinaten (x 10⁴) und equivalente isotrope Temperaturfaktoren (pm²x 10⁻¹) für 4.
U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten Uij Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Br(1)	4152(1)	-46(1)	1438(1)	47(1)
Cu(1)	5560(1)	-16(4)	3481(1)	46(1)
S(1)	3301(2)	106(13)	4934(1)	75(1)
N(1)	8794(5)	30(30)	3938(3)	50(1)
N(2)	-401(5)	20(20)	-1877(3)	37(1)
C(1)	660(7)	-40(30)	4319(4)	40(1)
C(21)	-1620(8)	0(40)	-783(4)	51(1)
C(22)	1090(30)	1662(18)	-1859(13)	58(4)
C(24)	12100(11)	-5170(40)	2937(5)	64(3)
C(23)	8950(20)	-6612(19)	1908(16)	63(4)

Tab. 3. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für 4.

Br(1)-Cu(1)	237.43(11)	N(1)-Cu(1)-S(1)	117.01(12)
Cu(1)-N(1)	192.1(3)	N(1)-Cu(1)-Br(1)	119.83(11)
Cu(1)-S(1)	222.37(16)	S(1)-Cu(1)-Br(1)	123.08(5)
S(1)-C(1)	164.0(5)	C(1)-S(1)-Cu(1)	107.31(18)
N(2)-C(23)#1	148.0(19)	C(23)#1-N(2)-C(24)#1	104.3(14)
N(2)-C(24)#1	148.6(7)	C(23)#1-N(2)-C(21)	110.0(13)
N(2)-C(21)	149.5(5)	C(24)#1-N(2)-C(21)	109.1(4)
N(2)-C(22)	150.2(17)	C(23)#1-N(2)-C(22)	108.8(4)
N(1)-C(1)#2	114.0(5)	C(24)#1-N(2)-C(22)	115.4(13)
C(1)-N(1)#3	114.0(5)	C(21)-N(2)-C(22)	109.1(12)
C(24)-N(2)#4	148.6(7)	C(1)#2-N(1)-Cu(1)	172.3(10)
C(23)-N(2)#4	148.0(19)	N(1)#3-C(1)-S(1)	173(2)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

#1 -x+1,y+1/2,-z #2 x+1,y,z #3 x-1,y,z #4 -x+1,y-1/2,-z

Tab. 4. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für 4.
 Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^* U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Br(1)	40(1)	55(1)	44(1)	-1(1)	0(1)	-1(1)
Cu(1)	27(1)	60(1)	52(1)	-1(2)	4(1)	-1(2)
S(1)	27(1)	155(2)	42(1)	-20(3)	1(1)	-4(3)
N(1)	29(2)	78(3)	44(2)	-7(9)	5(1)	-9(8)
N(2)	37(2)	38(2)	36(2)	8(8)	3(1)	-1(7)
C(1)	29(2)	57(3)	36(2)	-2(9)	7(1)	4(9)
C(21)	58(2)	57(3)	40(2)	-9(11)	17(2)	-1(13)
C(22)	79(9)	43(7)	54(7)	-2(6)	11(6)	-23(6)
C(24)	62(3)	88(10)	39(2)	-9(6)	-10(2)	6(6)
C(23)	44(7)	46(8)	102(12)	5(8)	27(7)	0(6)

Tab. 5. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für 4.

	x	y	z	U(eq)
H(21A)	-2411	-1126	-734	76
H(21B)	-2698	977	-818	76
H(21C)	-534	141	-96	76
H(22A)	2159	1647	-1157	88
H(22B)	164	2728	-1859	88
H(22C)	1910	1663	-2549	88
H(24A)	13172	-4188	2955	96
H(24B)	12897	-6293	2899	96
H(24C)	11330	-5138	3643	96
H(23A)	9904	-7667	2000	94
H(23B)	7964	-6699	1180	94
H(23C)	8050	-6528	2564	94

Tetramethylammonium-(triiodo)dicuprat(I) 5

Tab. 1. Kristall- und Strukturdaten von 5.

Summenformel	C ₄ H ₁₂ Cu ₂ I ₃ N	
Molmasse	581.93 g/mol	
Meßtemperatur	133(2) K	
Kristallsystem, Raumgruppe	orthorhombisch, Pnma (62)	
Zelldimensionen	a = 1731.19(13) pm	$\alpha = 90^\circ$.
	b = 745.00(6) pm	$\beta = 90^\circ$.
	c = 999.96(8) pm	$\gamma = 90^\circ$.
Volumen	1.28968(18) nm ³	
Z, Dichte (berechnet)	4, 2.997 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	10.428 mm ⁻¹	
F(000)	1040	
Kristalldimensionen	0.4 x 0.2 x 0.3 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	2.35 bis 27.55°.	
Bereich der Indizes	-22<=h<=22, -9<=k<=9, -12<=l<=13	
Anzahl gemessene Reflexe	12264	
Unabhängige Reflexe	1601 [R(int) = 0.0414]	
Vollständigkeit zu Theta = 27.55°	100.0 %	
Reflexe >2sigma(I)°	1365	
Methode der Strukturverfeinerung	Kleinste Quadrateverfeinerung (Vollmatrix) an F ²	
Reflexe / festgehalten / Parameter	1601 / 0 / 55	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.181	
R-Wert [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0725, wR2 = 0.2779	
R-Wert (alle Daten)	R1 = 0.0803, wR2 = 0.2909	
Größte und kleinste Restelektronendichte	7.341 und -2.563 10 ⁻⁶ e · pm ⁻³	

Tab. 2. Atomkoordinaten (x 10⁴) und equivalente isotrope Temperaturfaktoren (pm²x 10⁻¹) für 5.
U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten Uij Tensors.

	x	y	z	U(eq)
I(1)	533(1)	2500	8567(1)	28(1)
I(2)	985(1)	2500	12812(2)	40(1)
I(3)	1877(1)	-2500	10187(2)	41(1)
Cu(1)	737(1)	-26(2)	10782(1)	15(1)
N(1)	3505(11)	2500	407(18)	32(4)
C(111)	3551(13)	860(30)	1190(20)	54(5)
C(112)	4197(18)	2500	-560(30)	52(7)
C(113)	2803(18)	2500	-430(40)	56(8)

Tab. 3. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für 5.

I(1)-Cu(1)#1	292.75(18)		
I(1)-Cu(1)	292.75(18)	Cu(1)#1-I(1)-Cu(1)	80.00(6)
I(1)-Cu(1)#2	294.11(18)	Cu(1)#1-I(1)-Cu(1)#2	109.01(5)
I(1)-Cu(1)#3	294.11(18)	Cu(1)-I(1)-Cu(1)#2	61.32(5)
I(2)-Cu(1)	280.08(18)	Cu(1)#1-I(1)-Cu(1)#3	61.32(5)
I(2)-Cu(1)#1	280.09(18)	Cu(1)-I(1)-Cu(1)#3	109.01(5)
I(3)-Cu(1)#4	276.54(19)	Cu(1)#2-I(1)-Cu(1)#3	77.61(6)
I(3)-Cu(1)	276.55(19)	Cu(1)-I(2)-Cu(1)#1	84.42(7)
Cu(1)-I(1)#2	294.11(18)	Cu(1)#4-I(3)-Cu(1)	83.60(7)
Cu(1)-Cu(1)#2	299.3(3)	I(3)-Cu(1)-I(2)	119.62(7)
N(1)-C(111)	146(2)	I(3)-Cu(1)-I(1)	110.61(6)
N(1)-C(111)#1	146(2)	I(2)-Cu(1)-I(1)	97.75(5)
N(1)-C(113)	148(3)	I(3)-Cu(1)-I(1)#2	99.40(5)
N(1)-C(112)	154(3)	I(2)-Cu(1)-I(1)#2	112.04(6)

I(1)-Cu(1)-I(1)#2	118.68(5)	I(1)-Cu(1)-Cu(1)#2	59.56(5)
I(3)-Cu(1)-Cu(1)#2	120.31(8)	I(1)#2-Cu(1)-Cu(1)#2	59.11(5)
I(2)-Cu(1)-Cu(1)#2	120.04(8)		

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

#1 x,-y+1/2,z #2 -x,-y,-z+2 #3 -x,y+1/2,-z+2 #4 x,-y-1/2,z

Tab. 4. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **5**.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
I(1)	32(1)	25(1)	29(1)	0	2(1)	0
I(2)	54(1)	30(1)	35(1)	0	-5(1)	0
I(3)	35(1)	31(1)	56(1)	0	5(1)	0
Cu(1)	17(1)	9(1)	19(1)	-2(1)	-3(1)	2(1)
N(1)	36(10)	28(9)	31(9)	0	-8(7)	0
C(111)	69(14)	37(9)	57(11)	16(9)	7(10)	2(9)
C(112)	56(17)	60(20)	38(13)	0	12(12)	0
C(113)	51(16)	39(14)	80(20)	0	-34(15)	0

Tab. 5. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **5**.

	x	y	z	U(eq)
H(11A)	3502	-182	595	81
H(11B)	3133	839	1850	81
H(11C)	4050	808	1652	81
H(11D)	4182	3588	-1111	78
H(11E)	4170	1440	-1139	78
H(11F)	4679	2473	-47	78
H(11G)	2777	3622	-940	84
H(11H)	2346	2396	141	84
H(11I)	2821	1482	-1050	84

Tetrabutylammonium-tetracyanotricuprat(I)-acetonitrilsolvat 6

Tab. 1. Kristall- und Strukturdaten von 6.

Summenformel	C ₂₂ H ₃₉ Cu ₃ N ₆	
Molmasse	578.21 g/mol	
Meßtemperatur	203(2) K	
Kristallsystem, Raumgruppe	monoklin, C2 (5)	
Zelldimensionen	a = 1685.72(4) pm	$\alpha = 90^\circ$.
	b = 1411.80(3) pm	$\beta = 113.30^\circ$.
	c = 1339.100(10) pm	$\gamma = 90^\circ$.
Volumen	2.92711(10) nm ³	
Z, Dichte (berechnet)	4, 1.312 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	2.178 mm ⁻¹	
Max. und min. Transmission	0.7957 und 0.5425	
F(000)	1200	
Kristalldimensionen	0.32 x 0.21 x 0.11 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	1.66 bis 26.41°.	
Bereich der Indizes	-21<=h<=19, 0<=k<=17, 0<=l<=16	
Anzahl gemessene Reflexe	3117	
Unabhängige Reflexe	3117 [R(int) = 0.0000]	
Vollständigkeit zu Theta = 26.41°	99.3 %	
Reflexe >2sigma(I)°	2098	
Methode der Strukturverfeinerung	Kleinste Quadrateverfeinerung (Vollmatrix) an F ²	
Reflexe / festgehalten / Parameter	3117 / 1 / 285	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.007	
R-Wert [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0361, wR2 = 0.0864	
R-Wert (alle Daten)	R1 = 0.0639, wR2 = 0.1016	
Absol. Strukturparameter (Flack-Par.)	0.00(3)	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.302 und -0.344 10 ⁻⁶ e · pm ⁻³	

Tab. 2. Atomkoordinaten (x 10⁴) und equivalente isotrope Temperaturfaktoren (pm²x 10⁻¹) für 6. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten Uij Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Cu(1)	3412(1)	292(1)	3932(1)	61(1)
Cu(2)	2497(2)	224(3)	2(2)	77(1)
Cu(3)	1588(1)	159(1)	-3929(1)	62(1)
N(1)	3016(6)	190(9)	2405(9)	76(3)
N(2)	2181(6)	296(10)	-1438(8)	72(3)
N(3)	2315(5)	217(9)	-4725(8)	65(2)
N(4)	4643(5)	467(8)	4758(8)	59(3)
N(5)	375(6)	2(9)	-4742(8)	64(4)
C(1)	2777(8)	211(13)	1481(8)	71(3)
C(2)	1998(6)	273(10)	-2385(8)	60(3)
C(3)	2720(7)	274(11)	4749(7)	52(2)
C(4)	4643(5)	467(8)	4758(8)	59(3)
C(5)	375(6)	2(9)	-4742(8)	64(4)
N	4515(2)	2744(8)	-2778(2)	40(1)
C(11)	5200(2)	2745(11)	-3251(3)	46(1)
C(12)	6127(2)	2732(11)	-2444(3)	55(1)
C(13)	6731(3)	2744(13)	-3050(4)	73(1)
C(14)	7680(3)	2721(14)	-2273(5)	103(2)
C(21)	3649(2)	2750(9)	-3753(3)	51(1)
C(22)	2847(2)	2737(12)	-3519(3)	60(1)
C(23)	2054(3)	2752(14)	-4600(4)	80(1)
C(24)	1210(3)	2742(14)	-4457(5)	113(3)
C(31)	4595(6)	3590(6)	-2072(7)	41(2)
C(32)	4563(8)	4569(8)	-2577(10)	57(3)
C(33)	4659(7)	5398(10)	-1822(9)	61(3)
C(34)	4632(7)	6346(9)	-2375(11)	77(3)
C(41)	4619(6)	1871(7)	-2044(8)	51(3)
C(42)	4575(7)	944(8)	-2596(9)	50(3)

C(43)	4661(7)	196(12)	-1763(11)	76(3)
C(44)	4659(9)	-773(9)	-2190(13)	119(5)
N(100)	3449(3)	2798(13)	-369(4)	101(2)
C(100)	1795(3)	2787(13)	-1133(6)	129(3)
C(101)	2728(4)	2807(14)	-698(5)	78(2)

Tab. 3. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **6**.

Cu(1)-C(3)	188.8(11)	C(31)-C(32)	153.0(13)
Cu(1)-N(1)	188.9(11)	C(32)-C(33)	151.3(16)
Cu(1)-C(4)	194.2(9)	C(33)-C(34)	152.2(19)
Cu(2)-N(2)	178.9(10)	C(41)-C(42)	149.0(14)
Cu(2)-C(1)	184.6(10)	C(42)-C(43)	150.0(17)
Cu(3)-C(2)	191.1(10)	C(43)-C(44)	148(2)
Cu(3)-C(5)	191.2(9)	C(101)-N(100)	111.8(6)
Cu(3)-N(3)	191.8(10)	C(101)-C(100)	144.5(7)
N(1)-C(1)	114.0(11)		
C(4)-N(4)#1	111.9(17)	C(3)-Cu(1)-N(1)	126.2(4)
C(4)-C(4)#1	111.9(17)	C(3)-Cu(1)-C(4)	115.9(4)
C(3)-N(3)#2	116.2(5)	N(1)-Cu(1)-C(4)	117.9(4)
N(2)-C(2)	118.1(11)	N(2)-Cu(2)-C(1)	176.4(9)
N(3)-C(3)#3	116.2(5)	C(2)-Cu(3)-C(5)	118.3(4)
C(5)-N(5)#4	117.6(19)	C(2)-Cu(3)-N(3)	124.1(4)
C(5)-C(5)#4	117.6(19)	C(5)-Cu(3)-N(3)	117.6(4)
N-C(31)	149.6(13)	C(1)-N(1)-Cu(1)	174.2(12)
N-C(11)	152.2(4)	N(4)#1-C(4)-Cu(1)	172.7(3)
N-C(21)	152.6(4)	C(4)#1-C(4)-Cu(1)	172.7(3)
N-C(41)	154.3(13)	N(1)-C(1)-Cu(2)	174.5(12)
C(11)-C(12)	150.7(5)	N(3)#2-C(3)-Cu(1)	176.4(6)
C(12)-C(13)	153.3(5)	C(2)-N(2)-Cu(2)	174.7(11)
C(13)-C(14)	152.5(7)	C(3)#3-N(3)-Cu(3)	176.5(5)
C(21)-C(22)	150.4(5)	N(5)#4-C(5)-Cu(3)	173.2(4)
C(22)-C(23)	153.4(5)	C(5)#4-C(5)-Cu(3)	173.2(4)
C(23)-C(24)	150.9(6)	N(2)-C(2)-Cu(3)	173.5(11)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

#1 -x+1,y,-z+1 #2 x,y,z+1 #3 x,y,z-1 #4 -x,y,-z-1

Tab. 4. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **6**.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Cu(1)	70(1)	56(1)	60(1)	-1(1)	29(1)	0(1)
Cu(2)	100(1)	69(1)	51(1)	-5(1)	20(1)	9(1)
Cu(3)	70(1)	54(1)	64(1)	-2(1)	31(1)	-6(1)
N(1)	69(7)	75(6)	91(7)	3(7)	39(6)	-5(6)
N(2)	76(6)	65(6)	77(6)	-2(5)	32(5)	1(5)
N(3)	50(5)	52(5)	82(6)	-6(5)	16(5)	-1(5)
N(4)	69(7)	65(7)	54(7)	7(6)	38(6)	0(5)
N(5)	79(9)	76(9)	44(6)	-8(6)	33(6)	-5(6)
C(1)	98(8)	68(6)	32(5)	-17(5)	11(5)	9(7)
C(2)	66(7)	51(6)	49(6)	-22(6)	10(5)	3(6)
C(3)	56(6)	63(7)	35(4)	-4(5)	18(4)	-12(6)
C(4)	69(7)	65(7)	54(7)	7(6)	38(6)	0(5)
C(5)	79(9)	76(9)	44(6)	-8(6)	33(6)	-5(6)
N	47(2)	39(1)	35(2)	-9(5)	17(1)	-3(6)
C(11)	65(2)	39(2)	46(2)	3(8)	34(2)	1(8)
C(12)	60(2)	49(2)	69(3)	16(7)	38(2)	5(8)
C(13)	82(3)	53(2)	113(4)	-18(9)	71(3)	-14(9)
C(14)	73(3)	74(4)	189(6)	-24(12)	80(4)	0(11)
C(21)	58(2)	43(2)	42(2)	-18(6)	8(2)	5(7)

C(22)	52(2)	49(2)	65(3)	7(10)	10(2)	-1(9)
C(23)	64(3)	47(2)	95(3)	7(10)	-5(2)	0(10)
C(24)	54(3)	83(4)	165(7)	32(12)	5(3)	-7(10)
C(31)	51(6)	38(5)	33(5)	11(3)	16(4)	4(4)
C(32)	64(8)	31(5)	65(8)	-2(5)	15(6)	9(5)
C(33)	71(7)	43(7)	76(6)	-23(4)	37(5)	-2(4)
C(34)	62(6)	41(5)	123(8)	-5(5)	29(5)	-5(4)
C(41)	41(6)	65(7)	52(6)	32(4)	23(5)	7(5)
C(42)	55(7)	50(7)	47(7)	12(5)	23(6)	3(5)
C(43)	69(7)	41(5)	130(9)	7(5)	52(7)	-4(5)
C(44)	134(11)	47(7)	164(13)	22(7)	44(9)	-20(6)
N(100)	79(3)	155(6)	66(3)	-2(9)	26(2)	-31(10)
C(100)	69(4)	79(5)	210(8)	13(11)	24(4)	-33(8)
C(101)	75(3)	73(5)	85(4)	2(7)	31(3)	-8(8)

Tab. 5. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für 6.

	x	y	z	U(eq)
H(11A)	5105	2191	-3725	55
H(11B)	5115	3309	-3709	55
H(12A)	6233	2162	-1993	66
H(12B)	6240	3286	-1967	66
H(13A)	6605	2195	-3536	88
H(13B)	6621	3317	-3498	88
H(14A)	8035	2608	-2682	155
H(14B)	7771	2217	-1747	155
H(14C)	7838	3323	-1897	155
H(21A)	3628	3316	-4186	61
H(21B)	3631	2198	-4205	61
H(22A)	2839	3290	-3081	71
H(22B)	2838	2165	-3108	71
H(23A)	2077	3321	-5007	96
H(23B)	2076	2200	-5032	96
H(24A)	739	2867	-5150	169
H(24B)	1220	3226	-3938	169
H(24C)	1128	2126	-4191	169
H(31A)	5143	3538	-1437	49
H(31B)	4131	3558	-1807	49
H(32A)	5023	4605	-2849	68
H(32B)	4011	4632	-3204	68
H(33A)	5209	5341	-1191	73
H(33B)	4193	5377	-1559	73
H(34A)	4735	6853	-1849	116
H(34B)	4070	6431	-2961	116
H(34C)	5075	6359	-2667	116
H(41A)	5177	1915	-1423	61
H(41B)	4166	1886	-1759	61
H(42A)	5045	891	-2849	60
H(42B)	4023	879	-3222	60
H(43A)	5201	296	-1127	91
H(43B)	4182	256	-1528	91
H(44A)	4728	-1232	-1624	179
H(44B)	5133	-836	-2425	179
H(44C)	4116	-885	-2803	179
H(10B)	1599	2135	-1194	193
H(10C)	1567	3081	-1845	193
H(10D)	1594	3130	-650	193

Acetonitril(cyano)kupfer(I) 7

Tab. 1. Kristall- und Strukturdaten von 7.

Summenformel	C ₃ H ₃ Cu N ₂	
Molmasse	130.61 g/mol	
Meßtemperatur	173(2) K	
Kristallsystem, Raumgruppe	monoklin, P2 ₁ /c (14)	
Zelldimensionen	a = 841.96(12) pm	$\alpha = 90^\circ$.
	b = 813.78(11) pm	$\beta = 116.570(2)^\circ$.
	c = 785.50(11) pm	$\gamma = 90^\circ$.
Volumen	0.48136(12) nm ³	
Z, Dichte (berechnet)	4, 1.802 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	4.367 mm ⁻¹	
F(000)	256	
Kristalldimensionen	0.6 x 0.17 x 0.08 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	2.70 bis 30.08°.	
Bereich der Indizes	-11<=h<=11, -11<=k<=11, -10<=l<=11	
Anzahl gemessene Reflexe	5482	
Unabhängige Reflexe	1404 [R(int) = 0.0429]	
Vollständigkeit zu Theta = 30.08°	99.4 %	
Reflexe >2sigma(I)°	1165	
Methode der Strukturverfeinerung	Kleinste Quadrateverfeinerung (Vollmatrix) an F ²	
Reflexe / festhalten / Parameter	1404 / 0 / 67	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.044	
R-Wert [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0332, wR2 = 0.0804	
R-Wert (alle Daten)	R1 = 0.0417, wR2 = 0.0850	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.987 und -1.053 10 ⁻⁶ e · pm ⁻³	

Tab. 2. Atomkoordinaten (x 10⁴) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren (pm²x 10⁻¹) für 7. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten Uij Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Cu(1)	6010(1)	687(1)	1458(1)	21(1)
N(1)	5494(3)	2493(2)	2757(3)	23(1)
N(2)	8650(3)	521(3)	2335(3)	32(1)
C(1)	4866(3)	-1440(3)	1528(3)	24(1)
C(2)	10124(4)	495(3)	2754(4)	29(1)
C(3)	12017(4)	472(6)	3294(6)	46(1)

Tab. 3. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für 7.

Cu(1)-N(1)	194.59(19)	N(1)-Cu(1)-C(1)#1	107.49(8)
Cu(1)-C(1)	199.4(2)	C(1)-Cu(1)-C(1)#1	109.53(7)
Cu(1)-N(2)	201.6(2)	N(2)-Cu(1)-C(1)#1	100.08(9)
Cu(1)-C(1)#1	220.7(2)	N(1)-Cu(1)-Cu(1)#1	127.98(6)
Cu(1)-Cu(1)#1	242.99(6)	C(1)-Cu(1)-Cu(1)#1	58.89(7)
N(1)-C(1)#2	114.6(3)	N(2)-Cu(1)-Cu(1)#1	119.42(7)
N(2)-C(2)	113.3(3)	C(1)#1-Cu(1)-Cu(1)#1	50.64(6)
C(2)-C(3)	145.5(4)	C(1)#2-N(1)-Cu(1)	177.7(2)
C(1)-N(1)#3	114.6(3)	C(2)-N(2)-Cu(1)	176.1(2)
C(1)-Cu(1)#1	220.7(2)	N(2)-C(2)-C(3)	179.7(3)
		N(1)#3-C(1)-Cu(1)	155.3(2)
N(1)-Cu(1)-C(1)	114.66(9)	N(1)#3-C(1)-Cu(1)#1	134.04(19)
N(1)-Cu(1)-N(2)	110.02(9)	Cu(1)-C(1)-Cu(1)#1	70.47(7)
C(1)-Cu(1)-N(2)	113.89(9)		

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

#1 -x+1,-y,-z #2 -x+1,y+1/2,-z+1/2 #3 -x+1,y-1/2,-z+1/2

Tab. 4. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für 7.
 Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^* U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Cu(1)	28(1)	18(1)	23(1)	-3(1)	16(1)	-2(1)
N(1)	32(1)	20(1)	22(1)	-1(1)	16(1)	-2(1)
N(2)	27(1)	38(1)	31(1)	-1(1)	14(1)	1(1)
C(1)	31(1)	21(1)	26(1)	2(1)	20(1)	4(1)
C(2)	30(1)	32(1)	28(1)	-2(1)	16(1)	0(1)
C(3)	27(1)	69(2)	45(2)	4(2)	18(1)	6(1)

Tab. 5. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für 7.

	x	y	z	U(eq)
H(1)	12420(70)	1160(70)	4340(80)	110(20)
H(2)	12330(90)	-380(90)	4020(110)	130(30)
H(3)	12190(80)	740(50)	2450(90)	89(19)

Acetonitril(thiocyanato)kupfer(I) **8**

Tab. 1. Kristall- und Strukturdaten von **8**.

Summenformel	C ₃ H ₃ Cu N ₂ S	
Molmasse	162.67 g/mol	
Meßtemperatur	173(2) K	
Kristallsystem, Raumgruppe	monoklin, P2 ₁ /c (14)	
Zelldimensionen	a = 659.010(10) pm	$\alpha = 90^\circ$.
	b = 729.07(2) pm	$\beta = 103.8360(1)^\circ$.
	c = 1136.39(3) pm	$\gamma = 90^\circ$.
Volumen	0.53015(2) nm ³	
Z, Dichte (berechnet)	4, 2.038 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	4.367 mm ⁻¹	
F(000)	320	
Kristalldimensionen	0.2 x 0.4 x 0.3 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	3.18 bis 30.07°.	
Bereich der Indizes	-8<=h<=9, -10<=k<=10, -15<=l<=15	
Anzahl gemessene Reflexe	5909	
Unabhängige Reflexe	1541 [R(int) = 0.0383]	
Vollständigkeit zu Theta = 30.07°	99.0 %	
Reflexe >2sigma(I)°	1323	
Methode der Strukturverfeinerung	Kleinste Quadrateverfeinerung (Vollmatrix) an F ²	
Reflexe / festgehalten / Parameter	1541 / 0 / 76	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.033	
R-Wert [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0227, wR2 = 0.0569	
R-Wert (alle Daten)	R1 = 0.0286, wR2 = 0.0595	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.389 und -0.430 10 ⁻⁶ e · pm ⁻³	

Tab. 2. Atomkoordinaten (x 10⁴) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren (pm²x 10⁻¹) für **8**.
U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten Uij Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Cu(1)	4399(1)	1827(1)	489(1)	27(1)
S(1)	7204(1)	1154(1)	-465(1)	22(1)
N(1)	5473(2)	2615(2)	2157(1)	27(1)
C(1)	6139(3)	1878(2)	-1863(1)	20(1)
N(2)	2398(2)	3473(2)	-575(1)	26(1)
C(2)	1233(3)	4437(2)	-1170(2)	23(1)
C(3)	-291(3)	5634(3)	-1937(2)	30(1)

Tab. 3. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **8**.

Cu(1)-N(1)	194.47(14)	N(1)-Cu(1)-S(1)	111.08(4)
Cu(1)-N(2)	196.96(15)	N(2)-Cu(1)-S(1)	108.71(5)
Cu(1)-S(1)	240.73(5)	N(1)-Cu(1)-S(1)#1	109.48(5)
Cu(1)-S(1)#1	241.42(4)	N(2)-Cu(1)-S(1)#1	108.34(5)
S(1)-C(1)	166.15(17)	S(1)-Cu(1)-S(1)#1	101.108(15)
S(1)-Cu(1)#1	241.41(4)	C(1)-S(1)-Cu(1)	99.88(6)
C(1)-N(1)#2	115.6(2)	C(1)-S(1)-Cu(1)#1	101.02(6)
N(1)-C(1)#3	115.6(2)	Cu(1)-S(1)-Cu(1)#1	78.892(15)
N(2)-C(2)	113.6(2)	N(1)#2-C(1)-S(1)	177.40(16)
C(2)-C(3)	145.4(2)	C(1)#3-N(1)-Cu(1)	178.13(14)
		C(2)-N(2)-Cu(1)	178.64(15)
N(1)-Cu(1)-N(2)	116.92(6)	N(2)-C(2)-C(3)	178.68(19)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

#1 -x+1,-y,-z #2 x,-y+1/2,z-1/2 #3 x,-y+1/2,z+1/2

Tab. 4. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **8**.
 Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^2 U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Cu(1)	35(1)	29(1)	15(1)	1(1)	4(1)	4(1)
S(1)	22(1)	26(1)	16(1)	2(1)	3(1)	-2(1)
N(1)	33(1)	29(1)	19(1)	-2(1)	8(1)	1(1)
C(1)	21(1)	21(1)	19(1)	0(1)	10(1)	-1(1)
N(2)	31(1)	25(1)	23(1)	2(1)	7(1)	1(1)
C(2)	26(1)	23(1)	21(1)	0(1)	8(1)	-4(1)
C(3)	28(1)	30(1)	30(1)	6(1)	4(1)	1(1)

Tab. 5. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **8**.

	x	y	z	U(eq)
H(3)	-1510(50)	5350(40)	-1890(30)	68(9)
H(1)	-80(40)	5700(40)	-2640(30)	73(10)
H(2)	-80(40)	6830(40)	-1550(30)	61(8)

Tetrabutylammonium-(dibromo)cuprat(I) **10**

Tab. 1. Kristall- und Strukturdaten von **10**.

Summenformel	C ₁₆ H ₃₆ Br ₂ Cu N	
Molmasse	465.81 g/mol	
Meßtemperatur	293(2) K	
Kristallsystem, Raumgruppe	monoklin, C2/c (15)	
Zelldimensionen	a = 1302.52(19) pm	$\alpha = 90^\circ$.
	b = 996.68(17) pm	$\beta = 92.93(4)^\circ$.
	c = 1585.9(2) pm	$\gamma = 90^\circ$.
Volumen	2.0562(5) nm ³	
Z, Dichte (berechnet)	4, 1.441 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	17.605 mm ⁻¹	
F(000)	1628	
Kristalldimensionen	0.2 x 0.2 x 0.3 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	2.57 bis 25.01°.	
Bereich der Indizes	-15<=h<=0, 0<=k<=11, -18<=l<=18	
Anzahl gemessene Reflexe	1898	
Unabhängige Reflexe	1815 [R(int) = 0.0169]	
Vollständigkeit zu Theta = 25.01°	99.9 %	
Reflexe >2sigma(I)°	1446	
Methode der Strukturverfeinerung	Kleinste Quadrateverfeinerung (Vollmatrix) an F ²	
Reflexe / festgehalten / Parameter	1815 / 0 / 166	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.020	
R-Wert [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0226, wR2 = 0.0507	
R-Wert (alle Daten)	R1 = 0.0462, wR2 = 0.0562	
Extinktionskoeffizient	0.00043(12)	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.341 und -0.294 10 ⁻⁶ e · pm ⁻³	

Tab. 2. Atomkoordinaten (x 10⁴) und equivalente isotrope Temperaturfaktoren (pm²x 10⁻¹) für **10**.
U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten Uij Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Br(1)	2276(1)	601(1)	4272(1)	34(1)
Cu(1)	2500	2500	5000	28(1)
N(1)	0	3521(3)	2500	16(1)
C(111)	-140(2)	2604(3)	3253(2)	18(1)
C(112)	-257(2)	3287(3)	4096(2)	21(1)
C(113)	4376(3)	-2720(3)	4735(2)	27(1)
C(114)	4210(3)	-2065(3)	5580(2)	32(1)
C(121)	929(2)	4430(3)	2654(2)	18(1)
C(122)	8041(2)	-3733(3)	7279(2)	20(1)
C(123)	7215(2)	-4661(3)	6905(2)	23(1)
C(124)	6170(2)	-3996(3)	6861(2)	34(1)

Tab. 3. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **10**.

Br(1)-Cu(1)	222.92(4)	C(122)-C(123)	151.6(4)
Cu(1)-Br(1)#1	222.92(4)	C(123)-C(124)	151.2(4)
N(1)-C(121)	152.1(3)		
N(1)-C(121)#2	152.1(3)	Br(1)-Cu(1)-Br(1)#1	179.999(13)
N(1)-C(111)	152.2(3)	C(121)-N(1)-C(121)#2	107.0(3)
N(1)-C(111)#2	152.3(3)	C(121)-N(1)-C(111)	110.94(15)
C(111)-C(112)	151.6(4)	C(121)#2-N(1)-C(111)	110.97(14)
C(112)-C(113)#3	152.1(4)	C(121)-N(1)-C(111)#2	110.97(14)
C(113)-C(114)	151.6(4)	C(121)#2-N(1)-C(111)#2	110.94(15)
C(113)-C(112)#4	152.1(4)	C(111)-N(1)-C(111)#2	106.1(3)
C(121)-C(122)#5	151.0(4)	C(112)-C(111)-N(1)	116.3(2)
C(122)-C(121)#5	151.0(4)	C(111)-C(112)-C(113)#3	109.9(2)

C(114)-C(113)-C(112)#4	111.6(2)	C(121)#5-C(122)-C(123)	110.9(2)
C(122)#5-C(121)-N(1)	115.8(2)	C(122)-C(123)-C(124)	111.7(2)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

#1 -x+1/2,-y+1/2,-z+1 #2 -x,y,-z+1/2 #3 x-1/2,y+1/2,z #4 x+1/2,y-1/2,z #5 -x+1,-y,-z+1

Tab. 4. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **10**.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Br(1)	42(1)	30(1)	29(1)	1(1)	2(1)	7(1)
Cu(1)	32(1)	31(1)	23(1)	3(1)	2(1)	6(1)
N(1)	14(2)	16(2)	19(1)	0	0(1)	0
C(111)	16(1)	16(1)	22(1)	3(1)	2(1)	-2(1)
C(112)	24(2)	20(1)	19(1)	0(1)	1(1)	-1(1)
C(113)	34(2)	24(2)	23(1)	1(1)	5(1)	-2(1)
C(114)	39(2)	34(2)	23(2)	2(1)	6(1)	2(2)
C(121)	18(1)	16(1)	20(1)	-1(1)	0(1)	-4(1)
C(122)	21(1)	18(1)	22(1)	1(1)	1(1)	-1(1)
C(123)	23(2)	24(2)	23(1)	0(1)	2(1)	0(1)
C(124)	20(2)	36(2)	45(2)	-2(2)	-1(1)	-1(1)

Tab. 5. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **10**.

	x	y	z	U(eq)
H(11A)	4320(20)	-2900(30)	3113(17)	21(8)
H(11B)	4580(20)	-2980(30)	1715(16)	18(7)
H(11C)	4630(20)	-1320(30)	707(17)	23(7)
H(11D)	5770(20)	-990(30)	953(17)	23(7)
H(11E)	3720(20)	-3140(30)	4515(17)	24(7)
H(11F)	4820(30)	-3400(30)	4791(19)	38(9)
H(11G)	3660(20)	1390(30)	511(19)	37(8)
H(11H)	4810(30)	1670(30)	801(18)	33(9)
H(11I)	3960(20)	2670(30)	950(20)	39(9)
H(12A)	4066(19)	80(30)	2788(16)	13(6)
H(12B)	4213(19)	-50(30)	1822(16)	11(6)
H(12C)	3070(20)	-2050(30)	1975(18)	24(7)
H(12D)	2880(20)	-1630(30)	2817(17)	17(7)
H(12E)	2170(20)	430(30)	2220(18)	25(8)
H(12F)	2400(20)	-90(30)	1335(18)	24(7)
H(12H)	980(30)	-1280(40)	2450(20)	49(10)
H(12G)	1200(20)	-1790(30)	1588(19)	31(9)
H(12I)	4380(30)	-5460(30)	3420(20)	47(10)

Tetramethylammonium-(dibromo)argentat(I) 11

Tab. 1. Kristall- und Strukturdaten von 11.

Summenformel	C ₄ H ₁₂ Ag Br ₂ N
Molmasse	340.02 g/mol
Meßtemperatur	293(2) K
Kristallsystem, Raumgruppe	orthorhombisch, Immm (71)
Zelldimensionen	a = 909.66(14) pm α = 90°. b = 675.61(8) pm β = 90°. c = 1497.29(11) pm γ = 90°.
Volumen	0.92020(19) nm ³
Z, Dichte (berechnet)	4, 2.424 Mg/m ³
Absorptionskoeffizient	10.793 mm ⁻¹
F(000)	616
Kristalldimensionen	0.1 x 0.2 x 0.15 mm ³
Theta-Bereich der Datensammlung	2.62 bis 19.97°.
Bereich der Indizes	-8<=h<=0, 0<=k<=6, -14<=l<=14
Anzahl gemessene Reflexe	514
Unabhängige Reflexe	270 [R(int) = 0.0435]
Vollständigkeit zu Theta = 19.97°	100.0 %
Reflexe >2σ(I)°	258
Methode der Strukturverfeinerung	Kleinste Quadrateverfeinerung (Vollmatrix) an F ²
Reflexe / festgehalten / Parameter	270 / 0 / 29
Goodness-of-fit gegen F ²	1.272
R-Wert [I>2σ(I)]	R1 = 0.0475, wR2 = 0.1343
R-Wert (alle Daten)	R1 = 0.0485, wR2 = 0.1356
Größte und kleinste Restelektronendichte	1.108 und -1.538 10 ⁻⁶ e · pm ⁻³

Tab. 2. Atomkoordinaten (x 10⁴) und equivalente isotrope Temperaturfaktoren (pm²x 10⁻¹) für 11. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten Uij Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Br(1)	5000	0	1364(1)	34(1)
Br(2)	7404(2)	-5000	0	36(1)
Ag(1)	5000	-2667(2)	0	37(1)
N(1)	0	0	1960(10)	33(4)
C(1)	3692(15)	5000	2450(10)	52(4)
C(2)	0	1740(30)	1388(11)	78(7)

Tab. 3. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für 11.

Br(1)-Ag(1)	272.41(17)	Ag(1)-Br(1)-Ag(1)#1	82.83(7)
Br(1)-Ag(1)#1	272.41(17)	Br(2)#2-Ag(1)-Br(2)	108.43(7)
Ag(1)-Br(2)#2	269.52(18)	Br(2)#2-Ag(1)-Br(1)#1	112.757(18)
Ag(1)-Br(2)	269.53(18)	Br(2)-Ag(1)-Br(1)#1	112.756(18)
Ag(1)-Br(1)#1	272.41(17)	Br(2)#2-Ag(1)-Br(1)	112.756(18)
Ag(1)-Ag(1)#2	315.2(3)	Br(2)-Ag(1)-Br(1)	112.756(18)
Br(2)-Ag(1)#2	269.52(18)	Br(1)#1-Ag(1)-Br(1)	97.17(7)
N(1)-C(2)	145.4(17)	Br(2)#2-Ag(1)-Ag(1)#2	54.22(4)
N(1)-C(2)#3	145.4(17)	Br(2)-Ag(1)-Ag(1)#2	54.22(4)
N(1)-C(1)#4	148.2(16)	Br(1)#1-Ag(1)-Ag(1)#2	131.42(3)
N(1)-C(1)#5	148.2(16)	Br(1)-Ag(1)-Ag(1)#2	131.42(3)
C(1)-N(1)#4	148.2(16)	Ag(1)#2-Br(2)-Ag(1)	71.57(7)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

#1 -x+1,-y,-z #2 -x+1,-y-1,-z #3 x,-y,z #4 -x+1/2,-y+1/2,-z+1/2 #5 x-1/2,-y+1/2,-z+1/2

Tab. 4. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **11**.
 Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^2 U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Br(1)	56(2)	28(2)	18(1)	0	0	0
Br(2)	37(1)	41(2)	31(1)	0	0	0
Ag(1)	53(1)	34(2)	24(1)	0	0	0
N(1)	56(10)	13(10)	29(9)	0	0	0
C(1)	27(7)	63(13)	65(10)	0	-7(8)	0
C(2)	160(20)	30(10)	40(9)	33(9)	0	0

Tab. 5. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **11**.

	x	y	z	U(eq)
H(2A)	-855	1718	1012	117
H(2B)	869	1737	1024	117
H(2C)	-14	2911	1751	117

Tetraethylammonium-(tribromo)diargentat(I) 12

Tab. 1. Kristall- und Strukturdaten von 12.

Summenformel	C ₈ H ₃₀ Ag ₂ Br ₃ N
Molmasse	585,7 g/mol
Meßtemperatur	193(2) K
Kristallsystem, Raumgruppe	orthorhombisch, Pnma (62)
Zelldimensionen	a = 2116.44(14) pm α = 90°. b = 1216.50(8) pm β = 90°. c = 1701.91(11) pm γ = 90°.
Volumen	4.3818(5) nm ³
Z, Dichte (berechnet)	12, 2.664 Mg/m ³
Absorptionskoeffizient	10.857 mm ⁻¹
F(000)	3288
Kristalldimensionen	0,5x 0,2 x 0,1 mm ³
Theta-Bereich der Datensammlung	1.54 bis 27.53°.
Bereich der Indizes	-27<=h<=27, -15<=k<=15, -21<=l<=22
Anzahl gemessene Reflexe	42305
Unabhängige Reflexe	5284 [R(int) = 0.0473]
Vollständigkeit zu Theta = 27.53°	99.9 %
Reflexe >2σ(I)°	4055
Methode der Strukturverfeinerung	Kleinste Quadrateverfeinerung (Vollmatrix) an F ²
Reflexe / festgehalten / Parameter	5284 / 0 / 218
Goodness-of-fit gegen F ²	0.956
R-Wert [I>2σ(I)]	R1 = 0.0225, wR2 = 0.0514
R-Wert (alle Daten)	R1 = 0.0366, wR2 = 0.0540
Extinktionskoeffizient	0.000092(9)
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.772 und -0.679 10 ⁻⁶ e · pm ⁻³

Tab. 2. Atomkoordinaten (x 10⁴) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren (pm²x 10⁻¹) für 12.
U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten Uij Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Ag(1)	3483(1)	1064(1)	2350(1)	26(1)
Ag(2)	1805(1)	1186(1)	2342(1)	25(1)
Ag(3)	137(1)	1135(1)	2549(1)	25(1)
Br(1)	4266(1)	2500	3189(1)	18(1)
Br(2)	4354(1)	-46(1)	1580(1)	32(1)
Br(3)	2688(1)	2500	1526(1)	19(1)
Br(4)	2614(1)	-33(1)	3147(1)	22(1)
Br(5)	1039(1)	2500	3266(1)	17(1)
Br(6)	908(1)	166(1)	1536(1)	23(1)
N(1)	2318(2)	2500	5632(2)	14(1)
N(2)	779(2)	2500	9415(2)	16(1)
N(3)	4079(2)	2500	9084(2)	16(1)
C(131)	2254(2)	2500	4745(3)	17(1)
C(121)	1650(2)	2500	5971(3)	19(1)
C(211)	1361(2)	2500	9928(3)	17(1)
C(221)	217(2)	2500	9985(3)	19(1)
C(112)	2427(2)	400(3)	5622(2)	22(1)
C(332)	3999(2)	400(3)	9171(2)	25(1)
C(212)	1984(2)	2500	9481(3)	23(1)
C(132)	2870(2)	2500	4296(3)	23(1)
C(222)	-428(2)	2500	9597(3)	23(1)
C(321)	4738(2)	2500	9440(3)	28(1)
C(311)	4183(2)	2500	8205(3)	21(1)
C(122)	1616(2)	2500	6863(3)	28(1)
C(331)	3701(2)	1498(3)	9358(2)	21(1)
C(111)	2688(1)	1489(2)	5910(2)	18(1)
C(312)	3580(3)	2500	7711(3)	33(1)
C(232)	804(2)	395(3)	9293(2)	26(1)
C(231)	764(1)	1492(3)	8876(2)	19(1)
C(322)	4754(4)	2500	10332(4)	64(2)

Tab. 3. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **12**.

Ag(1)-Br(2)	263.45(4)	Br(4)-Ag(1)-Br(1)	117.730(16)
Ag(1)-Br(4)	264.65(4)	Br(2)-Ag(1)-Br(3)	119.389(17)
Ag(1)-Br(1)	279.88(4)	Br(4)-Ag(1)-Br(3)	98.842(14)
Ag(1)-Br(3)	280.08(4)	Br(1)-Ag(1)-Br(3)	102.811(12)
Ag(2)-Br(4)	264.73(4)	Br(4)-Ag(2)-Br(6)	117.934(14)
Ag(2)-Br(6)	265.21(4)	Br(4)-Ag(2)-Br(5)	114.113(15)
Ag(2)-Br(5)	276.70(4)	Br(6)-Ag(2)-Br(5)	98.330(14)
Ag(2)-Br(3)	282.41(5)	Br(4)-Ag(2)-Br(3)	98.243(14)
Ag(2)-Ag(2)#1	319.57(5)	Br(6)-Ag(2)-Br(3)	118.987(16)
Br(5)-Ag(2)#1	276.70(4)	Br(5)-Ag(2)-Br(3)	109.915(12)
Br(5)-Ag(3)	280.90(4)	Br(4)-Ag(2)-Ag(2)#1	124.092(9)
Br(5)-Ag(3)#1	280.90(5)	Br(6)-Ag(2)-Ag(2)#1	117.917(9)
Br(1)-Ag(3)#2	277.99(4)	Br(5)-Ag(2)-Ag(2)#1	54.728(8)
Br(1)-Ag(3)#3	278.00(4)	Br(3)-Ag(2)-Ag(2)#1	55.542(8)
Br(1)-Ag(1)#1	279.88(4)	Ag(2)-Br(5)-Ag(2)#1	70.545(16)
Br(3)-Ag(1)#1	280.08(5)	Ag(2)-Br(5)-Ag(3)	79.040(11)
Br(3)-Ag(2)#1	282.40(5)	Ag(2)#1-Br(5)-Ag(3)	119.500(18)
Ag(3)-Br(2)#4	264.75(4)	Ag(2)-Br(5)-Ag(3)#1	119.499(18)
Ag(3)-Br(6)	265.05(4)	Ag(2)#1-Br(5)-Ag(3)#1	79.041(11)
Ag(3)-Br(1)#4	277.99(4)	Ag(3)-Br(5)-Ag(3)#1	72.451(15)
Ag(3)-Ag(3)#1	332.01(6)	Ag(3)#2-Br(1)-Ag(3)#3	73.334(16)
Br(2)-Ag(3)#3	264.74(4)	Ag(3)#2-Br(1)-Ag(1)	122.350(19)
N(1)-C(131)	151.5(5)	Ag(3)#3-Br(1)-Ag(1)	77.867(11)
N(1)-C(121)	152.8(5)	Ag(3)#2-Br(1)-Ag(1)#1	77.868(11)
N(1)-C(111)#1	153.2(3)	Ag(3)#3-Br(1)-Ag(1)#1	122.349(19)
N(1)-C(111)	153.2(3)	Ag(1)-Br(1)-Ag(1)#1	77.217(16)
N(2)-C(211)	151.0(5)	Ag(1)#1-Br(3)-Ag(1)	77.152(16)
N(2)-C(231)#1	153.1(4)	Ag(1)#1-Br(3)-Ag(2)#1	78.382(11)
N(2)-C(231)	153.1(4)	Ag(1)-Br(3)-Ag(2)#1	120.278(18)
N(2)-C(221)	153.4(5)	Ag(1)#1-Br(3)-Ag(2)	120.280(18)
N(3)-C(311)	151.2(6)	Ag(1)-Br(3)-Ag(2)	78.382(11)
N(3)-C(321)	152.2(6)	Ag(2)#1-Br(3)-Ag(2)	68.915(15)
N(3)-C(331)#1	153.0(4)	Br(2)#4-Ag(3)-Br(6)	120.529(16)
N(3)-C(331)	153.0(4)	Br(2)#4-Ag(3)-Br(1)#4	99.319(15)
C(131)-C(132)	151.3(6)	Br(6)-Ag(3)-Br(1)#4	112.326(16)
C(121)-C(122)	152.0(7)	Br(2)#4-Ag(3)-Br(5)	120.184(16)
C(211)-C(212)	152.1(6)	Br(6)-Ag(3)-Br(5)	97.333(15)
C(221)-C(222)	151.6(6)	Br(1)#4-Ag(3)-Br(5)	107.093(12)
C(112)-C(111)	151.7(4)	Br(2)#4-Ag(3)-Ag(3)#1	122.872(10)
C(332)-C(331)	151.1(4)	Br(6)-Ag(3)-Ag(3)#1	116.424(9)
C(321)-C(322)	151.9(8)	Br(1)#4-Ag(3)-Ag(3)#1	53.334(8)
C(311)-C(312)	152.9(7)	Br(5)-Ag(3)-Ag(3)#1	53.775(8)
C(232)-C(231)	151.4(5)	Ag(1)-Br(4)-Ag(2)	84.355(13)
Br(2)-Ag(1)-Br(4)	118.849(15)	Ag(1)-Br(2)-Ag(3)#3	83.171(14)
Br(2)-Ag(1)-Br(1)	99.159(14)	Ag(3)-Br(6)-Ag(2)	84.008(13)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

#1 x,-y+1/2,z #2 x+1/2,-y+1/2,-z+1/2 #3 x+1/2,y,-z+1/2 #4 x-1/2,y,-z+1/2

Tab. 4. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **12**.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Ag(1)	21(1)	27(1)	29(1)	-1(1)	2(1)	-1(1)
Ag(2)	21(1)	26(1)	28(1)	-3(1)	-2(1)	3(1)
Ag(3)	20(1)	28(1)	28(1)	1(1)	1(1)	1(1)
Br(1)	17(1)	15(1)	22(1)	0	1(1)	0
Br(2)	18(1)	29(1)	47(1)	-17(1)	4(1)	-4(1)
Br(3)	22(1)	15(1)	22(1)	0	-1(1)	0
Br(4)	19(1)	19(1)	29(1)	5(1)	0(1)	-1(1)
Br(5)	16(1)	16(1)	19(1)	0	0(1)	0

Br(6)	21(1)	22(1)	25(1)	-6(1)	-1(1)	1(1)
N(1)	13(2)	14(2)	17(2)	0	-2(2)	0
N(2)	16(2)	15(2)	15(2)	0	2(2)	0
N(3)	14(2)	13(2)	22(2)	0	1(2)	0
C(131)	20(2)	13(2)	16(2)	0	-4(2)	0
C(121)	13(2)	17(2)	26(3)	0	3(2)	0
C(211)	16(2)	17(2)	18(2)	0	-2(2)	0
C(221)	18(2)	18(2)	20(2)	0	7(2)	0
C(112)	27(2)	15(2)	23(2)	4(1)	-4(2)	2(1)
C(332)	23(2)	16(2)	37(2)	-1(2)	4(2)	-3(1)
C(212)	18(2)	23(2)	27(3)	0	1(2)	0
C(132)	26(2)	19(2)	24(3)	0	3(2)	0
C(222)	18(2)	25(3)	25(3)	0	3(2)	0
C(321)	20(3)	19(2)	46(3)	0	-22(2)	0
C(311)	22(2)	20(2)	22(3)	0	5(2)	0
C(122)	35(3)	21(2)	27(3)	0	10(2)	0
C(331)	22(2)	16(2)	25(2)	0(1)	5(1)	-4(1)
C(111)	17(2)	15(2)	22(2)	2(1)	-4(1)	4(1)
C(312)	47(3)	31(3)	22(3)	0	-16(2)	0
C(232)	25(2)	19(2)	33(2)	-6(2)	4(2)	-4(1)
C(231)	20(2)	21(2)	16(2)	-6(1)	1(1)	-2(1)
C(322)	93(6)	46(4)	52(4)	0	-51(4)	0

Tab. 5. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **12**.

	x	y	z	U(eq)
H(13A)	2008	1844	4588	20
H(13B)	2008	3156	4588	20
H(12A)	1424	3156	5772	22
H(12B)	1424	1844	5772	22
H(21A)	1349	1844	10271	20
H(21B)	1349	3156	10271	20
H(22A)	249	1844	10326	22
H(22B)	249	3156	10326	22
H(11A)	2028	241	5892	32
H(11B)	2732	-186	5734	32
H(11C)	2352	440	5055	32
H(33A)	4237	455	8678	38
H(33B)	3668	-157	9116	38
H(33C)	4286	190	9597	38
H(21C)	2004	1853	9139	34
H(21D)	2336	2478	9856	34
H(21E)	2015	3168	9162	34
H(13C)	3127	3129	4461	35
H(13D)	2783	2554	3731	35
H(13E)	3100	1817	4403	35
H(22C)	-470	3153	9264	34
H(22D)	-757	2510	10002	34
H(22E)	-474	1837	9275	34
H(32A)	4968	1843	9248	34
H(32B)	4968	3157	9248	34
H(31A)	4435	1844	8065	26
H(31B)	4435	3156	8065	26
H(12C)	1855	1874	7070	41
H(12D)	1174	2441	7029	41
H(12E)	1796	3185	7066	41
H(33D)	3642	1550	9934	25
H(33E)	3278	1525	9112	25
H(11D)	3131	1559	5730	21
H(11E)	2691	1483	6492	21
H(31C)	3325	1852	7842	50
H(31D)	3691	2480	7152	50
H(31E)	3336	3167	7821	50

H(23A)	1234	288	9494	39
H(23B)	701	-196	8924	39
H(23C)	505	383	9732	39
H(23D)	368	1511	8567	23
H(23E)	1120	1546	8502	23
H(32C)	4450	3040	10533	96
H(32D)	5179	2693	10513	96
H(32E)	4642	1767	10527	96

Tetraethylammonium-(trichloro)diargentat(I) **13**

Tab. 1. Kristall- und Strukturdaten von **13**.

Summenformel	C ₈ H ₃₀ Ag ₂ Cl ₃ N	
Molmasse	452,4 g/mol	
Meßtemperatur	193(2) K	
Kristallsystem, Raumgruppe	orthorhombisch, Pnma (62)	
Zelldimensionen	a = 2075.42(15) pm	$\alpha = 90^\circ$.
	b = 1185.35(9) pm	$\beta = 90^\circ$.
	c = 1658.17(12) pm	$\gamma = 90^\circ$.
Volumen	4.0793(5) nm ³	
Z, Dichte (berechnet)	12, 2.210 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	3.435 mm ⁻¹	
F(000)	2640	
Kristalldimensionen	0.6 x 0.2 x 0.3 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	1.57 bis 30.03°.	
Bereich der Indizes	-28<=h<=28, -16<=k<=16, -23<=l<=23	
Anzahl gemessene Reflexe	45202	
Unabhängige Reflexe	6205 [R(int) = 0.0454]	
Vollständigkeit zu Theta = 30.03°	99.5 %	
Reflexe >2sigma(I)°	5090	
Methode der Strukturverfeinerung	Kleinste Quadrateverfeinerung (Vollmatrix) an F ²	
Reflexe / festgehalten / Parameter	6205 / 0 / 218	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.047	
R-Wert [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0285, wR2 = 0.0769	
R-Wert (alle Daten)	R1 = 0.0363, wR2 = 0.0819	
Extinktionskoeffizient	0.00085(4)	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.967 und -1.018 10 ⁻⁶ e · pm ⁻³	

Tab. 2. Atomkoordinaten (x 10⁴) und equivalente isotrope Temperaturfaktoren (pm²x 10⁻¹) für **13**.
U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten Uij Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Ag(1)	4889(1)	1087(1)	2508(1)	35(1)
Ag(2)	3220(1)	1071(1)	2361(1)	36(1)
Ag(3)	1552(1)	1024(1)	2358(1)	34(1)
Cl(1)	3978(1)	2500	3156(1)	24(1)
Cl(2)	4109(1)	132(1)	1554(1)	32(1)
Cl(3)	2351(1)	2500	1627(1)	27(1)
Cl(4)	2403(1)	-70(1)	3136(1)	31(1)
Cl(5)	754(1)	2500	3134(1)	24(1)
Cl(6)	674(1)	3(1)	1604(1)	40(1)
N(1)	2693(1)	2500	5607(1)	18(1)
N(2)	4200(1)	2500	9456(1)	20(1)
N(3)	856(1)	2500	9102(1)	20(1)
C(132)	2584(1)	349(2)	5595(1)	28(1)
C(211)	3604(1)	2500	9988(2)	22(1)
C(122)	2153(2)	2500	4224(2)	29(1)
C(121)	2778(1)	2500	4697(2)	21(1)
C(221)	4772(1)	2500	10033(2)	22(1)
C(111)	3367(1)	2500	5969(2)	24(1)
C(212)	2970(1)	2500	9538(2)	30(1)
C(311)	173(2)	2500	9433(2)	32(1)
C(222)	5429(1)	2500	9640(2)	31(1)
C(232)	4170(1)	346(2)	9324(1)	32(1)
C(322)	935(1)	349(2)	9192(2)	35(1)
C(131)	2316(1)	1468(2)	5881(1)	24(1)
C(331)	781(2)	2500	8191(2)	29(1)
C(321)	1232(1)	1477(2)	9389(1)	28(1)
C(112)	3397(2)	2500	6883(2)	33(1)
C(231)	4213(1)	1472(2)	8904(1)	26(1)
C(332)	1402(2)	2500	7717(2)	42(1)
C(312)	122(2)	2500	10337(2)	58(1)

Tab. 3. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **13**.

Ag(2)-Cl(4)	252.19(6)	Cl(4)-Ag(2)-Cl(2)	121.51(2)
Ag(2)-Cl(2)	253.71(6)	Cl(4)-Ag(2)-Cl(1)	119.12(2)
Ag(2)-Cl(1)	266.13(6)	Cl(2)-Ag(2)-Cl(1)	96.363(19)
Ag(2)-Cl(3)	275.73(6)	Cl(4)-Ag(2)-Cl(3)	96.575(19)
Ag(3)-Cl(6)	251.92(6)	Cl(2)-Ag(2)-Cl(3)	120.82(2)
Ag(3)-Cl(4)	254.26(6)	Cl(1)-Ag(2)-Cl(3)	102.380(16)
Ag(3)-Cl(3)	269.83(6)	Cl(6)-Ag(3)-Cl(4)	120.59(2)
Ag(3)-Cl(5)	273.13(6)	Cl(6)-Ag(3)-Cl(3)	122.20(3)
Ag(1)-Cl(2)	253.11(6)	Cl(4)-Ag(3)-Cl(3)	97.58(2)
Ag(1)-Cl(6)#1	254.47(6)	Cl(6)-Ag(3)-Cl(5)	95.902(19)
Ag(1)-Cl(5)#1	267.49(6)	Cl(4)-Ag(3)-Cl(5)	120.60(2)
Ag(1)-Cl(1)	274.52(6)	Cl(3)-Ag(3)-Cl(5)	99.750(16)
Ag(1)-Ag(1)#2	335.01(5)	Cl(2)-Ag(1)-Cl(6)#1	123.07(2)
Cl(1)-Ag(2)#2	266.12(6)	Cl(2)-Ag(1)-Cl(5)#1	117.42(2)
Cl(1)-Ag(1)#2	274.52(6)	Cl(6)#1-Ag(1)-Cl(5)#1	96.71(2)
Cl(3)-Ag(3)#2	269.83(6)	Cl(2)-Ag(1)-Cl(1)	94.430(19)
Cl(3)-Ag(2)#2	275.73(6)	Cl(6)#1-Ag(1)-Cl(1)	121.48(2)
Cl(5)-Ag(1)#3	267.49(6)	Cl(5)#1-Ag(1)-Cl(1)	103.622(15)
Cl(5)-Ag(1)#4	267.49(6)	Cl(2)-Ag(1)-Ag(1)#2	116.579(14)
Cl(5)-Ag(3)#2	273.12(6)	Cl(6)#1-Ag(1)-Ag(1)#2	120.310(16)
Cl(6)-Ag(1)#3	254.47(6)	Cl(5)#1-Ag(1)-Ag(1)#2	51.228(10)
N(1)-C(121)	152.0(3)	Cl(1)-Ag(1)-Ag(1)#2	52.399(10)
N(1)-C(111)	152.1(3)	Ag(2)#2-Cl(1)-Ag(2)	79.06(2)
N(1)-C(131)	152.2(2)	Ag(2)#2-Cl(1)-Ag(1)	126.98(3)
N(1)-C(131)#2	152.2(2)	Ag(2)-Cl(1)-Ag(1)	79.913(13)
N(2)-C(211)	151.9(3)	Ag(2)#2-Cl(1)-Ag(1)#2	79.912(13)
N(2)-C(231)#2	152.4(2)	Ag(2)-Cl(1)-Ag(1)#2	126.98(3)
N(2)-C(231)	152.4(2)	Ag(1)-Cl(1)-Ag(1)#2	75.20(2)
N(2)-C(221)	152.5(3)	Ag(2)-Cl(4)-Ag(3)	86.264(18)
N(3)-C(321)#2	151.9(2)	Ag(3)-Cl(3)-Ag(3)#2	80.82(2)
N(3)-C(321)	151.9(2)	Ag(3)-Cl(3)-Ag(2)	78.786(14)
N(3)-C(311)	152.0(4)	Ag(3)#2-Cl(3)-Ag(2)	127.01(3)
N(3)-C(331)	152.0(4)	Ag(3)-Cl(3)-Ag(2)#2	127.01(3)
C(132)-C(131)	151.4(3)	Ag(3)#2-Cl(3)-Ag(2)#2	78.785(14)
C(211)-C(212)	151.2(4)	Ag(2)-Cl(3)-Ag(2)#2	75.80(2)
C(122)-C(121)	151.5(4)	Ag(1)#3-Cl(5)-Ag(1)#4	77.54(2)
C(221)-C(222)	151.2(4)	Ag(1)#3-Cl(5)-Ag(3)#2	128.37(3)
C(111)-C(112)	151.7(4)	Ag(1)#4-Cl(5)-Ag(3)#2	79.547(13)
C(311)-C(312)	150.2(5)	Ag(1)#3-Cl(5)-Ag(3)	79.547(13)
C(232)-C(231)	150.9(3)	Ag(1)#4-Cl(5)-Ag(3)	128.36(3)
C(322)-C(321)	150.7(3)	Ag(3)#2-Cl(5)-Ag(3)	79.65(2)
C(331)-C(332)	151.1(4)	Ag(3)-Cl(6)-Ag(1)#3	86.161(19)
		Ag(1)-Cl(2)-Ag(2)	86.499(18)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

#1 $x+1/2, y, -z+1/2$ #2 $x, -y+1/2, z$ #3 $x-1/2, y, -z+1/2$ #4 $x-1/2, -y+1/2, -z+1/2$

Tab. 4. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **13**.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Ag(1)	25(1)	40(1)	41(1)	3(1)	-1(1)	-2(1)
Ag(2)	26(1)	40(1)	41(1)	-6(1)	3(1)	-5(1)
Ag(3)	24(1)	36(1)	40(1)	-3(1)	-4(1)	0(1)
Cl(1)	22(1)	23(1)	28(1)	0	-1(1)	0
Cl(2)	30(1)	33(1)	34(1)	-9(1)	2(1)	-2(1)
Cl(3)	28(1)	21(1)	33(1)	0	4(1)	0
Cl(4)	26(1)	28(1)	38(1)	8(1)	1(1)	1(1)
Cl(5)	22(1)	22(1)	29(1)	0	-2(1)	0
Cl(6)	24(1)	38(1)	58(1)	-22(1)	-6(1)	4(1)
N(1)	18(1)	17(1)	19(1)	0	3(1)	0
N(2)	18(1)	19(1)	22(1)	0	-2(1)	0

N(3)	19(1)	18(1)	23(1)	0	0(1)	0
C(132)	32(1)	19(1)	34(1)	4(1)	2(1)	-2(1)
C(211)	21(1)	22(1)	23(1)	0	1(1)	0
C(122)	35(2)	27(1)	25(1)	0	-8(1)	0
C(121)	24(1)	20(1)	18(1)	0	4(1)	0
C(221)	19(1)	23(1)	24(1)	0	-5(1)	0
C(111)	20(1)	25(1)	27(1)	0	-3(1)	0
C(212)	22(1)	32(2)	36(2)	0	-4(1)	0
C(311)	27(1)	24(1)	44(2)	0	12(1)	0
C(222)	20(1)	33(2)	40(2)	0	0(1)	0
C(232)	37(1)	23(1)	38(1)	-5(1)	-6(1)	3(1)
C(322)	32(1)	21(1)	51(1)	-4(1)	-6(1)	4(1)
C(131)	24(1)	22(1)	25(1)	3(1)	6(1)	-4(1)
C(331)	31(2)	33(2)	24(1)	0	-3(1)	0
C(321)	26(1)	21(1)	37(1)	1(1)	-9(1)	4(1)
C(112)	42(2)	33(2)	25(1)	0	-10(1)	0
C(231)	28(1)	26(1)	23(1)	-6(1)	0(1)	1(1)
C(332)	53(2)	38(2)	36(2)	0	19(2)	0
C(312)	82(3)	48(2)	45(2)	0	36(2)	0

Tab. 5. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **13**.

	x	y	z	U(eq)
H(13A)	2314	-266	5800	43
H(13B)	3025	258	5796	43
H(13C)	2586	331	5004	43
H(21A)	3619	1826	10340	26
H(21B)	3619	3174	10340	26
H(12A)	2248	2500	3645	44
H(12B)	1903	3175	4361	44
H(12C)	1903	1825	4361	44
H(12D)	3031	3174	4542	25
H(12E)	3031	1826	4542	25
H(22A)	4739	3173	10384	27
H(22B)	4739	1827	10384	27
H(11A)	3599	1827	5769	29
H(11B)	3599	3173	5769	29
H(21C)	2614	2500	9925	45
H(21D)	2944	1825	9198	45
H(21E)	2944	3175	9198	45
H(31A)	-54	3174	9224	38
H(31B)	-54	1826	9224	38
H(22C)	5763	2500	10058	46
H(22D)	5475	3175	9304	46
H(22E)	5475	1825	9304	46
H(23A)	4181	-260	8921	48
H(23B)	3767	304	9629	48
H(23C)	4536	261	9693	48
H(32A)	1211	-255	9400	52
H(32B)	893	273	8606	52
H(32C)	508	298	9442	52
H(13D)	2302	1462	6478	29
H(13E)	1867	1539	5685	29
H(33A)	528	1827	8034	35
H(33B)	528	3173	8034	35
H(32D)	1668	1505	9147	33
H(32E)	1285	1529	9981	33
H(11C)	3848	2500	7057	50
H(11D)	3181	1825	7092	50
H(11E)	3181	3175	7092	50
H(23D)	3850	1532	8519	31
H(23E)	4617	1492	8586	31
H(33C)	1305	2500	7138	64

H(33D)	1653	1825	7852	64
H(33E)	1653	3175	7852	64
H(31C)	-333	2500	10494	87
H(31D)	333	3175	10553	87
H(31E)	333	1825	10553	87

Tetrabutylammonium-(tetraiodo)triargentat(I) **14**.

Tab. 9. Kristall- und Strukturdaten von **14**.

Summenformel	C ₁₆ H ₃₆ Ag ₃ I ₄ N	
Molmasse	1073.67 g/mol	
Meßtemperatur	133(2) K	
Kristallsystem, Raumgruppe	monoklin, P2 ₁ /c (14)	
Zelldimensionen	a = 937.90(8) pm	$\alpha = 90^\circ$.
	b = 1570.48(14) pm	$\beta = 100.8000(10)^\circ$.
	c = 1855.56(16) pm	$\gamma = 90^\circ$.
Volumen	2.6847(4) nm ³	
Z, Dichte (berechnet)	4, 2.656 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	6.768 mm ⁻¹	
F(000)	1968	
Kristalldimensionen	0.25 x 0.3 x 0.2 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	1.71 bis 30.50°.	
Bereich der Indizes	-13<=h<=13, -21<=k<=21, -26<=l<=26	
Anzahl gemessene Reflexe	30881	
Unabhängige Reflexe	8022 [R(int) = 0.0376]	
Vollständigkeit zu Theta = 30.50°	97.8 %	
Reflexe >2sigma(I)°	6773	
Methode der Strukturverfeinerung	Kleinste Quadrateverfeinerung (Vollmatrix) an F ²	
Reflexe / festgehalten / Parameter	8022 / 0 / 218	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.019	
R-Wert [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0351, wR2 = 0.0816	
R-Wert (alle Daten)	R1 = 0.0432, wR2 = 0.0853	
Extinktionskoeffizient	0.00242(7)	
Größte und kleinste Restelektronendichte	3.727 und -3.238 10 ⁻⁶ e · pm ⁻³	

Tab. 10. Atomkoordinaten (x 10⁴) und equivalente isotrope Temperaturfaktoren (pm²x 10⁻¹) für **14**.
U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten Uij Tensors.

	x	y	z	U(eq)
I(1)	848(1)	4699(1)	1857(1)	29(1)
I(2)	-2103(1)	6465(1)	304(1)	28(1)
I(3)	-4455(1)	4586(1)	1412(1)	31(1)
I(4)	-2324(1)	3376(1)	-225(1)	31(1)
Ag(1)	-1693(1)	4718(1)	829(1)	48(1)
Ag(2)	-4960(1)	5922(1)	208(1)	45(1)
Ag(3)	2463(1)	4897(1)	769(1)	45(1)
N(1)	2234(4)	1563(2)	1822(2)	21(1)
C(11)	3146(4)	1836(3)	2556(2)	22(1)
C(12)	3420(5)	2783(3)	2644(2)	28(1)
C(13)	4310(6)	2980(3)	3397(2)	32(1)
C(14)	4595(7)	3929(4)	3492(3)	46(1)
C(21)	1955(5)	615(3)	1889(2)	24(1)
C(22)	1007(5)	199(3)	1233(3)	30(1)
C(23)	985(6)	-762(3)	1353(3)	34(1)
C(24)	-91(8)	-1217(4)	761(4)	55(2)
C(31)	3029(5)	1743(3)	1197(2)	24(1)
C(32)	4352(5)	1192(3)	1176(3)	28(1)
C(33)	5198(6)	1546(3)	618(3)	35(1)
C(34)	6496(6)	989(4)	551(3)	43(1)
C(41)	813(4)	2060(3)	1657(2)	23(1)
C(42)	-125(5)	1984(3)	2235(3)	31(1)
C(43)	-1512(5)	2490(3)	2018(3)	34(1)
C(44)	-2555(6)	2342(4)	2537(4)	43(1)

Tab. 3. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **14**.

I(1)-Ag(3)	275.91(5)	Ag(3)#2-I(3)-Ag(2)#3	70.411(13)
I(1)-Ag(1)	275.95(6)	Ag(1)-I(3)-Ag(2)#3	70.809(13)
I(2)-Ag(2)	278.62(5)	Ag(2)-I(3)-Ag(2)#3	58.842(17)
I(2)-Ag(3)#1	290.03(6)	Ag(2)#3-I(4)-Ag(1)	76.869(16)
I(2)-Ag(1)	291.30(6)	Ag(2)#3-I(4)-Ag(3)#1	69.531(15)
I(3)-Ag(3)#2	295.40(6)	Ag(1)-I(4)-Ag(3)#1	62.450(15)
I(3)-Ag(1)	299.53(7)	I(1)-Ag(1)-I(4)	120.394(19)
I(3)-Ag(2)	303.56(6)	I(1)-Ag(1)-I(2)	106.506(17)
I(3)-Ag(2)#3	305.84(6)	I(4)-Ag(1)-I(2)	117.909(18)
I(4)-Ag(2)#3	278.14(6)	I(1)-Ag(1)-Ag(3)#1	135.01(2)
I(4)-Ag(1)	286.04(6)	I(4)-Ag(1)-Ag(3)#1	59.223(15)
I(4)-Ag(3)#1	288.76(6)	I(2)-Ag(1)-Ag(3)#1	58.954(14)
Ag(1)-Ag(3)#1	297.99(7)	I(1)-Ag(1)-I(3)	116.28(2)
Ag(2)-I(4)#3	278.14(6)	I(4)-Ag(1)-I(3)	96.540(17)
Ag(2)-Ag(2)#3	299.36(10)	I(2)-Ag(1)-I(3)	96.700(17)
Ag(2)-I(3)#3	305.84(6)	Ag(3)#1-Ag(1)-I(3)	107.973(18)
Ag(2)-Ag(3)#2	323.38(7)	I(4)#3-Ag(2)-I(2)	138.57(2)
Ag(3)-I(4)#1	288.76(6)	I(4)#3-Ag(2)-Ag(2)#3	114.06(2)
Ag(3)-I(2)#1	290.04(6)	I(2)-Ag(2)-Ag(2)#3	106.87(2)
Ag(3)-I(3)#4	295.40(6)	I(4)#3-Ag(2)-I(3)	106.416(17)
Ag(3)-Ag(1)#1	297.99(7)	I(2)-Ag(2)-I(3)	98.555(16)
Ag(3)-Ag(2)#4	323.38(7)	Ag(2)#3-Ag(2)-I(3)	60.960(18)
N(1)-C(31)	151.8(5)	I(4)#3-Ag(2)-I(3)#3	96.804(16)
N(1)-C(21)	152.0(5)	I(2)-Ag(2)-I(3)#3	97.836(16)
N(1)-C(41)	152.5(5)	Ag(2)#3-Ag(2)-I(3)#3	60.198(17)
N(1)-C(11)	152.7(5)	I(3)-Ag(2)-I(3)#3	121.158(18)
C(11)-C(12)	151.4(6)	I(4)#3-Ag(2)-Ag(3)#2	56.780(14)
C(12)-C(13)	151.9(6)	I(2)-Ag(2)-Ag(3)#2	154.12(2)
C(13)-C(14)	151.7(7)	Ag(2)#3-Ag(2)-Ag(3)#2	67.539(18)
C(21)-C(22)	151.4(6)	I(3)-Ag(2)-Ag(3)#2	56.114(14)
C(22)-C(23)	152.6(6)	I(3)#3-Ag(2)-Ag(3)#2	100.336(16)
C(23)-C(24)	152.4(8)	I(1)-Ag(3)-I(4)#1	111.533(18)
C(31)-C(32)	151.9(6)	I(1)-Ag(3)-I(2)#1	114.200(18)
C(32)-C(33)	152.3(6)	I(4)#1-Ag(3)-I(2)#1	117.433(18)
C(33)-C(34)	152.2(7)	I(1)-Ag(3)-I(3)#4	108.427(18)
C(41)-C(42)	151.5(6)	I(4)#1-Ag(3)-I(3)#4	105.849(17)
C(42)-C(43)	151.3(6)	I(2)#1-Ag(3)-I(3)#4	97.721(16)
C(43)-C(44)	151.4(7)	I(1)-Ag(3)-Ag(1)#1	133.40(2)
		I(4)#1-Ag(3)-Ag(1)#1	58.326(13)
Ag(3)-I(1)-Ag(1)	90.818(19)	I(2)#1-Ag(3)-Ag(1)#1	59.373(14)
Ag(2)-I(2)-Ag(3)#1	75.109(15)	I(3)#4-Ag(3)-Ag(1)#1	118.134(18)
Ag(2)-I(2)-Ag(1)	78.344(16)	I(1)-Ag(3)-Ag(2)#4	146.91(2)
Ag(3)#1-I(2)-Ag(1)	61.673(15)	I(4)#1-Ag(3)-Ag(2)#4	53.688(13)
Ag(3)#2-I(3)-Ag(1)	133.636(16)	I(2)#1-Ag(3)-Ag(2)#4	98.259(16)
Ag(3)#2-I(3)-Ag(2)	65.337(13)	I(3)#4-Ag(3)-Ag(2)#4	58.548(14)
Ag(1)-I(3)-Ag(2)	73.326(14)	Ag(1)#1-Ag(3)-Ag(2)#4	68.595(16)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung equivalenter Atome:

#1 -x,-y+1,-z #2 x-1,y,z #3 -x-1,-y+1,-z #4 x+1,y,z

Tab. 4. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **14**.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
I(1)	31(1)	26(1)	32(1)	1(1)	10(1)	4(1)
I(2)	29(1)	21(1)	33(1)	0(1)	6(1)	-1(1)
I(3)	29(1)	39(1)	24(1)	0(1)	4(1)	-4(1)
I(4)	33(1)	25(1)	36(1)	-3(1)	9(1)	-1(1)
Ag(1)	59(1)	37(1)	42(1)	0(1)	-7(1)	1(1)
Ag(2)	33(1)	51(1)	52(1)	-3(1)	9(1)	-2(1)
Ag(3)	59(1)	41(1)	38(1)	2(1)	20(1)	0(1)
N(1)	24(2)	18(2)	21(2)	2(1)	2(1)	0(1)

C(11)	26(2)	18(2)	20(2)	2(1)	1(1)	0(1)
C(12)	34(2)	20(2)	28(2)	1(2)	-1(2)	-1(2)
C(13)	42(3)	32(2)	21(2)	-1(2)	2(2)	-9(2)
C(14)	60(4)	38(3)	37(3)	-6(2)	4(2)	-22(3)
C(21)	30(2)	17(2)	23(2)	3(1)	4(2)	0(2)
C(22)	37(2)	21(2)	29(2)	2(2)	2(2)	-2(2)
C(23)	48(3)	21(2)	33(2)	-2(2)	8(2)	-4(2)
C(24)	65(4)	29(3)	65(4)	-9(3)	-3(3)	-11(3)
C(31)	30(2)	23(2)	19(2)	4(1)	7(2)	1(2)
C(32)	33(2)	25(2)	28(2)	4(2)	8(2)	4(2)
C(33)	36(2)	34(3)	38(3)	7(2)	17(2)	2(2)
C(34)	40(3)	41(3)	54(3)	4(2)	22(2)	3(2)
C(41)	24(2)	18(2)	26(2)	4(1)	2(2)	2(1)
C(42)	29(2)	31(2)	33(2)	8(2)	8(2)	4(2)
C(43)	32(2)	27(2)	43(3)	5(2)	9(2)	2(2)
C(44)	32(2)	41(3)	60(4)	1(3)	18(2)	1(2)

Tab. 5. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **14**.

	x	y	z	U(eq)
H(11A)	2664	1645	2945	26
H(11B)	4075	1547	2618	26
H(12A)	2500	3082	2582	34
H(12B)	3934	2981	2269	34
H(13A)	3794	2782	3772	39
H(13B)	5228	2679	3459	39
H(14A)	5166	4117	3145	68
H(14B)	5110	4039	3981	68
H(14C)	3687	4229	3412	68
H(21A)	2884	324	1982	28
H(21B)	1508	527	2313	28
H(22A)	1385	323	792	35
H(22B)	29	424	1171	35
H(23A)	1950	-988	1359	41
H(23B)	733	-875	1827	41
H(24A)	-822	-823	535	83
H(24B)	-539	-1676	977	83
H(24C)	412	-1440	396	83
H(31A)	3332	2335	1228	28
H(31B)	2351	1671	737	28
H(32A)	4047	614	1045	34
H(32B)	4969	1181	1658	34
H(33A)	4560	1585	143	42
H(33B)	5535	2115	764	42
H(34A)	7054	879	1031	65
H(34B)	7090	1276	259	65
H(34C)	6160	459	322	65
H(41A)	1037	2657	1601	28
H(41B)	259	1864	1192	28
H(42A)	-361	1390	2296	37
H(42B)	407	2192	2701	37
H(43A)	-1978	2331	1525	40
H(43B)	-1277	3092	2015	40
H(44A)	-2762	1745	2556	65
H(44B)	-3439	2648	2366	65
H(44C)	-2125	2539	3019	65

tert.-Butylammonium-(hexaiodo)pentaargentat(I) 15

Tab. 1. Kristall- und Strukturdaten von 15.

Summenformel	C ₄ H ₉ Ag ₅ I ₆ N	
Molmasse	1374.89 g/mol	
Meßtemperatur	203(2) K	
Kristallsystem, Raumgruppe	monoklin, P2 ₁ /m (11)	
Zelldimensionen	a = 793.4(2) pm	$\alpha = 90^\circ$.
	b = 3212.0(2) pm	$\beta = 99.66(4)^\circ$.
	c = 1858.60(2) pm	$\gamma = 90^\circ$.
Volumen	4.6693(12) nm ³	
Z, Dichte (berechnet)	4, 1.850 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	6.012 mm ⁻¹	
F(000)	2212	
Kristalldimensionen	0.1 x 0.18 x 0.3 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	2.77 bis 21.99°.	
Bereich der Indizes	0<=h<=8, -33<=k<=0, -19<=l<=19	
Anzahl gemessene Reflexe	6336	
Unabhängige Reflexe	5838 [R(int) = 0.0292]	
Vollständigkeit zu Theta = 21.99°	99.6 %	
Reflexe >2sigma(I)°	4046	
Methode der Strukturverfeinerung	Kleinste Quadrateverfeinerung (Vollmatrix) an F ²	
Reflexe / festgehalten / Parameter	5838 / 0 / 110	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.703	
R-Wert [I>2sigma(I)]	R1 = 0.1296, wR2 = 0.3923	
R-Wert (alle Daten)	R1 = 0.1678, wR2 = 0.4137	
Größte und kleinste Restelektronendichte	11.613 und -2.184 · 10 ⁻⁶ e · pm ⁻³	

Tab. 2. Atomkoordinaten (x 10⁴) und equivalente isotrope Temperaturfaktoren (pm²x 10⁻¹) für 15. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten Uij Tensors.

	x	y	z	U(eq)
I(1)	1749(4)	2500	2438(2)	19(1)
I(2)	6768(4)	2500	2492(2)	22(1)
I(3)	5863(4)	2500	4685(1)	18(1)
I(4)	5284(3)	3699(1)	3180(1)	21(1)
I(5)	-320(3)	3701(1)	1777(1)	22(1)
I(6)	9043(4)	2500	255(2)	21(1)
I(7)	10701(3)	3232(1)	4225(1)	27(1)
I(8)	4282(3)	3234(1)	732(1)	32(1)
Ag(1)	8778(5)	2500	3977(2)	36(1)
Ag(2)	2981(4)	3321(1)	2038(2)	36(1)
Ag(3)	8354(4)	3310(1)	2916(2)	33(1)
Ag(4)	7692(4)	2992(1)	1285(2)	33(1)
Ag(5)	2497(6)	2500	937(2)	41(1)
Ag(6)	3652(4)	2986(1)	3644(1)	30(1)

Tab. 3. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für 15.

I(1)-Ag(6)	293.2(4)	Ag(1)-I(7)#1	279.8(3)
I(1)-Ag(6)#1	293.2(4)	Ag(1)-I(7)	279.8(3)
I(1)-Ag(5)	294.9(5)	Ag(1)-I(3)	284.6(5)
I(1)-Ag(2)#1	295.0(3)	Ag(1)-Ag(3)#1	324.8(4)
I(1)-Ag(2)	295.0(3)	Ag(1)-Ag(3)	324.8(4)
I(2)-Ag(4)	293.7(4)	I(3)-Ag(6)	284.9(4)
I(2)-Ag(4)#1	293.7(4)	I(3)-Ag(6)#1	284.9(4)
I(2)-Ag(3)#1	294.0(3)	I(4)-Ag(2)	283.2(4)
I(2)-Ag(3)	294.0(3)	I(4)-Ag(6)	283.5(3)
I(2)-Ag(1)	294.7(5)	I(4)-Ag(3)	285.2(4)

I(5)-Ag(3)#2	281.2(3)	I(8)-Ag(2)-I(4)	113.97(12)
I(5)-Ag(4)#2	283.1(4)	I(8)-Ag(2)-I(5)	110.84(12)
I(5)-Ag(2)	285.6(4)	I(4)-Ag(2)-I(5)	113.70(13)
Ag(2)-I(8)	280.5(4)	I(8)-Ag(2)-I(1)	108.38(13)
Ag(2)-Ag(6)	313.4(4)	I(4)-Ag(2)-I(1)	113.15(12)
Ag(2)-Ag(5)	331.9(4)	I(5)-Ag(2)-I(1)	95.24(11)
I(6)-Ag(5)#3	282.0(5)	I(8)-Ag(2)-Ag(6)	139.59(13)
I(6)-Ag(4)#1	282.9(3)	I(4)-Ag(2)-Ag(6)	56.47(9)
I(6)-Ag(4)	282.9(3)	I(5)-Ag(2)-Ag(6)	108.22(11)
Ag(3)-I(5)#3	281.2(3)	I(1)-Ag(2)-Ag(6)	57.53(9)
Ag(3)-I(7)	281.6(4)	I(8)-Ag(2)-Ag(5)	53.81(10)
Ag(3)-Ag(4)	315.8(4)	I(4)-Ag(2)-Ag(5)	142.74(14)
Ag(4)-I(5)#3	283.1(4)	I(5)-Ag(2)-Ag(5)	103.12(12)
Ag(4)-I(8)	283.7(4)	I(1)-Ag(2)-Ag(5)	55.74(9)
Ag(4)-Ag(4)#1	316.3(6)	Ag(6)-Ag(2)-Ag(5)	107.34(12)
I(7)-Ag(6)#3	284.9(4)	Ag(5)#3-I(6)-Ag(4)#1	98.37(12)
Ag(5)-I(8)	280.9(3)	Ag(5)#3-I(6)-Ag(4)	98.37(12)
Ag(5)-I(8)#1	280.9(3)	Ag(4)#1-I(6)-Ag(4)	67.97(14)
Ag(5)-I(6)#2	282.0(5)	I(5)#3-Ag(3)-I(7)	114.42(12)
Ag(5)-Ag(2)#1	331.9(4)	I(5)#3-Ag(3)-I(4)	111.88(12)
Ag(6)-I(7)#2	284.9(4)	I(7)-Ag(3)-I(4)	110.52(11)
Ag(6)-Ag(6)#1	312.0(6)	I(5)#3-Ag(3)-I(2)	112.97(12)
		I(7)-Ag(3)-I(2)	110.10(12)
Ag(6)-I(1)-Ag(6)#1	64.30(12)	I(4)-Ag(3)-I(2)	95.40(11)
Ag(6)-I(1)-Ag(5)	124.29(12)	I(5)#3-Ag(3)-Ag(4)	56.25(9)
Ag(6)#1-I(1)-Ag(5)	124.29(12)	I(7)-Ag(3)-Ag(4)	141.24(13)
Ag(6)-I(1)-Ag(2)#1	121.23(12)	I(4)-Ag(3)-Ag(4)	107.31(12)
Ag(6)#1-I(1)-Ag(2)#1	64.38(8)	I(2)-Ag(3)-Ag(4)	57.44(9)
Ag(5)-I(1)-Ag(2)#1	68.48(8)	I(5)#3-Ag(3)-Ag(1)	143.19(13)
Ag(6)-I(1)-Ag(2)	64.38(8)	I(7)-Ag(3)-Ag(1)	54.39(9)
Ag(6)#1-I(1)-Ag(2)	121.23(12)	I(4)-Ag(3)-Ag(1)	104.50(12)
Ag(5)-I(1)-Ag(2)	68.48(8)	I(2)-Ag(3)-Ag(1)	56.62(10)
Ag(2)#1-I(1)-Ag(2)	126.65(15)	Ag(4)-Ag(3)-Ag(1)	107.92(12)
Ag(4)-I(2)-Ag(4)#1	65.16(13)	I(6)-Ag(4)-I(5)#3	114.46(11)
Ag(4)-I(2)-Ag(3)#1	122.07(12)	I(6)-Ag(4)-I(8)	110.78(12)
Ag(4)#1-I(2)-Ag(3)#1	65.02(8)	I(5)#3-Ag(4)-I(8)	110.05(12)
Ag(4)-I(2)-Ag(3)	65.02(8)	I(6)-Ag(4)-I(2)	112.80(11)
Ag(4)#1-I(2)-Ag(3)	122.07(12)	I(5)#3-Ag(4)-I(2)	112.49(11)
Ag(3)#1-I(2)-Ag(3)	124.54(16)	I(8)-Ag(4)-I(2)	94.52(11)
Ag(4)-I(2)-Ag(1)	123.41(12)	I(6)-Ag(4)-Ag(3)	144.04(13)
Ag(4)#1-I(2)-Ag(1)	123.41(12)	I(5)#3-Ag(4)-Ag(3)	55.68(8)
Ag(3)#1-I(2)-Ag(1)	66.98(8)	I(8)-Ag(4)-Ag(3)	104.71(12)
Ag(3)-I(2)-Ag(1)	66.98(8)	I(2)-Ag(4)-Ag(3)	57.54(8)
I(7)#1-Ag(1)-I(7)	114.28(17)	I(6)-Ag(4)-Ag(4)#1	56.02(7)
I(7)#1-Ag(1)-I(3)	112.78(11)	I(5)#3-Ag(4)-Ag(4)#1	143.46(8)
I(7)-Ag(1)-I(3)	112.78(11)	I(8)-Ag(4)-Ag(4)#1	105.89(8)
I(7)#1-Ag(1)-I(2)	110.38(11)	I(2)-Ag(4)-Ag(4)#1	57.42(7)
I(7)-Ag(1)-I(2)	110.38(11)	Ag(3)-Ag(4)-Ag(4)#1	108.86(8)
I(3)-Ag(1)-I(2)	94.54(15)	Ag(1)-I(7)-Ag(3)	70.71(11)
I(7)#1-Ag(1)-Ag(3)#1	54.90(8)	Ag(1)-I(7)-Ag(6)#3	99.50(13)
I(7)-Ag(1)-Ag(3)#1	140.41(17)	Ag(3)-I(7)-Ag(6)#3	99.44(11)
I(3)-Ag(1)-Ag(3)#1	105.74(11)	I(8)-Ag(5)-I(8)#1	114.18(17)
I(2)-Ag(1)-Ag(3)#1	56.40(8)	I(8)-Ag(5)-I(6)#2	114.40(11)
I(7)#1-Ag(1)-Ag(3)	140.41(17)	I(8)#1-Ag(5)-I(6)#2	114.40(11)
I(7)-Ag(1)-Ag(3)	54.90(8)	I(8)-Ag(5)-I(1)	108.30(11)
I(3)-Ag(1)-Ag(3)	105.74(11)	I(8)#1-Ag(5)-I(1)	108.30(11)
I(2)-Ag(1)-Ag(3)	56.40(8)	I(6)#2-Ag(5)-I(1)	95.21(15)
Ag(3)#1-Ag(1)-Ag(3)	106.45(15)	I(8)-Ag(5)-Ag(2)#1	137.85(17)
Ag(1)-I(3)-Ag(6)	98.13(12)	I(8)#1-Ag(5)-Ag(2)#1	53.70(7)
Ag(1)-I(3)-Ag(6)#1	98.13(12)	I(6)#2-Ag(5)-Ag(2)#1	106.27(11)
Ag(6)-I(3)-Ag(6)#1	66.41(13)	I(1)-Ag(5)-Ag(2)#1	55.77(8)
Ag(2)-I(4)-Ag(6)	67.14(9)	I(8)-Ag(5)-Ag(2)	53.70(7)
Ag(2)-I(4)-Ag(3)	98.36(11)	I(8)#1-Ag(5)-Ag(2)	137.85(17)
Ag(6)-I(4)-Ag(3)	98.36(11)	I(6)#2-Ag(5)-Ag(2)	106.27(11)
Ag(3)#2-I(5)-Ag(4)#2	68.07(9)	I(1)-Ag(5)-Ag(2)	55.77(8)
Ag(3)#2-I(5)-Ag(2)	97.48(11)	Ag(2)#1-Ag(5)-Ag(2)	105.15(15)
Ag(4)#2-I(5)-Ag(2)	99.03(11)	I(4)-Ag(6)-I(3)	112.86(11)

I(4)-Ag(6)-I(7)#2	109.71(11)	I(4)-Ag(6)-Ag(2)	56.39(9)
I(3)-Ag(6)-I(7)#2	110.23(11)	I(3)-Ag(6)-Ag(2)	145.30(13)
I(4)-Ag(6)-I(1)	113.61(11)	I(7)#2-Ag(6)-Ag(2)	104.27(11)
I(3)-Ag(6)-I(1)	114.02(11)	I(1)-Ag(6)-Ag(2)	58.09(8)
I(7)#2-Ag(6)-I(1)	94.96(11)	Ag(6)#1-Ag(6)-Ag(2)	110.08(8)
I(4)-Ag(6)-Ag(6)#1	143.89(7)	Ag(2)-I(8)-Ag(5)	72.50(12)
I(3)-Ag(6)-Ag(6)#1	56.79(7)	Ag(2)-I(8)-Ag(4)	100.44(12)
I(7)#2-Ag(6)-Ag(6)#1	106.10(7)	Ag(5)-I(8)-Ag(4)	101.13(13)
I(1)-Ag(6)-Ag(6)#1	57.85(6)		

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

#1 x,-y+1/2,z #2 x-1,y,z #3 x+1,y,z

Tab. 4. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **15**.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
I(1)	18(2)	19(2)	20(2)	0	4(1)	0
I(2)	18(2)	23(2)	26(2)	0	6(1)	0
I(3)	16(2)	24(2)	13(2)	0	4(1)	0
I(4)	16(1)	24(1)	25(1)	3(1)	6(1)	0(1)
I(5)	15(1)	29(1)	24(1)	-2(1)	6(1)	1(1)
I(6)	16(2)	32(2)	15(2)	0	6(1)	0
I(7)	13(1)	34(2)	34(1)	9(1)	6(1)	0(1)
I(8)	15(1)	44(2)	38(2)	-17(1)	6(1)	1(1)
Ag(1)	28(2)	41(3)	37(2)	0	2(2)	0
Ag(2)	28(2)	44(2)	35(2)	7(1)	4(1)	-4(1)
Ag(3)	30(2)	32(2)	36(2)	-1(1)	5(1)	-3(1)
Ag(4)	30(2)	41(2)	31(2)	-4(1)	8(1)	-2(1)
Ag(5)	29(2)	61(3)	35(2)	0	9(2)	0
Ag(6)	31(2)	26(2)	31(2)	-1(1)	-1(1)	2(1)

Pentacäsium-bis(chloro-tetracyano-tetraargentat(I))-tetrachloroargentat(I) 16.

Tab. 1. Kristall- und Strukturdaten von 16.

Summenformel	C ₈ Ag ₉ Cl ₆ Cs ₅ N ₈	
Molmasse	2056,24 g/mol	
Meßtemperatur	203(2) K	
Kristallsystem, Raumgruppe	tetragonal, I4 ₁ /amd (141)	
Zelldimensionen	a = 2241.76(16) pm	α = 90°.
	b = 2241.76(16) pm	β = 90°.
	c = 718.82(7) pm	γ = 90°.
Volumen	3.6124(5) nm ³	
Z, Dichte (berechnet)	4, 3.781 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	10.193 mm ⁻¹	
F(000)	3616	
Kristalldimensionen	0.3 x 0.08 x 0.05 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	1.82 bis 27.51°.	
Bereich der Indizes	-29<=h<=29, -29<=k<=28, -9<=l<=9	
Anzahl gemessene Reflexe	17222	
Unabhängige Reflexe	1102 [R(int) = 0.0676]	
Vollständigkeit zu Theta = 27.51°	100.0 %	
Reflexe >2σ(I)°	837	
Methode der Strukturverfeinerung	Kleinste Quadrateverfeinerung (Vollmatrix) an F ²	
Reflexe / festgehalten / Parameter	1102 / 0 / 61	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.095	
R-Wert [I>2σ(I)]	R1 = 0.0318, wR2 = 0.0748	
R-Wert (alle Daten)	R1 = 0.0499, wR2 = 0.0806	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.999 und -1.391 10 ⁻⁶ e · pm ⁻³	

Tab. 2. Atomkoordinaten (x 10⁴) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren (pm²x 10⁻¹) für 16. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten Uij Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Ag(1)	1893(1)	3406(1)	5709(1)	43(1)
Ag(2)	0	2500	13750	24(1)
Cl(1)	2500	2500	7500	25(1)
Cl(2)	940(1)	2500	5769(4)	30(1)
Cs(1)	2427(18)	-5(15)	14000(90)	110(30)
Cs(2)	1329(1)	2500	10665(1)	25(1)
Cs(3)	2350(20)	0	15000	90(20)
N(1)	2343(3)	3402(3)	13126(8)	32(2)
C(11)	2343(3)	3402(3)	13126(8)	32(2)
C(1)	1358(3)	947(3)	9429(9)	30(2)
N(11)	1358(3)	947(3)	9429(9)	30(2)

Tab. 3. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für 16.

N(1)-C(11)#1	114.4(12)	Cs(2)-C(11)#5	351.8(7)
N(1)-N(1)#1	114.4(12)	Cs(2)-N(1)#5	351.8(7)
N(1)-Ag(1)#2	211.3(6)	Cs(2)-N(11)#5	359.3(7)
N(1)-Cs(2)	351.8(7)	Cs(2)-C(1)#5	359.3(7)
N(1)-Cs(1)#4	363(4)	Cs(2)-N(11)#14	360.4(7)
N(1)-Cs(1)#5	365(4)	Cs(2)-C(1)#14	360.4(7)
N(1)-Cs(2)#6	370.3(7)	Cs(2)-N(11)#8	360.4(7)
C(1)-N(11)#8	115.5(13)	Ag(2)-Cl(2)#14	255.8(2)
C(1)-C(1)#8	115.5(13)	Ag(2)-Cl(2)#2	255.8(2)
C(1)-Ag(1)#9	211.9(6)	Ag(2)-Cl(2)#15	255.8(2)
C(1)-Cs(2)	359.3(7)	Ag(2)-Cl(2)#9	255.8(2)
C(1)-Cs(2)#9	360.4(7)	Ag(2)-Cs(2)#3	371.43(6)
Cs(2)-Cl(1)	347.34(6)	Ag(2)-Cs(2)#16	371.44(6)

Ag(2)-Cs(2)#17	371.44(6)	C(1)#5-Cs(2)-C(1)#14	18.5(2)
Ag(1)-C(11)#18	211.3(6)	N(11)#14-Cs(2)-C(1)#14	0.0(2)
Ag(1)-N(1)#18	211.3(6)	Cl(1)-Cs(2)-N(11)#8	63.65(10)
Ag(1)-N(11)#14	211.9(6)	N(1)-Cs(2)-N(11)#8	130.97(16)
Ag(1)-C(1)#14	211.9(6)	C(11)#5-Cs(2)-N(11)#8	71.65(15)
Ag(1)-Cl(1)	276.29(7)	N(1)#5-Cs(2)-N(11)#8	71.65(15)
Cl(1)-Ag(1)#22	276.28(7)	C(1)-Cs(2)-N(11)#8	18.5(2)
Cl(1)-Ag(1)#23	276.29(7)	N(11)#5-Cs(2)-N(11)#8	133.45(4)
Cl(1)-Ag(1)#5	276.29(7)	C(1)#5-Cs(2)-N(11)#8	133.45(4)
Cl(1)-Cs(2)#23	347.35(6)	N(11)#14-Cs(2)-N(11)#8	115.2(2)
Cl(2)-Ag(2)#18	255.8(2)	C(1)#14-Cs(2)-N(11)#8	115.2(2)
Cl(2)-Cs(2)#14	372.85(17)	Cl(2)#14-Ag(2)-Cl(2)#2	108.78(6)
Cl(2)-Cs(2)#9	372.85(17)	Cl(2)#14-Ag(2)-Cl(2)#15	108.78(6)
Cl(2)-Cs(2)#18	377.2(3)	Cl(2)#2-Ag(2)-Cl(2)#15	110.86(12)
		Cl(2)#14-Ag(2)-Cl(2)#9	110.86(12)
C(11)#1-N(1)-Ag(1)#2	170.4(9)	Cl(2)#2-Ag(2)-Cl(2)#9	108.78(6)
N(1)#1-N(1)-Ag(1)#2	170.4(9)	Cl(2)#15-Ag(2)-Cl(2)#9	108.78(6)
C(11)#1-N(1)-Cs(2)	90.2(6)	Cl(2)#14-Ag(2)-Cs(2)#3	71.23(6)
N(1)#1-N(1)-Cs(2)	90.2(6)	Cl(2)#2-Ag(2)-Cs(2)#3	70.20(3)
Ag(1)#2-N(1)-Cs(2)	97.8(2)	Cl(2)#15-Ag(2)-Cs(2)#3	70.20(3)
C(11)#1-N(1)-Cs(2)#6	71.9(5)	Cl(2)#9-Ag(2)-Cs(2)#3	177.91(6)
N(1)#1-N(1)-Cs(2)#6	71.9(5)	Cl(2)#14-Ag(2)-Cs(2)#16	70.20(3)
Ag(1)#2-N(1)-Cs(2)#6	100.4(2)	Cl(2)#2-Ag(2)-Cs(2)#16	177.91(6)
Cs(2)-N(1)-Cs(2)#6	108.87(18)	Cl(2)#15-Ag(2)-Cs(2)#16	71.23(6)
N(11)#8-C(1)-Ag(1)#9	173.7(6)	Cl(2)#9-Ag(2)-Cs(2)#16	70.20(3)
C(1)#8-C(1)-Ag(1)#9	173.7(6)	Cs(2)#3-Ag(2)-Cs(2)#16	110.882(11)
N(11)#8-C(1)-Cs(2)	81.3(5)	Cl(2)#14-Ag(2)-Cs(2)#17	177.92(6)
C(1)#8-C(1)-Cs(2)	81.3(5)	Cl(2)#2-Ag(2)-Cs(2)#17	70.20(3)
Ag(1)#9-C(1)-Cs(2)	98.2(2)	Cl(2)#15-Ag(2)-Cs(2)#17	70.20(3)
C(1)#8-C(1)-Cs(2)#9	80.2(5)	Cl(2)#9-Ag(2)-Cs(2)#17	71.23(6)
Ag(1)#9-C(1)-Cs(2)#9	93.5(2)	Cs(2)#3-Ag(2)-Cs(2)#17	106.69(2)
Cs(2)-C(1)-Cs(2)#9	88.76(15)	Cs(2)#16-Ag(2)-Cs(2)#17	110.881(11)
N(11)#8-C(1)-Cs(3)#10	90.9(3)	Cl(2)#14-Ag(2)-Cs(2)	70.20(3)
Cl(1)-Cs(2)-N(1)	80.88(10)	Cl(2)#2-Ag(2)-Cs(2)	71.23(6)
Cl(1)-Cs(2)-C(11)#5	80.88(10)	Cl(2)#15-Ag(2)-Cs(2)	177.92(6)
N(1)-Cs(2)-C(11)#5	70.2(2)	Cl(2)#9-Ag(2)-Cs(2)	70.20(3)
Cl(1)-Cs(2)-N(1)#5	80.88(10)	Cs(2)#3-Ag(2)-Cs(2)	110.881(11)
N(1)-Cs(2)-N(1)#5	70.2(2)	Cs(2)#16-Ag(2)-Cs(2)	106.69(2)
C(11)#5-Cs(2)-N(1)#5	0.00(19)	Cs(2)#17-Ag(2)-Cs(2)	110.881(11)
Cl(1)-Cs(2)-C(1)	79.90(10)	C(11)#18-Ag(1)-N(1)#18	0.00(16)
N(1)-Cs(2)-C(1)	132.04(15)	C(11)#18-Ag(1)-N(11)#14	151.4(3)
C(11)#5-Cs(2)-C(1)	63.65(15)	N(1)#18-Ag(1)-N(11)#14	151.4(3)
N(1)#5-Cs(2)-C(1)	63.65(15)	C(11)#18-Ag(1)-C(1)#14	151.4(3)
Cl(1)-Cs(2)-N(11)#5	79.90(10)	N(1)#18-Ag(1)-C(1)#14	151.4(3)
N(1)-Cs(2)-N(11)#5	63.65(15)	N(11)#14-Ag(1)-C(1)#14	0.0(4)
C(11)#5-Cs(2)-N(11)#5	132.04(15)	C(11)#18-Ag(1)-Cl(1)	99.86(18)
N(1)#5-Cs(2)-N(11)#5	132.04(15)	N(1)#18-Ag(1)-Cl(1)	99.86(18)
C(1)-Cs(2)-N(11)#5	151.3(2)	N(11)#14-Ag(1)-Cl(1)	98.94(18)
Cl(1)-Cs(2)-C(1)#5	79.90(10)	C(1)#14-Ag(1)-Cl(1)	98.94(18)
N(1)-Cs(2)-C(1)#5	63.65(15)	C(11)#18-Ag(1)-Cs(2)	150.25(19)
C(11)#5-Cs(2)-C(1)#5	132.04(15)	N(1)#18-Ag(1)-Cs(2)	150.25(19)
N(1)#5-Cs(2)-C(1)#5	132.04(15)	N(11)#14-Ag(1)-Cs(2)	56.98(18)
C(1)-Cs(2)-C(1)#5	151.3(2)	C(1)#14-Ag(1)-Cs(2)	56.98(18)
N(11)#5-Cs(2)-C(1)#5	0.0(3)	Cl(1)-Ag(1)-Cs(2)	53.873(13)
Cl(1)-Cs(2)-N(11)#14	63.65(10)	Ag(1)#22-Cl(1)-Ag(1)#23	94.60(3)
N(1)-Cs(2)-N(11)#14	71.65(15)	Ag(1)#22-Cl(1)-Ag(1)	85.40(3)
C(11)#5-Cs(2)-N(11)#14	130.98(16)	Ag(1)#23-Cl(1)-Ag(1)	180.00(2)
N(1)#5-Cs(2)-N(11)#14	130.98(16)	Ag(1)#22-Cl(1)-Ag(1)#5	180.0
C(1)-Cs(2)-N(11)#14	133.45(4)	Ag(1)#23-Cl(1)-Ag(1)#5	85.40(3)
N(11)#5-Cs(2)-N(11)#14	18.5(2)	Ag(1)-Cl(1)-Ag(1)#5	94.60(3)
C(1)#5-Cs(2)-N(11)#14	18.5(2)	Ag(1)#22-Cl(1)-Cs(2)	93.850(15)
Cl(1)-Cs(2)-C(1)#14	63.65(10)	Ag(1)#23-Cl(1)-Cs(2)	93.850(15)
N(1)-Cs(2)-C(1)#14	71.65(15)	Ag(1)-Cl(1)-Cs(2)	86.150(15)
C(11)#5-Cs(2)-C(1)#14	130.98(16)	Ag(1)#5-Cl(1)-Cs(2)	86.150(15)
N(1)#5-Cs(2)-C(1)#14	130.98(16)	Ag(1)#22-Cl(1)-Cs(2)#23	86.150(15)
C(1)-Cs(2)-C(1)#14	133.45(4)	Ag(1)#23-Cl(1)-Cs(2)#23	86.149(15)
N(11)#5-Cs(2)-C(1)#14	18.5(2)	Ag(1)-Cl(1)-Cs(2)#23	93.851(15)

Ag(1)#5-Cl(1)-Cs(2)#23	93.850(15)	Cs(2)-Cl(2)-Cs(2)#9	86.37(5)
Cs(2)-Cl(1)-Cs(2)#23	180.0	Cs(2)#14-Cl(2)-Cs(2)#9	106.10(6)
Ag(2)#18-Cl(2)-Cs(2)	138.51(10)	Ag(2)#18-Cl(2)-Cs(2)#18	68.82(6)
Ag(2)#18-Cl(2)-Cs(2)#14	69.60(4)	Cs(2)-Cl(2)-Cs(2)#18	152.67(8)
Cs(2)-Cl(2)-Cs(2)#14	86.37(5)	Cs(2)#14-Cl(2)-Cs(2)#18	109.31(5)
Ag(2)#18-Cl(2)-Cs(2)#9	69.60(4)	Cs(2)#9-Cl(2)-Cs(2)#18	109.31(5)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

#1 -x+1/2,y,-z+5/2 #2 x,y,z+1 #3 -y+1/4,x+1/4,-z+11/4
 #4 y+1/4,x+1/4,z-1/4 #5 x,-y+1/2,z #6 -x+1/2,-y+1/2,-z+5/2
 #7 x,y+1/2,-z+3 #8 -y+1/4,-x+1/4,-z+7/4 #9 y-1/4,-x+1/4,-z+7/4
 #10 -x+1/2,-y,z-1/2 #11 y+1/4,x-1/4,-z+9/4 #12 y+1/4,-x+1/4,z-1/4
 #13 -y+1/4,x-1/4,z-3/4 #14 -y+1/4,x+1/4,-z+7/4
 #15 -x+0,-y+1/2,z+1 #16 -x+0,-y+1/2,z+0 #17 y-1/4,-x+1/4,-z+11/4
 #18 x,y,z-1 #19 x,y+1/2,-z+2 #20 x,-y+1/2,z-1
 #21 -y+1/4,-x+3/4,z-3/4 #22 -x+1/2,y,-z+3/2
 #23 -x+1/2,-y+1/2,-z+3/2 #24 -y+1/4,-x+1/4,-z+11/4
 #25 x,-y,-z+3 #26 -y+1/4,x-1/4,z+1/4 #27 y+1/4,x-1/4,-z+13/4 #28 -x+1/2,-y,z+1/2

Tab. 4. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **16**.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Ag(1)	42(1)	60(1)	28(1)	4(1)	12(1)	16(1)
Ag(2)	24(1)	24(1)	23(1)	0	0	0
Cl(1)	21(2)	26(2)	26(2)	0	-3(1)	0
Cl(2)	22(1)	35(1)	32(1)	0	-10(1)	0
Cs(1)	28(9)	26(19)	280(100)	-30(30)	60(20)	-14(12)
Cs(2)	24(1)	27(1)	25(1)	0	4(1)	0
Cs(3)	6(11)	70(19)	190(80)	-20(30)	0	0
N(1)	32(4)	39(4)	24(3)	1(3)	4(3)	6(3)
C(11)	32(4)	39(4)	24(3)	1(3)	4(3)	6(3)
C(1)	28(4)	31(4)	30(4)	3(3)	-2(3)	-6(3)
N(11)	28(4)	31(4)	30(4)	3(3)	-2(3)	-6(3)

Hexakis(tetraethylammonium)-(undekaiodo)hexakisargentat(I)-iodid **17**

Tab. 1. Kristall- und Strukturdaten von **17**.

Summenformel	C ₄₈ H ₈₀ Ag ₅ I ₁₂ N ₆	
Molmasse	2951.52 g/mol	
Meßtemperatur	293(2) K	
Kristallsystem, Raumgruppe	hexagonal, P6 ₃ /m (176)	
Zelldimensionen	a = 1973.54(5) pm	α = 90°.
	b = 1973.490(4) pm	β = 90°.
	c = 1222(5) pm	γ = 120°.
Volumen	4.12(2) nm ³	
Z, Dichte (berechnet)	2, 2.378 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	5.921 mm ⁻¹	
F(000)	2736	
Kristalldimensionen	0.25 x 0.35 x 0.1 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	2.05 bis 24.93°.	
Bereich der Indizes	-23<=h<=0, 0<=k<=23, 0<=l<=14	
Anzahl gemessene Reflexe	5285	
Unabhängige Reflexe	2532 [R(int) = 0.1120]	
Vollständigkeit zu Theta = 24.93°	99.8 %	
Reflexe >2σ(I)°	1122	
Methode der Strukturverfeinerung	Kleinste Quadrateverfeinerung (Vollmatrix) an F ²	
Reflexe / festgehalten / Parameter	2532 / 0 / 124	
Goodness-of-fit gegen F ²	0.913	
R-Wert [I>2σ(I)]	R1 = 0.0456, wR2 = 0.0687	
R-Wert (alle Daten)	R1 = 0.1666, wR2 = 0.0918	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.897 und -1.061 10 ⁻⁶ e · pm ⁻³	

Tab. 2. Atomkoordinaten (x 10⁴) und equivalente isotrope Temperaturfaktoren (pm²x 10⁻¹) für **17**.
U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten Uij Tensors.

	x	y	z	U(eq)
I(1)	4424(1)	6220(1)	2500	44(1)
I(2)	0	0	5000	50(1)
I(3)	2613(1)	4062(1)	4733(1)	59(1)
I(4)	3333	6667	5421(1)	50(1)
Ag(1)	2988(1)	5459(1)	3814(1)	72(1)
N(1)	7670(7)	8163(8)	2500	41(4)
N(2)	3762(7)	9056(7)	7500	34(3)
C(111)	7684(9)	8927(9)	2500	39(4)
C(112)	8496(10)	9652(10)	2500	60(6)
C(121)	8088(7)	8077(7)	3508(9)	47(3)
C(122)	7753(7)	8126(7)	4584(10)	56(4)
C(131)	6826(10)	7539(9)	2500	51(5)
C(132)	6652(10)	6712(10)	2500	53(5)
C(211)	3903(11)	8387(10)	7500	60(5)
C(212)	4710(12)	8544(14)	7500	91(8)
C(221)	4130(7)	9576(7)	6522(9)	63(4)
C(222)	3868(8)	9170(8)	5448(11)	79(5)
C(231)	2893(11)	8711(11)	7500	65(6)
C(232)	2608(13)	9296(13)	7500	100(8)

Tab. 3. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **17**.

I(1)-Ag(1)#1	293.5(4)	I(4)-Ag(1)#4	289.4(6)
I(1)-Ag(1)	293.5(4)	I(4)-Ag(1)	289.4(6)
I(1)-Ag(1)#2	295.1(4)	I(4)-Ag(1)#2	289.4(6)
I(1)-Ag(1)#3	295.1(4)	Ag(1)-I(1)#4	295.1(4)
I(3)-Ag(1)	271.5(2)	Ag(1)-Ag(1)#1	321.3(13)

N(1)-C(111)	149.4(19)	Ag(1)-I(1)-Ag(1)#2	77.46(12)
N(1)-C(131)	149.7(19)	Ag(1)#1-I(1)-Ag(1)#3	77.46(12)
N(1)-C(121)	153.9(13)	Ag(1)-I(1)-Ag(1)#3	112.26(11)
N(1)-C(121)#1	153.9(13)	Ag(1)#2-I(1)-Ag(1)#3	66.0(2)
N(2)-C(211)	147.8(19)	Ag(1)#4-I(4)-Ag(1)	79.03(18)
N(2)-C(231)	150(2)	Ag(1)#4-I(4)-Ag(1)#2	79.03(18)
N(2)-C(221)#5	150.5(13)	Ag(1)-I(4)-Ag(1)#2	79.03(18)
N(2)-C(221)	150.5(13)	I(3)-Ag(1)-I(4)	112.8(2)
C(111)-C(112)	152(2)	I(3)-Ag(1)-I(1)	116.70(8)
C(121)-C(122)	149.8(15)	I(4)-Ag(1)-I(1)	100.37(15)
C(131)-C(132)	149(2)	I(3)-Ag(1)-I(1)#4	118.77(8)
C(211)-C(212)	146(2)	I(4)-Ag(1)-I(1)#4	100.00(15)
C(221)-C(222)	149.0(16)	I(1)-Ag(1)-I(1)#4	105.40(19)
C(231)-C(232)	152(2)	I(3)-Ag(1)-Ag(1)#1	114.44(9)
		I(4)-Ag(1)-Ag(1)#1	132.72(12)
Ag(1)#1-I(1)-Ag(1)	66.4(2)	I(1)-Ag(1)-Ag(1)#1	56.82(11)
Ag(1)#1-I(1)-Ag(1)#2	112.26(11)	I(1)#4-Ag(1)-Ag(1)#1	57.02(11)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

#1 x,y,-z+1/2 #2 -y+1,x-y+1,z #3 -y+1,x-y+1,-z+1/2 #4 -x+y,-x+1,z #5 x,y,-z+3/2

Tab. 4. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für 17.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
I(1)	43(1)	47(1)	42(1)	0	0	23(1)
I(2)	52(1)	52(1)	44(1)	0	0	26(1)
I(3)	65(1)	52(1)	59(1)	2(1)	-6(1)	29(1)
I(4)	51(1)	51(1)	48(1)	0	0	26(1)
Ag(1)	81(1)	62(1)	70(1)	12(1)	6(1)	35(1)
N(1)	32(9)	48(9)	50(10)	0	0	26(8)
N(2)	41(9)	28(8)	28(8)	0	0	14(7)
C(111)	47(11)	55(12)	27(10)	0	0	35(10)
C(112)	76(15)	65(14)	34(12)	0	0	29(13)
C(121)	52(8)	56(8)	50(8)	-4(7)	-9(7)	39(7)
C(122)	61(9)	80(10)	45(8)	-7(8)	-7(8)	49(8)
C(131)	40(12)	49(12)	60(13)	0	0	20(10)
C(132)	50(12)	59(13)	42(13)	0	0	20(11)
C(211)	82(16)	46(13)	50(12)	0	0	31(12)
C(212)	83(17)	160(20)	77(16)	0	0	97(18)
C(221)	72(9)	43(8)	48(9)	5(7)	-10(8)	10(7)
C(222)	95(12)	93(12)	39(9)	-10(9)	-4(9)	40(10)
C(231)	59(14)	76(15)	75(15)	0	0	45(12)

Tab. 5. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für 17.

	x	y	z	U(eq)
H(11A)	7403	8946	3140	46
H(11B)	7403	8946	1860	46
H(11C)	8448	10113	2500	91
H(11D)	8776	9650	1859	91
H(11E)	8776	9650	3141	91
H(12A)	8068	7576	3466	57
H(12B)	8634	8482	3482	57
H(12C)	8055	8085	5168	84
H(12D)	7221	7707	4639	84
H(12E)	7766	8619	4635	84
H(13A)	6580	7615	3139	61
H(13B)	6580	7615	1861	61
H(13C)	6096	6366	2500	80

H(13D)	6874	6618	3141	80
H(13E)	6874	6618	1859	80
H(21A)	3644	8070	8138	72
H(21B)	3644	8070	6862	72
H(21C)	4710	8058	7500	136
H(21D)	4974	8839	8141	136
H(21E)	4974	8839	6859	136
H(22A)	4012	9997	6545	75
H(22B)	4694	9809	6573	75
H(22C)	4129	9537	4867	118
H(22D)	3313	8951	5376	118
H(22E)	3993	8758	5407	118
H(23A)	2682	8379	8140	78
H(23B)	2682	8379	6860	78
H(23C)	2047	9022	7500	150
H(23D)	2799	9618	6859	150
H(23E)	2799	9618	8141	150

Pentakis(tetraethylammonium)-(undekabromo)hexaargentat(I) 18

Tab. 1. Kristall- und Strukturdaten von 18.

Summenformel	C ₄₀ H ₁₀₀ Ag ₆ Br ₁₁ N ₅	
Molmasse	2177,48 g/mol	
Meßtemperatur	203(2) K	
Kristallsystem, Raumgruppe	monoklin, P2 ₁ /m (11)	
Zelldimensionen	a = 1463.18(10) pm	α = 90°.
	b = 1202.25(8) pm	β = 96.315(2)°.
	c = 1868.56(12) pm	γ = 90°.
Volumen	3.2671(4) nm ³	
Z, Dichte (berechnet)	2, 2.213 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	8.520 mm ⁻¹	
F(000)	2084	
Kristalldimensionen	0.3 x 0.15 x 0.2 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	1.40 bis 25.35°.	
Bereich der Indizes	-17<=h<=17, -14<=k<=14, -22<=l<=22	
Anzahl gemessene Reflexe	28352	
Unabhängige Reflexe	6258 [R(int) = 0.0580]	
Vollständigkeit zu Theta = 25.35°	99.4 %	
Reflexe >2σ(I)°	5076	
Methode der Strukturverfeinerung	Kleinste Quadrateverfeinerung (Vollmatrix) an F ²	
Reflexe / festgehalten / Parameter	6258 / 0 / 322	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.075	
R-Wert [I>2σ(I)]	R1 = 0.0499, wR2 = 0.1401	
R-Wert (alle Daten)	R1 = 0.0625, wR2 = 0.1483	
Größte und kleinste Restelektronendichte	1.157 und -1.598 10 ⁻⁶ e · pm ⁻³	

Tab. 2. Atomkoordinaten (x 10⁴) und equivalente isotrope Temperaturfaktoren (pm²x 10⁻¹) für 18. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten Uij Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Br(1)	1823(1)	7500	1554(1)	37(1)
Br(2)	3654(1)	7500	3398(1)	42(1)
Br(3)	715(1)	7500	3609(1)	40(1)
Br(4)	2035(1)	4742(1)	2858(1)	43(1)
Br(5)	-799(1)	5237(1)	1750(1)	70(1)
Br(6)	2709(1)	5340(1)	5230(1)	62(1)
Br(7)	4453(1)	5139(1)	1580(1)	71(1)
Ag(1)	3221(1)	6122(1)	2206(1)	59(1)
Ag(2)	645(1)	6177(1)	2374(1)	61(1)
Ag(3)	2313(1)	6197(1)	3998(1)	66(1)
N(1)	4777(5)	2500	3945(4)	30(2)
N(2)	1512(5)	2500	664(4)	31(2)
N(3)	6679(6)	2500	502(4)	33(2)
N(4)	9742(6)	2500	3849(4)	33(2)
N(5)	7078(6)	7500	2640(5)	38(2)
C(111)	5665(7)	2500	3594(6)	36(2)
C(121)	5072(8)	2500	4766(6)	42(2)
C(112)	5537(9)	2500	2794(6)	50(3)
C(211)	2554(7)	2500	852(6)	40(2)
C(212)	2914(8)	2500	1643(7)	50(3)
C(511)	8050(8)	7500	3045(6)	45(3)
C(231)	1312(8)	2500	-139(5)	38(2)
C(521)	7229(9)	7500	1840(6)	47(3)
C(531)	6528(6)	6489(7)	2835(5)	49(2)
C(421)	10695(8)	2500	3638(6)	46(3)
C(131)	4208(6)	3508(7)	3723(5)	50(2)
C(411)	9563(6)	3507(6)	4302(4)	47(2)
C(311)	5827(8)	2500	893(7)	48(3)
C(221)	1097(5)	3516(6)	996(4)	41(2)
C(512)	8066(10)	7500	3843(7)	60(3)

C(321)	6711(7)	3500(7)	36(4)	51(2)
C(431)	9099(8)	2500	3152(6)	44(3)
C(122)	4273(10)	2500	5219(7)	60(3)
C(331)	7487(9)	2500	1085(7)	56(3)
C(532)	6944(7)	5382(7)	2678(6)	61(2)
C(222)	1389(7)	4614(7)	709(5)	55(2)
C(232)	318(9)	2500	-425(7)	59(3)
C(322)	6664(8)	4617(7)	413(5)	62(2)
C(522)	6347(10)	7500	1327(7)	61(3)
C(132)	4669(6)	4616(7)	3881(5)	57(2)
C(412)	9702(7)	4617(7)	3951(5)	60(2)
C(432)	8082(10)	2500	3244(9)	69(4)
C(422)	11464(10)	2500	4264(9)	70(4)
C(332)	8447(10)	2500	806(11)	90(6)
C(312)	4932(9)	2500	397(9)	75(4)

Tab. 3. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **18**.

Br(1)-Ag(1)#1	280.45(11)	C(521)-C(522)	152.0(18)
Br(1)-Ag(1)	280.45(11)	C(531)-C(532)	150.5(12)
Br(1)-Ag(2)#1	290.28(12)	C(421)-C(422)	153.1(18)
Br(1)-Ag(2)	290.29(12)	C(131)-C(132)	150.8(13)
Br(2)-Ag(1)#1	279.16(11)	C(411)-C(412)	151.0(12)
Br(2)-Ag(1)	279.16(11)	C(311)-C(312)	151.9(19)
Br(2)-Ag(3)#1	283.65(13)	C(221)-C(222)	150.4(11)
Br(2)-Ag(3)	283.65(13)	C(321)-C(322)	152.1(12)
Br(3)-Ag(2)	279.50(11)	C(431)-C(432)	151.5(19)
Br(3)-Ag(2)#1	279.50(11)	C(331)-C(332)	155(2)
Br(3)-Ag(3)#1	284.09(12)		
Br(3)-Ag(3)	284.09(12)	Ag(1)#1-Br(1)-Ag(1)	72.41(4)
Br(4)-Ag(2)	274.25(11)	Ag(1)#1-Br(1)-Ag(2)#1	83.93(3)
Br(4)-Ag(3)	275.20(11)	Ag(1)-Br(1)-Ag(2)#1	122.78(4)
Br(4)-Ag(1)	277.75(11)	Ag(1)#1-Br(1)-Ag(2)	122.78(4)
Br(5)-Ag(2)	256.19(13)	Ag(1)-Br(1)-Ag(2)	83.93(3)
Br(6)-Ag(3)	253.10(12)	Ag(2)#1-Br(1)-Ag(2)	66.43(4)
Br(7)-Ag(1)	254.52(13)	Ag(1)#1-Br(2)-Ag(1)	72.80(4)
Ag(1)-Ag(1)#1	331.31(15)	Ag(1)#1-Br(2)-Ag(3)#1	83.19(3)
Ag(2)-Ag(2)#1	318.05(15)	Ag(1)-Br(2)-Ag(3)#1	122.47(5)
Ag(3)-Ag(3)#1	313.31(16)	Ag(1)#1-Br(2)-Ag(3)	122.47(5)
N(1)-C(131)#2	150.2(9)	Ag(1)-Br(2)-Ag(3)	83.19(3)
N(1)-C(131)	150.2(9)	Ag(3)#1-Br(2)-Ag(3)	67.05(4)
N(1)-C(111)	151.9(13)	Ag(2)-Br(3)-Ag(2)#1	69.35(4)
N(1)-C(121)	154.7(13)	Ag(2)-Br(3)-Ag(3)#1	118.62(4)
N(2)-C(231)	149.8(13)	Ag(2)#1-Br(3)-Ag(3)#1	81.46(3)
N(2)-C(221)#2	152.5(8)	Ag(2)-Br(3)-Ag(3)	81.47(3)
N(2)-C(221)	152.5(8)	Ag(2)#1-Br(3)-Ag(3)	118.62(4)
N(2)-C(211)	152.6(13)	Ag(3)#1-Br(3)-Ag(3)	66.93(4)
N(3)-C(321)	149.0(9)	Ag(2)-Br(4)-Ag(3)	84.04(3)
N(3)-C(321)#2	149.0(9)	Ag(2)-Br(4)-Ag(1)	87.50(3)
N(3)-C(311)	151.3(13)	Ag(3)-Br(4)-Ag(1)	85.02(3)
N(3)-C(331)	151.7(14)	Br(7)-Ag(1)-Br(4)	115.62(4)
N(4)-C(421)	149.0(14)	Br(7)-Ag(1)-Br(2)	122.18(5)
N(4)-C(411)#2	151.7(8)	Br(4)-Ag(1)-Br(2)	95.90(3)
N(4)-C(411)	151.7(8)	Br(7)-Ag(1)-Br(1)	126.45(4)
N(4)-C(431)	152.0(14)	Br(4)-Ag(1)-Br(1)	94.69(3)
N(5)-C(531)#1	152.3(9)	Br(2)-Ag(1)-Br(1)	94.96(3)
N(5)-C(531)	152.3(9)	Br(7)-Ag(1)-Ag(1)#1	117.67(3)
N(5)-C(521)	153.6(14)	Br(4)-Ag(1)-Ag(1)#1	126.68(2)
N(5)-C(511)	153.6(15)	Br(2)-Ag(1)-Ag(1)#1	53.60(2)
C(111)-C(112)	148.6(15)	Br(1)-Ag(1)-Ag(1)#1	53.79(2)
C(121)-C(122)	151.6(16)	Br(5)-Ag(2)-Br(4)	114.62(4)
C(211)-C(212)	151.2(16)	Br(5)-Ag(2)-Br(3)	125.49(5)
C(511)-C(512)	148.9(17)	Br(4)-Ag(2)-Br(3)	97.33(3)
C(231)-C(232)	149.3(17)	Br(5)-Ag(2)-Br(1)	120.62(4)

Br(4)-Ag(2)-Br(1)	93.26(3)	Br(4)-Ag(3)-Br(2)	95.45(3)
Br(3)-Ag(2)-Br(1)	98.86(3)	Br(6)-Ag(3)-Br(3)	123.82(4)
Br(5)-Ag(2)-Ag(2)#1	116.20(3)	Br(4)-Ag(3)-Br(3)	96.04(3)
Br(4)-Ag(2)-Ag(2)#1	128.99(2)	Br(2)-Ag(3)-Br(3)	100.37(3)
Br(3)-Ag(2)-Ag(2)#1	55.32(2)	Br(6)-Ag(3)-Ag(3)#1	114.02(3)
Br(1)-Ag(2)-Ag(2)#1	56.782(19)	Br(4)-Ag(3)-Ag(3)#1	129.46(2)
Br(6)-Ag(3)-Br(4)	116.44(4)	Br(2)-Ag(3)-Ag(3)#1	56.48(2)
Br(6)-Ag(3)-Br(2)	119.02(5)	Br(3)-Ag(3)-Ag(3)#1	56.54(2)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

#1 x,-y+3/2,z #2 x,-y+1/2,z

Tab. 4. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **18**.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Br(1)	37(1)	35(1)	37(1)	0	2(1)	0
Br(2)	50(1)	35(1)	41(1)	0	0(1)	0
Br(3)	41(1)	39(1)	40(1)	0	4(1)	0
Br(4)	44(1)	41(1)	43(1)	1(1)	5(1)	-1(1)
Br(5)	60(1)	73(1)	78(1)	-7(1)	7(1)	-2(1)
Br(6)	66(1)	64(1)	55(1)	4(1)	7(1)	5(1)
Br(7)	69(1)	71(1)	75(1)	2(1)	14(1)	9(1)
Ag(1)	56(1)	61(1)	62(1)	-6(1)	16(1)	9(1)
Ag(2)	56(1)	62(1)	63(1)	-5(1)	-6(1)	-4(1)
Ag(3)	80(1)	67(1)	50(1)	8(1)	1(1)	3(1)
N(1)	24(4)	34(4)	32(4)	0	-1(3)	0
N(2)	28(4)	32(4)	34(4)	0	10(3)	0
N(3)	34(5)	38(4)	27(4)	0	9(3)	0
N(4)	43(5)	27(4)	29(4)	0	6(4)	0
N(5)	40(5)	35(4)	39(5)	0	14(4)	0
C(111)	32(5)	36(5)	40(6)	0	-4(4)	0
C(121)	40(6)	49(6)	34(5)	0	0(4)	0
C(112)	56(7)	55(7)	41(6)	0	14(5)	0
C(211)	27(5)	49(6)	43(6)	0	5(4)	0
C(212)	34(6)	60(7)	52(7)	0	-6(5)	0
C(511)	43(6)	41(6)	51(7)	0	7(5)	0
C(231)	47(6)	40(6)	28(5)	0	6(4)	0
C(521)	61(8)	41(6)	39(6)	0	11(5)	0
C(531)	48(5)	46(5)	55(5)	5(4)	17(4)	-7(4)
C(421)	37(6)	53(7)	50(7)	0	15(5)	0
C(131)	35(4)	60(5)	54(5)	9(4)	-1(4)	13(4)
C(411)	61(5)	36(4)	44(4)	-10(3)	10(4)	6(4)
C(311)	43(6)	54(7)	49(7)	0	15(5)	0
C(221)	40(4)	40(4)	42(4)	-5(3)	5(3)	4(3)
C(512)	61(8)	62(8)	55(8)	0	-2(6)	0
C(321)	65(6)	47(5)	42(4)	10(4)	15(4)	2(4)
C(431)	48(7)	46(6)	37(6)	0	0(5)	0
C(122)	67(9)	75(9)	40(7)	0	15(6)	0
C(331)	50(7)	64(8)	49(7)	0	-8(6)	0
C(532)	71(6)	44(5)	71(6)	0(4)	14(5)	-9(4)
C(222)	64(6)	34(4)	70(6)	-8(4)	10(5)	2(4)
C(232)	60(8)	63(8)	52(7)	0	-10(6)	0
C(322)	85(7)	39(5)	65(6)	4(4)	19(5)	0(4)
C(522)	75(9)	62(8)	46(7)	0	1(6)	0
C(132)	58(6)	42(5)	70(6)	2(4)	5(5)	9(4)
C(412)	82(7)	35(4)	66(6)	-5(4)	18(5)	-1(4)
C(432)	56(9)	66(9)	80(10)	0	-18(7)	0
C(422)	51(8)	79(10)	78(10)	0	-4(7)	0
C(332)	41(8)	77(10)	143(17)	0	-26(9)	0
C(312)	39(7)	84(11)	100(12)	0	-4(7)	0

Tab. 5. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **18**.

	x	y	z	U(eq)
H(11A)	6021	3151	3757	44
H(11B)	6021	1849	3757	44
H(12A)	5448	1849	4888	50
H(12B)	5448	3151	4888	50
H(11C)	6127	2500	2614	75
H(11D)	5200	3152	2626	75
H(11E)	5200	1848	2626	75
H(21A)	2799	1850	632	48
H(21B)	2799	3150	632	48
H(21C)	3574	2500	1693	74
H(21D)	2698	1848	1869	74
H(21E)	2698	3152	1869	74
H(51A)	8377	6849	2902	54
H(51B)	8377	8151	2902	54
H(23A)	1599	3150	-325	46
H(23B)	1599	1850	-325	46
H(52A)	7587	8151	1743	56
H(52B)	7587	6849	1743	56
H(53A)	6458	6523	3345	59
H(53B)	5919	6532	2574	59
H(42A)	10769	3151	3343	55
H(42B)	10769	1849	3343	55
H(13A)	3653	3484	3963	60
H(13B)	4022	3462	3209	60
H(41A)	8935	3470	4421	56
H(41B)	9966	3470	4749	56
H(31A)	5840	3151	1201	57
H(31B)	5840	1849	1201	57
H(22A)	432	3463	912	49
H(22B)	1266	3501	1512	49
H(51C)	8692	7500	4061	90
H(51D)	7758	6848	3991	90
H(51E)	7758	8152	3991	90
H(32A)	6203	3458	-344	61
H(32B)	7275	3475	-192	61
H(43A)	9231	3151	2875	52
H(43B)	9231	1849	2875	52
H(12C)	4504	2500	5720	89
H(12D)	3905	1848	5111	89
H(12E)	3905	3152	5111	89
H(33A)	7441	1849	1386	67
H(33B)	7441	3151	1386	67
H(53C)	6552	4795	2813	92
H(53D)	7538	5316	2948	92
H(53E)	7005	5330	2173	92
H(22C)	1097	5208	941	83
H(22D)	1213	4646	199	83
H(22E)	2044	4688	803	83
H(23C)	261	2500	-942	89
H(23D)	27	3152	-258	89
H(23E)	27	1848	-258	89
H(32C)	6693	5206	69	93
H(32D)	7171	4681	782	93
H(32E)	6097	4668	625	93
H(52C)	6496	7500	839	92
H(52D)	5995	8152	1409	92
H(52E)	5995	6848	1409	92
H(13C)	4252	5204	3719	85
H(13D)	5210	4664	3634	85
H(13E)	4839	4687	4390	85
H(41C)	9584	5205	4277	91
H(41D)	9286	4681	3518	91
H(41E)	10324	4671	3836	91

H(43C)	7730	2500	2779	104
H(43D)	7936	3152	3505	104
H(43E)	7936	1848	3505	104
H(42C)	12050	2500	4077	105
H(42D)	11413	1848	4553	105
H(42E)	11413	3152	4553	105
H(33C)	8917	2500	1208	134
H(33D)	8510	3152	519	134
H(33E)	8510	1848	519	134
H(31C)	4423	2500	679	113
H(31D)	4905	1848	99	113
H(31E)	4905	3152	99	113

Bis(triphenylphosphoranyliden)ammonium-dicyanoargentat(I)-acetonitrilsolvat **19**

Tab. 1. Kristall- und Strukturdaten von **19**.

Summenformel	C ₄₀ H ₃₃ Ag N ₄ P ₂	
Molmasse	739.51 g/mol	
Meßtemperatur	203(2) K	
Kristallsystem, Raumgruppe	monoklin, P2 ₁ /n (14)	
Zelldimensionen	a = 954.97(6) pm	$\alpha = 90^\circ$.
	b = 2010.45(12) pm	$\beta = 102.6960(10)^\circ$.
	c = 1913.01(12) pm	$\gamma = 90^\circ$.
Volumen	3.5830(4) nm ³	
Z, Dichte (berechnet)	4, 1.371 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	0.685 mm ⁻¹	
F(000)	1512	
Kristalldimensionen	0.2 x 0.3 x 0.2 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	1.49 bis 30.03°	
Bereich der Indizes	-13<=h<=13, -27<=k<=28, -26<=l<=26	
Anzahl gemessene Reflexe	41257	
Unabhängige Reflexe	10415 [R(int) = 0.0303]	
Vollständigkeit zu Theta = 30.03°	99.2 %	
Reflexe >2sigma(I)°	7285	
Methode der Strukturverfeinerung	Kleinste Quadrateverfeinerung (Vollmatrix) an F ²	
Reflexe / festgehalten / Parameter	10415 / 0 / 416	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.067	
R-Wert [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0342, wR2 = 0.0814	
R-Wert (alle Daten)	R1 = 0.0594, wR2 = 0.0901	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.645 und -0.399 10 ⁻⁶ e · pm ⁻³	

Tab. 2. Atomkoordinaten (x 10⁴) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren (pm²x 10⁻¹) für **19**.
U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten Uij Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Ag(1)	9808(1)	8156(1)	8443(1)	42(1)
C(1)	10373(2)	9150(1)	8569(1)	42(1)
N(1)	10656(3)	9677(1)	8646(1)	59(1)
C(2)	9019(2)	7199(1)	8381(1)	43(1)
N(2)	8511(2)	6698(1)	8363(1)	57(1)
P(1)	4255(1)	6816(1)	-494(1)	20(1)
P(2)	3044(1)	6956(1)	772(1)	22(1)
N(3)	3032(2)	6898(1)	-57(1)	24(1)
C(131)	4626(2)	7599(1)	-872(1)	24(1)
C(111)	5900(2)	6475(1)	21(1)	23(1)
C(221)	1797(2)	7596(1)	888(1)	26(1)
C(231)	4740(2)	7189(1)	1335(1)	27(1)
C(136)	3900(2)	8172(1)	-741(1)	30(1)
C(121)	3640(2)	6253(1)	-1227(1)	22(1)
C(116)	7172(2)	6832(1)	225(1)	32(1)
C(216)	2512(2)	6096(1)	1823(1)	33(1)
C(113)	7024(2)	5541(1)	723(1)	31(1)
C(122)	2172(2)	6171(1)	-1495(1)	26(1)
C(126)	4620(2)	5922(1)	-1548(1)	27(1)
C(211)	2500(2)	6178(1)	1100(1)	25(1)
C(236)	5215(2)	7836(1)	1263(1)	35(1)
C(112)	5838(2)	5825(1)	275(1)	26(1)
C(124)	2663(2)	5430(1)	-2398(1)	34(1)
C(212)	2112(2)	5646(1)	629(1)	31(1)
C(135)	4145(2)	8773(1)	-1050(1)	38(1)
C(123)	1685(2)	5759(1)	-2085(1)	32(1)
C(233)	6970(2)	6957(1)	2171(1)	47(1)
C(132)	5599(2)	7633(1)	-1319(1)	33(1)
C(133)	5826(2)	8236(1)	-1627(1)	43(1)
C(232)	5627(2)	6744(1)	1790(1)	34(1)

C(235)	6551(3)	8040(1)	1635(1)	46(1)
C(114)	8280(2)	5904(1)	922(1)	37(1)
C(234)	7418(2)	7602(1)	2088(1)	53(1)
C(226)	719(2)	7787(1)	308(1)	34(1)
C(214)	1837(2)	4956(1)	1620(1)	42(1)
C(215)	2192(2)	5484(1)	2080(1)	40(1)
C(115)	8355(2)	6546(1)	676(1)	41(1)
C(125)	4120(2)	5507(1)	-2135(1)	32(1)
C(213)	1789(2)	5033(1)	897(1)	41(1)
C(225)	-247(3)	8285(1)	392(1)	48(1)
C(222)	1899(2)	7899(1)	1551(1)	39(1)
C(134)	5110(2)	8803(1)	-1492(1)	40(1)
C(223)	934(3)	8394(1)	1632(1)	51(1)
C(224)	-142(2)	8587(1)	1047(1)	52(1)
C(41)	6431(2)	316(1)	9265(1)	103(1)
N(4)	5344(2)	524(1)	9056(1)	200(3)
C(42)	7805(2)	29(1)	9600(1)	113(2)

Tab. 3. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **19**.

Ag(1)-C(2)	206.0(3)	P(2)-C(221)	180.09(18)
Ag(1)-C(1)	207.0(3)	P(2)-C(211)	180.42(17)
N(2)-C(2)	111.5(3)	C(41)-N(4)	110.87
C(1)-N(1)	109.6(3)	C(41)-C(42)	144.76
P(1)-N(3)	158.71(15)		
P(1)-C(111)	179.66(17)	C(2)-Ag(1)-C(1)	172.27(9)
P(1)-C(121)	179.93(17)	N(2)-C(2)-Ag(1)	175.1(2)
P(1)-C(131)	180.00(17)	N(1)-C(1)-Ag(1)	178.5(2)
P(2)-N(3)	158.70(14)	P(1)-N(3)-P(2)	133.56(10)
P(2)-C(231)	179.92(19)	N(4)-C(41)-C(42)	174.5

Tab. 4. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **19**.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Ag(1)	43(1)	43(1)	37(1)	3(1)	3(1)	4(1)
C(1)	44(1)	54(2)	27(1)	5(1)	8(1)	1(1)
N(1)	80(2)	56(1)	41(1)	6(1)	16(1)	5(1)
C(2)	34(1)	48(1)	43(1)	1(1)	3(1)	13(1)
N(2)	47(1)	47(1)	74(2)	-3(1)	9(1)	12(1)
P(1)	19(1)	20(1)	21(1)	0(1)	6(1)	1(1)
P(2)	22(1)	22(1)	21(1)	-1(1)	7(1)	1(1)
N(3)	22(1)	29(1)	22(1)	0(1)	8(1)	1(1)
C(131)	22(1)	23(1)	25(1)	1(1)	5(1)	-2(1)
C(111)	21(1)	25(1)	23(1)	-1(1)	6(1)	2(1)
C(221)	29(1)	22(1)	32(1)	1(1)	14(1)	1(1)
C(231)	25(1)	32(1)	25(1)	-6(1)	8(1)	-2(1)
C(136)	32(1)	27(1)	34(1)	0(1)	11(1)	2(1)
C(121)	24(1)	21(1)	21(1)	2(1)	6(1)	0(1)
C(116)	27(1)	31(1)	38(1)	5(1)	7(1)	-3(1)
C(216)	36(1)	37(1)	30(1)	2(1)	12(1)	-1(1)
C(113)	34(1)	28(1)	31(1)	3(1)	5(1)	6(1)
C(122)	25(1)	28(1)	26(1)	3(1)	7(1)	2(1)
C(126)	25(1)	30(1)	26(1)	-2(1)	7(1)	1(1)
C(211)	22(1)	25(1)	29(1)	2(1)	10(1)	2(1)
C(236)	34(1)	34(1)	37(1)	-10(1)	7(1)	-4(1)
C(112)	26(1)	24(1)	28(1)	-2(1)	6(1)	1(1)
C(124)	44(1)	31(1)	25(1)	-4(1)	4(1)	-6(1)
C(212)	32(1)	29(1)	36(1)	-2(1)	14(1)	-2(1)
C(135)	43(1)	24(1)	47(1)	1(1)	11(1)	2(1)

C(123)	28(1)	34(1)	31(1)	2(1)	0(1)	-4(1)
C(233)	31(1)	78(2)	29(1)	1(1)	3(1)	7(1)
C(132)	33(1)	30(1)	42(1)	5(1)	18(1)	4(1)
C(133)	39(1)	41(1)	54(1)	12(1)	25(1)	-3(1)
C(232)	29(1)	47(1)	27(1)	2(1)	8(1)	3(1)
C(235)	41(1)	49(1)	50(1)	-21(1)	11(1)	-14(1)
C(114)	27(1)	45(1)	37(1)	7(1)	2(1)	10(1)
C(234)	32(1)	84(2)	40(1)	-22(1)	3(1)	-15(1)
C(226)	37(1)	32(1)	37(1)	7(1)	16(1)	8(1)
C(214)	34(1)	30(1)	68(2)	17(1)	26(1)	6(1)
C(215)	36(1)	46(1)	41(1)	16(1)	17(1)	4(1)
C(115)	21(1)	50(1)	49(1)	6(1)	2(1)	-4(1)
C(125)	39(1)	33(1)	28(1)	-5(1)	12(1)	2(1)
C(213)	40(1)	26(1)	63(1)	-7(1)	25(1)	-3(1)
C(225)	46(1)	42(1)	59(2)	16(1)	22(1)	20(1)
C(222)	42(1)	38(1)	38(1)	-9(1)	16(1)	4(1)
C(134)	41(1)	30(1)	51(1)	11(1)	10(1)	-8(1)
C(223)	59(2)	43(1)	59(2)	-15(1)	32(1)	6(1)
C(224)	54(2)	36(1)	77(2)	2(1)	36(1)	17(1)
C(41)	129(3)	42(2)	106(3)	-10(2)	-42(2)	2(2)
N(4)	192(5)	51(2)	277(6)	-2(3)	-121(4)	20(2)
C(42)	97(3)	147(4)	82(3)	-19(3)	-10(2)	22(3)

Tab. 5. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **19**.

	x	y	z	U(eq)
H(136)	3247	8150	-445	37
H(116)	7229	7263	58	38
H(216)	2737	6454	2135	40
H(113)	6977	5108	889	37
H(122)	1518	6390	-1281	32
H(126)	5600	5977	-1372	32
H(236)	4625	8134	962	42
H(112)	4992	5583	143	32
H(124)	2335	5154	-2790	40
H(212)	2069	5699	142	37
H(135)	3662	9154	-959	45
H(123)	706	5706	-2267	38
H(233)	7564	6667	2480	56
H(132)	6090	7254	-1409	40
H(133)	6469	8259	-1928	51
H(232)	5325	6309	1839	41
H(235)	6865	8470	1580	56
H(114)	9078	5714	1223	45
H(234)	8316	7741	2341	63
H(226)	642	7582	-134	41
H(214)	1628	4545	1796	50
H(215)	2216	5431	2565	48
H(115)	9202	6788	813	49
H(125)	4769	5283	-2349	39
H(213)	1539	4674	588	49
H(225)	-966	8413	4	57
H(222)	2615	7770	1940	46
H(134)	5277	9205	-1700	49
H(223)	1003	8597	2075	61
H(224)	-787	8920	1100	63
H(42A)	8164	240	10054	170
H(42B)	8471	96	9297	170
H(42C)	7691	-438	9671	170

Pentacäsium-tetrakis(dicyanoargentat(I))-iodid **20**.

Tab. 1. Kristall- und Strukturdaten von **20**.

Summenformel	C ₈ Ag ₄ Cs ₅ I N ₈	
Molmasse	1439.07 g/mol	
Meßtemperatur	203(2) K	
Kristallsystem, Raumgruppe	kubisch, I-43d (220)	
Zelldimensionen	a = 2007.96(10) pm	$\alpha = 90.000(10)^\circ$.
	b = 2007.96(10) pm	$\beta = 90.000(10)^\circ$.
	c = 2007.96(10) pm	$\gamma = 90.000(10)^\circ$.
Volumen	8.0959(7) nm ³	
Z, Dichte (berechnet)	12, 3.522 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	10.660 mm ⁻¹	
F(000)	7440	
Kristalldimensionen	0.3 x 0.3 x 0.4 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	2.48 bis 30.00°.	
Bereich der Indizes	-27<=h<=28, -28<=k<=28, -28<=l<=28	
Anzahl gemessene Reflexe	45881	
Unabhängige Reflexe	1985 [R(int) = 0.0392]	
Vollständigkeit zu Theta = 30.00°	100.0 %	
Reflexe >2sigma(I)°	1938	
Methode der Strukturverfeinerung	Kleinste Quadrateverfeinerung (Vollmatrix) an F ²	
Reflexe/ festgehalten/ Parameter	1985 / 0 / 60	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.132	
R-Wert [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0152, wR2 = 0.0372	
R-Wert (alle Daten)	R1 = 0.0158, wR2 = 0.0375	
Absol. Strukturparameter (Flack-Par.)	0.02(3)	
Extinktionskoeffizient	0.000042(4)	
Größe und kleinste Restelektronendichte	0.567 und -0.953 10 ⁻⁶ e · pm ⁻³	

Tab. 2. Atomkoordinaten (x 10⁴) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren (pm²x 10⁻¹) für **20**.
U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten Uij Tensors.

	x	y	z	U(eq)
I(1)	2500	1250	5000	37(1)
Ag(1)	835(1)	2891(1)	7164(1)	68(1)
Cs(1)	691(1)	1328(1)	5637(1)	28(1)
Cs(2)	0	2500	3750	25(1)
C(1)	1357(2)	1990(2)	7127(2)	31(1)
N(1)	1622(2)	1512(2)	7093(2)	38(1)
C(2)	376(2)	3809(2)	7034(2)	33(1)
N(2)	136(2)	4310(2)	6956(2)	37(1)

Tab. 3. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **20**.

Cs(1)-N(1)#1	316.9(4)	Cs(2)-N(2)#10	329.5(4)
Cs(1)-N(2)#2	320.8(4)	Cs(2)-N(2)#2	329.5(4)
Cs(1)-N(2)#3	337.8(3)	Cs(2)-Cs(1)#11	467.14(3)
Cs(1)-N(1)	348.9(4)	Cs(2)-Cs(1)#3	467.14(3)
Cs(1)-N(1)#5	357.5(4)	Cs(2)-Cs(1)#12	467.14(3)
Cs(1)-N(2)#4	359.0(4)	I(1)-Cs(1)#1	385.35(3)
Cs(1)-I(1)	385.35(3)	I(1)-Cs(1)#13	385.35(3)
Cs(1)-Ag(1)#4	417.50(5)	I(1)-Cs(1)#14	385.35(3)
Cs(2)-N(1)#6	323.2(4)	Ag(1)-C(2)	207.7(4)
Cs(2)-N(1)#7	323.2(4)	Ag(1)-C(1)	209.2(4)
Cs(2)-N(1)#8	323.2(4)	Ag(1)-Cs(1)#15	417.50(5)
Cs(2)-N(1)#1	323.2(4)	Ag(1)-Cs(1)#16	438.81(5)
Cs(2)-N(2)#4	329.5(4)	C(1)-N(1)	110.1(5)
Cs(2)-N(2)#9	329.5(4)	C(2)-N(2)	112.6(5)

N(1)-Cs(1)#13	316.9(4)	N(2)#4-Cs(1)-Ag(1)#4	48.00(6)
N(1)-Cs(2)#17	323.2(3)	I(1)-Cs(1)-Ag(1)#4	54.444(9)
N(1)-Cs(1)#16	357.5(4)	N(1)#6-Cs(2)-N(1)#7	93.07(3)
N(2)-Cs(1)#18	320.8(4)	N(1)#6-Cs(2)-N(1)#8	153.24(13)
N(2)-Cs(2)#18	329.5(4)	N(1)#7-Cs(2)-N(1)#8	93.07(3)
N(2)-Cs(1)#3	337.8(3)	N(1)#6-Cs(2)-N(1)#1	93.07(3)
N(2)-Cs(1)#15	359.0(4)	N(1)#7-Cs(2)-N(1)#1	153.24(13)
		N(1)#8-Cs(2)-N(1)#1	93.07(3)
N(1)#1-Cs(1)-N(2)#2	68.16(9)	N(1)#6-Cs(2)-N(2)#4	132.40(9)
N(1)#1-Cs(1)-N(2)#3	125.59(9)	N(1)#7-Cs(2)-N(2)#4	66.38(9)
N(2)#2-Cs(1)-N(2)#3	88.26(12)	N(1)#8-Cs(2)-N(2)#4	73.53(8)
N(1)#1-Cs(1)-N(1)	157.40(11)	N(1)#1-Cs(2)-N(2)#4	90.56(9)
N(2)#2-Cs(1)-N(1)	133.19(9)	N(1)#6-Cs(2)-N(2)#9	90.56(9)
N(2)#3-Cs(1)-N(1)	69.33(8)	N(1)#7-Cs(2)-N(2)#9	132.40(9)
N(1)#1-Cs(1)-N(1)#5	89.88(12)	N(1)#8-Cs(2)-N(2)#9	66.38(9)
N(2)#2-Cs(1)-N(1)#5	122.34(8)	N(1)#1-Cs(2)-N(2)#9	73.53(8)
N(2)#3-Cs(1)-N(1)#5	61.78(8)	N(2)#4-Cs(2)-N(2)#9	135.49(8)
C(2)#4-Cs(1)-N(1)#5	157.12(9)	N(1)#6-Cs(2)-N(2)#10	66.38(9)
N(1)-Cs(1)-N(1)#5	83.22(11)	N(1)#7-Cs(2)-N(2)#10	73.53(8)
C(2)#3-Cs(1)-N(1)#5	80.28(9)	N(1)#8-Cs(2)-N(2)#10	90.56(9)
N(1)#1-Cs(1)-N(2)#4	86.43(9)	N(1)#1-Cs(2)-N(2)#10	132.40(9)
N(2)#2-Cs(1)-N(2)#4	62.26(10)	N(2)#4-Cs(2)-N(2)#10	135.49(8)
N(2)#3-Cs(1)-N(2)#4	125.69(7)	N(2)#9-Cs(2)-N(2)#10	64.77(12)
N(1)-Cs(1)-N(2)#4	97.68(8)	N(1)#6-Cs(2)-N(2)#2	73.53(8)
N(1)#5-Cs(1)-N(2)#4	172.32(8)	N(1)#7-Cs(2)-N(2)#2	90.56(9)
N(1)#1-Cs(1)-I(1)	80.92(7)	N(1)#8-Cs(2)-N(2)#2	132.40(9)
N(2)#2-Cs(1)-I(1)	136.60(6)	N(1)#1-Cs(2)-N(2)#2	66.38(9)
N(2)#3-Cs(1)-I(1)	135.09(6)	N(2)#4-Cs(2)-N(2)#2	64.77(12)
C(2)#4-Cs(1)-I(1)	73.56(7)	N(2)#9-Cs(2)-N(2)#2	135.49(8)
N(1)-Cs(1)-I(1)	77.14(6)	N(2)#10-Cs(2)-N(2)#2	135.49(8)
N(1)#5-Cs(1)-I(1)	85.83(6)	C(2)-Ag(1)-C(1)	170.06(15)
N(2)#4-Cs(1)-I(1)	86.95(6)	Cs(1)#15-Ag(1)-Cs(1)#16	79.086(8)
N(1)#1-Cs(1)-Ag(1)#4	111.73(7)	Cs(1)#16-Ag(1)-Cs(1)	102.968(9)
N(2)#2-Cs(1)-Ag(1)#4	109.54(6)	N(1)-C(1)-Ag(1)	178.2(3)
N(2)#3-Cs(1)-Ag(1)#4	122.41(6)	N(2)-C(2)-Ag(1)	178.9(4)
N(1)-Cs(1)-Ag(1)#4	58.56(6)	Cs(1)#18-N(2)-Cs(1)#3	100.05(10)
N(1)#5-Cs(1)-Ag(1)#4	128.10(6)	Cs(2)#18-N(2)-Cs(1)#3	90.24(9)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

- #1 -z+3/4,-y+1/4,x+1/4 #2 y-1/2,z-1/2,x+1/2
#3 -x+0,-y+1/2,z+0 #4 -y+1/2,-z+1,x+1/2 #5 -x+1/4,z-3/4,-y+3/4
#6 -y,z-1/2,-x+1/2 #7 z-3/4,y+1/4,x+1/4 #8 y+0,-z+1,-x+1/2
#9 -z+3/4,y-1/4,-x+1/4 #10 z-3/4,-y+3/4,-x+1/4
#11 y-1/4,-x+1/4,-z+3/4 #12 -y+1/4,x+1/4,-z+3/4
#13 z-1/4,-y+1/4,-x+3/4 #14 -x+1/2,y+0,-z+1
#15 z-1/2,-x+1/2,-y+1 #16 -x+1/4,-z+3/4,y+3/4
#17 -z+1/2,-x,y+1/2 #18 z-1/2,x+1/2,y+1/2

Tab. 4. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **20**.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
I(1)	28(1)	54(1)	28(1)	0	0	0
Ag(1)	84(1)	39(1)	83(1)	-23(1)	-47(1)	31(1)
Cs(1)	30(1)	29(1)	26(1)	1(1)	0(1)	0(1)
Cs(2)	25(1)	25(1)	25(1)	0	0	0
C(1)	41(2)	28(2)	23(2)	-2(1)	-10(1)	2(1)
N(1)	35(2)	36(2)	42(2)	2(1)	-2(1)	1(1)
C(2)	38(2)	35(2)	26(2)	-6(1)	-10(1)	6(2)
N(2)	38(2)	35(2)	38(2)	-2(1)	-1(1)	-1(1)

Bis(triphenylphosphoranyliden)ammonium-dithiocyanatoargentat(I) **21**.

Tab. 1. Kristall- und Strukturdaten von **21**.

Summenformel	C ₃₈ H ₃₀ Ag N ₃ P ₂ S ₂	
Molmasse	762.58 g/mol	
Meßtemperatur	203(2) K	
Kristallsystem, Raumgruppe	monoklin, P2 ₁ /n (14)	
Zelldimensionen	a = 1054.72(7) pm	$\alpha = 90^\circ$.
	b = 1431.25(9) pm	$\beta = 93.0730(10)^\circ$.
	c = 2236.34(14) pm	$\gamma = 90^\circ$.
Volumen	3.3711(4) nm ³	
Z, Dichte (berechnet)	4, 1.503 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	0.849 mm ⁻¹	
F(000)	1552	
Kristalldimensionen	0.4 x 0.3 x 0.1 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	1.69 bis 30.03°.	
Bereich der Indizes	-14<=h<=14, -19<=k<=19, -31<=l<=31	
Anzahl gemessene Reflexe	38085	
Unabhängige Reflexe	9708 [R(int) = 0.0460]	
Vollständigkeit zu Theta = 30.03°	98.6 %	
Reflexe >2sigma(I)°	6360	
Methode der Strukturverfeinerung	Kleinste Quadrateverfeinerung (Vollmatrix) an F ²	
Reflexe / festgehalten / Parameter	9708 / 0 / 415	
Goodness-of-fit gegen F ²	0.980	
R-Wert [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0344, wR2 = 0.0747	
R-Wert (alle Daten)	R1 = 0.0677, wR2 = 0.0850	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.451 und -0.660 10 ⁻⁶ e · pm ⁻³	

Tab. 2. Atomkoordinaten (x 10⁴) und equivalente isotrope Temperaturfaktoren (pm²x 10⁻¹) für **21**.
U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten Uij Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Ag(1)	5674(1)	8776(1)	5842(1)	40(1)
S(1)	7534(1)	9587(1)	5466(1)	45(1)
S(2)	4929(1)	7890(1)	6683(1)	35(1)
N(1)	3890(2)	9052(2)	5181(1)	41(1)
N(2)	6863(2)	6580(2)	6945(1)	43(1)
N(3)	7836(2)	5304(1)	3497(1)	23(1)
C(1)	6697(2)	10384(2)	5082(1)	31(1)
C(2)	6090(2)	7132(2)	6833(1)	27(1)
P(1)	9225(1)	4973(1)	3381(1)	19(1)
P(2)	7067(1)	6229(1)	3623(1)	19(1)
C(121)	9434(2)	3837(1)	3722(1)	21(1)
C(126)	8397(2)	3230(2)	3714(1)	27(1)
C(125)	8546(2)	2334(2)	3940(1)	33(1)
C(124)	9724(2)	2037(2)	4172(1)	35(1)
C(123)	10750(2)	2632(2)	4179(1)	33(1)
C(122)	10617(2)	3532(2)	3952(1)	26(1)
C(111)	9449(2)	4816(1)	2596(1)	21(1)
C(112)	10614(2)	4501(1)	2403(1)	25(1)
C(113)	10754(2)	4323(2)	1803(1)	30(1)
C(114)	9738(2)	4444(2)	1391(1)	32(1)
C(115)	8587(2)	4761(2)	1578(1)	32(1)
C(116)	8437(2)	4948(2)	2176(1)	25(1)
C(131)	10439(2)	5742(1)	3690(1)	21(1)
C(132)	11176(2)	6291(2)	3333(1)	29(1)
C(133)	11991(2)	6951(2)	3595(1)	38(1)
C(134)	12064(2)	7073(2)	4207(1)	35(1)
C(135)	11339(2)	6529(2)	4566(1)	33(1)
C(136)	10530(2)	5866(2)	4308(1)	28(1)
C(211)	7973(2)	7296(1)	3597(1)	23(1)
C(212)	8402(2)	7597(2)	3050(1)	30(1)

C(213)	9186(2)	8376(2)	3033(1)	36(1)
C(214)	9550(2)	8840(2)	3552(1)	36(1)
C(215)	9134(2)	8549(2)	4094(1)	36(1)
C(216)	8338(2)	7780(2)	4117(1)	31(1)
C(231)	5744(2)	6289(1)	3084(1)	19(1)
C(232)	5361(2)	7111(1)	2794(1)	25(1)
C(233)	4338(2)	7093(2)	2379(1)	30(1)
C(234)	3693(2)	6274(2)	2251(1)	28(1)
C(235)	4050(2)	5457(2)	2545(1)	28(1)
C(236)	5074(2)	5463(1)	2963(1)	26(1)
C(221)	6443(2)	6162(1)	4355(1)	21(1)
C(226)	5517(2)	6796(2)	4520(1)	27(1)
C(225)	5064(2)	6757(2)	5087(1)	31(1)
C(224)	5522(2)	6086(2)	5490(1)	31(1)
C(223)	6429(2)	5456(2)	5329(1)	29(1)
C(222)	6888(2)	5489(2)	4762(1)	25(1)

Tab. 3. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **21**.

Ag(1)-N(1)	236.3(2)	P(2)-C(231)	179.7(2)
Ag(1)-S(2)	243.42(6)	P(2)-C(221)	180.0(2)
Ag(1)-S(1)	246.50(7)	P(2)-C(211)	180.4(2)
S(1)-C(1)	165.5(2)	C(1)-N(1)#1	115.7(3)
S(2)-C(2)	165.7(2)		
N(3)-P(1)	157.45(17)	N(1)-Ag(1)-S(2)	106.95(6)
N(3)-P(2)	158.60(17)	N(1)-Ag(1)-S(1)	109.27(6)
N(1)-C(1)#1	115.7(3)	S(2)-Ag(1)-S(1)	143.52(2)
N(2)-C(2)	115.3(3)	C(1)-S(1)-Ag(1)	95.11(9)
P(1)-C(111)	179.7(2)	C(2)-S(2)-Ag(1)	103.37(8)
P(1)-C(131)	179.8(2)	P(1)-N(3)-P(2)	140.38(12)
P(1)-C(121)	180.4(2)	C(1)#1-N(1)-Ag(1)	145.04(19)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:
#1 -x+1,-y+2,-z+1

Tab. 4. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **21**.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Ag(1)	49(1)	32(1)	38(1)	11(1)	2(1)	7(1)
S(1)	36(1)	45(1)	56(1)	16(1)	7(1)	15(1)
S(2)	38(1)	36(1)	32(1)	7(1)	6(1)	13(1)
N(1)	48(1)	36(1)	40(1)	9(1)	-8(1)	-2(1)
N(2)	28(1)	37(1)	62(2)	16(1)	-5(1)	0(1)
N(3)	18(1)	19(1)	31(1)	1(1)	2(1)	2(1)
C(1)	37(1)	30(1)	26(1)	-1(1)	4(1)	-1(1)
C(2)	28(1)	26(1)	27(1)	4(1)	-1(1)	-8(1)
P(1)	18(1)	18(1)	20(1)	1(1)	-1(1)	2(1)
P(2)	18(1)	18(1)	21(1)	2(1)	1(1)	2(1)
C(121)	25(1)	19(1)	20(1)	2(1)	2(1)	4(1)
C(126)	26(1)	25(1)	28(1)	2(1)	-2(1)	2(1)
C(125)	42(1)	22(1)	35(1)	2(1)	2(1)	-4(1)
C(124)	52(2)	21(1)	31(1)	5(1)	0(1)	9(1)
C(123)	36(1)	32(1)	30(1)	2(1)	-4(1)	16(1)
C(122)	26(1)	26(1)	25(1)	-1(1)	-1(1)	5(1)
C(111)	25(1)	16(1)	22(1)	2(1)	-1(1)	-2(1)
C(112)	27(1)	21(1)	27(1)	1(1)	0(1)	2(1)
C(113)	37(1)	24(1)	31(1)	-1(1)	10(1)	1(1)
C(114)	50(2)	23(1)	22(1)	0(1)	5(1)	-11(1)
C(115)	36(1)	34(1)	24(1)	4(1)	-7(1)	-12(1)
C(116)	22(1)	26(1)	28(1)	3(1)	-2(1)	-4(1)

C(131)	19(1)	19(1)	25(1)	-1(1)	-2(1)	4(1)
C(132)	29(1)	31(1)	29(1)	-5(1)	3(1)	-5(1)
C(133)	35(1)	35(1)	44(1)	-7(1)	6(1)	-12(1)
C(134)	26(1)	30(1)	47(1)	-13(1)	-7(1)	0(1)
C(135)	34(1)	36(1)	28(1)	-8(1)	-9(1)	6(1)
C(136)	29(1)	29(1)	25(1)	1(1)	-2(1)	2(1)
C(211)	21(1)	19(1)	29(1)	2(1)	0(1)	4(1)
C(212)	31(1)	24(1)	34(1)	-3(1)	9(1)	0(1)
C(213)	37(1)	27(1)	45(1)	2(1)	19(1)	-3(1)
C(214)	27(1)	23(1)	58(2)	0(1)	6(1)	-5(1)
C(215)	36(1)	31(1)	41(1)	-2(1)	-10(1)	-6(1)
C(216)	33(1)	29(1)	30(1)	5(1)	-5(1)	-4(1)
C(231)	18(1)	20(1)	19(1)	0(1)	2(1)	4(1)
C(232)	29(1)	20(1)	25(1)	0(1)	-1(1)	2(1)
C(233)	35(1)	25(1)	27(1)	7(1)	-6(1)	4(1)
C(234)	26(1)	32(1)	26(1)	-1(1)	-4(1)	2(1)
C(235)	25(1)	24(1)	35(1)	1(1)	-2(1)	-3(1)
C(236)	25(1)	20(1)	32(1)	6(1)	-2(1)	1(1)
C(221)	20(1)	22(1)	20(1)	0(1)	-1(1)	-1(1)
C(226)	28(1)	24(1)	28(1)	2(1)	2(1)	4(1)
C(225)	32(1)	31(1)	31(1)	-8(1)	6(1)	1(1)
C(224)	32(1)	39(1)	21(1)	-4(1)	1(1)	-12(1)
C(223)	30(1)	32(1)	24(1)	6(1)	-6(1)	-6(1)
C(222)	19(1)	26(1)	28(1)	3(1)	-3(1)	-1(1)

Tab. 5. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für 21.

	x	y	z	U(eq)
H(126)	7607	3428	3558	32
H(125)	7855	1930	3936	40
H(124)	9821	1434	4323	42
H(123)	11537	2431	4336	39
H(122)	11314	3930	3954	31
H(112)	11295	4412	2678	30
H(113)	11533	4120	1675	36
H(114)	9831	4312	988	38
H(115)	7910	4849	1300	38
H(116)	7661	5161	2300	30
H(132)	11122	6217	2919	35
H(133)	12493	7314	3356	46
H(134)	12605	7524	4378	42
H(135)	11394	6609	4980	40
H(136)	10042	5498	4551	33
H(212)	8166	7279	2700	35
H(213)	9465	8585	2669	43
H(214)	10084	9356	3537	43
H(215)	9385	8866	4443	43
H(216)	8047	7587	4483	37
H(232)	5789	7668	2879	30
H(233)	4085	7641	2184	35
H(234)	3017	6270	1966	34
H(235)	3606	4906	2464	34
H(236)	5314	4916	3163	31
H(226)	5206	7243	4248	32
H(225)	4452	7181	5198	37
H(224)	5214	6061	5872	37
H(223)	6733	5007	5601	35
H(222)	7497	5061	4653	30

Bis(triphenylphosphoranyliden)ammonium-(chloriodo)argentat(I) **22**.

Tab. 1. Kristall- und Strukturdaten von **22**.

Summenformel	C ₃₆ H ₃₀ Ag Cl I N P ₂	
Molmasse	808.77 g/mol	
Meßtemperatur	173(2) K	
Kristallsystem, Raumgruppe	orthorhombisch, Pbc _a (61)	
Zelldimensionen	a = 1944.32(9) pm	$\alpha = 90^\circ$.
	b = 1627.15(8) pm	$\beta = 90^\circ$.
	c = 2054.21(10) pm	$\gamma = 90^\circ$.
Volumen	6.4989(5) nm ³	
Z, Dichte (berechnet)	8, 1.653 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	1.778 mm ⁻¹	
F(000)	3200	
Kristalldimensionen	0.4 x 0.05 x 0.1 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	1.91 bis 26.37°.	
Bereich der Indizes	-24<=h<=24, -20<=k<=20, -25<=l<=25	
Anzahl gemessene Reflexe	56285	
Unabhängige Reflexe	6659 [R(int) = 0.0446]	
Vollständigkeit zu Theta = 26.37°	100.0 %	
Reflexe >2sigma(I)°	5027	
Methode der Strukturverfeinerung	Kleinste Quadrateverfeinerung (Vollmatrix) an F ²	
Reflexe / festgehalten / Parameter	6659 / 0 / 379	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.076	
R-Wert [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0346, wR2 = 0.0889	
R-Wert (alle Daten)	R1 = 0.0510, wR2 = 0.0954	
Größte und kleinste Restelektronendichte	2.536 und -0.712 10 ⁻⁶ e · pm ⁻³	

Tab. 2. Atomkoordinaten (x 10⁴) und equivalente isotrope Temperaturfaktoren (pm²x 10⁻¹) für **22**.
U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten Uij Tensors.

	x	y	z	U(eq)
I(1)	816(1)	4064(1)	4872(1)	40(1)
Ag(1)	-431(1)	4585(1)	4347(1)	48(1)
Cl(1)	-1151(1)	3984(1)	3387(1)	61(1)
P(1)	1264(1)	73(1)	4041(1)	22(1)
P(2)	2465(1)	705(1)	3296(1)	23(1)
N(1)	1873(2)	111(2)	3531(1)	27(1)
C(111)	921(2)	-952(2)	4003(2)	22(1)
C(112)	935(2)	-1365(2)	3413(2)	28(1)
C(113)	641(2)	-2139(2)	3367(2)	34(1)
C(135)	1441(2)	921(3)	5909(2)	39(1)
C(126)	-84(2)	473(2)	3690(2)	30(1)
C(233)	2440(2)	2211(3)	1707(2)	41(1)
C(221)	2708(2)	1479(2)	3876(2)	25(1)
C(231)	2214(2)	1226(2)	2558(2)	26(1)
C(136)	1191(2)	791(2)	5285(2)	32(1)
C(214)	4329(2)	-872(3)	2770(2)	43(1)
C(211)	3207(2)	84(2)	3114(2)	26(1)
C(124)	-505(2)	1847(3)	3561(2)	40(1)
C(232)	2637(2)	1833(2)	2282(2)	35(1)
C(114)	336(2)	-2497(2)	3906(2)	35(1)
C(222)	2417(2)	2262(2)	3837(2)	31(1)
C(131)	1547(2)	271(2)	4862(2)	23(1)
C(213)	4422(2)	-60(3)	2938(2)	40(1)
C(115)	328(2)	-2092(2)	4493(2)	35(1)
C(216)	3113(2)	-738(2)	2943(2)	32(1)
C(234)	1830(2)	1981(3)	1404(2)	41(1)
C(132)	2144(2)	-115(2)	5078(2)	31(1)
C(125)	-613(2)	1014(3)	3547(2)	38(1)
C(226)	3100(2)	1263(2)	4416(2)	32(1)
C(123)	139(2)	2152(2)	3734(2)	38(1)

C(215)	3678(2)	-1209(3)	2771(2)	41(1)
C(116)	615(2)	-1315(2)	4549(2)	28(1)
C(121)	560(2)	764(2)	3862(2)	26(1)
C(223)	2511(2)	2819(2)	4334(2)	37(1)
C(236)	1610(2)	1007(2)	2252(2)	32(1)
C(122)	668(2)	1618(2)	3884(2)	34(1)
C(235)	1421(2)	1380(3)	1673(2)	40(1)
C(133)	2384(2)	24(3)	5702(2)	37(1)
C(224)	2895(2)	2599(3)	4876(2)	40(1)
C(225)	3194(2)	1832(3)	4916(2)	39(1)
C(212)	3865(2)	426(2)	3106(2)	33(1)
C(134)	2032(2)	547(3)	6114(2)	37(1)

Tab. 3. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **22**.

I(1)-Ag(1)	278.47(5)	P(2)-C(221)	179.7(4)
I(1)-Ag(1)#1	282.23(5)	P(2)-C(211)	180.1(4)
Ag(1)-Cl(1)	260.89(17)	P(2)-C(231)	180.4(4)
Ag(1)-I(1)#1	282.23(5)		
P(1)-N(1)	158.4(3)	Ag(1)-I(1)-Ag(1)#1	75.649(14)
P(1)-C(111)	179.7(3)	Cl(1)-Ag(1)-I(1)	130.23(3)
P(1)-C(131)	180.3(3)	Cl(1)-Ag(1)-I(1)#1	125.39(3)
P(1)-C(121)	180.8(4)	I(1)-Ag(1)-I(1)#1	104.351(14)
P(2)-N(1)	157.7(3)	P(2)-N(1)-P(1)	140.5(2)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:
#1 -x,-y+1,-z+1

Tab. 4. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **22**.
Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
I(1)	40(1)	40(1)	39(1)	1(1)	-6(1)	-3(1)
Ag(1)	47(1)	52(1)	46(1)	8(1)	-2(1)	-9(1)
Cl(1)	56(1)	47(1)	79(1)	30(1)	40(1)	22(1)
P(1)	21(1)	22(1)	23(1)	-1(1)	2(1)	-1(1)
P(2)	21(1)	23(1)	24(1)	1(1)	1(1)	-1(1)
N(1)	28(2)	25(2)	27(2)	-4(1)	6(1)	-3(1)
C(111)	17(2)	23(2)	27(2)	0(1)	1(1)	1(1)
C(112)	28(2)	26(2)	30(2)	-1(2)	-1(2)	-3(2)
C(113)	36(2)	27(2)	39(2)	-7(2)	0(2)	-2(2)
C(135)	44(2)	40(2)	33(2)	-14(2)	8(2)	-4(2)
C(126)	32(2)	28(2)	31(2)	-4(2)	-3(2)	0(2)
C(233)	51(3)	36(2)	35(2)	9(2)	7(2)	1(2)
C(221)	24(2)	23(2)	28(2)	1(1)	2(1)	-4(1)
C(231)	28(2)	24(2)	26(2)	1(1)	2(2)	4(2)
C(136)	25(2)	33(2)	37(2)	-6(2)	4(2)	0(2)
C(214)	41(2)	53(3)	35(2)	8(2)	9(2)	22(2)
C(211)	25(2)	32(2)	21(2)	5(1)	1(1)	3(2)
C(124)	41(2)	42(2)	37(2)	1(2)	-7(2)	14(2)
C(232)	33(2)	39(2)	34(2)	6(2)	5(2)	-3(2)
C(114)	30(2)	21(2)	54(3)	-2(2)	2(2)	-6(2)
C(222)	31(2)	28(2)	35(2)	1(2)	-3(2)	-2(2)
C(131)	23(2)	24(2)	22(2)	-2(1)	4(1)	-5(1)
C(213)	25(2)	55(3)	42(2)	12(2)	5(2)	5(2)
C(115)	29(2)	29(2)	47(2)	5(2)	11(2)	-2(2)
C(216)	36(2)	32(2)	27(2)	0(2)	2(2)	2(2)
C(234)	56(3)	40(2)	27(2)	2(2)	-5(2)	11(2)
C(132)	37(2)	28(2)	29(2)	-1(2)	1(2)	5(2)
C(125)	32(2)	42(2)	40(2)	-2(2)	-8(2)	5(2)
C(226)	36(2)	29(2)	31(2)	4(2)	-4(2)	-4(2)

C(123)	44(2)	27(2)	43(2)	6(2)	4(2)	6(2)
C(215)	52(3)	34(2)	38(2)	-1(2)	7(2)	11(2)
C(116)	26(2)	27(2)	30(2)	-1(2)	5(2)	1(2)
C(121)	27(2)	29(2)	23(2)	2(2)	3(2)	-1(2)
C(223)	39(2)	28(2)	45(2)	-7(2)	1(2)	-3(2)
C(236)	31(2)	33(2)	33(2)	0(2)	-2(2)	-3(2)
C(122)	32(2)	27(2)	44(2)	3(2)	-1(2)	-3(2)
C(235)	39(2)	45(2)	35(2)	0(2)	-11(2)	5(2)
C(133)	41(2)	35(2)	35(2)	8(2)	-9(2)	1(2)
C(224)	49(2)	36(2)	34(2)	-11(2)	4(2)	-8(2)
C(225)	47(3)	40(2)	29(2)	-1(2)	-5(2)	-12(2)
C(212)	27(2)	37(2)	34(2)	6(2)	3(2)	2(2)
C(134)	45(2)	42(2)	23(2)	-1(2)	0(2)	-9(2)

Tab. 5. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **22**.

	x	y	z	U(eq)
H(112)	1144	-1119	3043	34
H(113)	648	-2425	2964	41
H(135)	1198	1274	6197	47
H(126)	-163	-102	3669	36
H(233)	2721	2626	1520	49
H(136)	781	1054	5145	38
H(214)	4714	-1200	2653	52
H(124)	-868	2213	3453	47
H(232)	3055	1983	2489	42
H(114)	132	-3025	3870	42
H(222)	2152	2411	3467	37
H(213)	4872	168	2940	49
H(115)	125	-2345	4862	42
H(216)	2666	-972	2945	38
H(234)	1695	2240	1010	49
H(132)	2387	-476	4796	38
H(125)	-1055	806	3439	46
H(226)	3303	733	4444	38
H(123)	214	2728	3749	46
H(215)	3617	-1769	2653	49
H(116)	605	-1032	4953	33
H(223)	2315	3353	4305	45
H(236)	1322	599	2439	39
H(122)	1107	1828	4002	41
H(235)	1008	1221	1461	48
H(133)	2792	-239	5848	45
H(224)	2952	2980	5222	48
H(225)	3464	1691	5285	47
H(212)	3931	988	3214	39
H(134)	2201	646	6541	44