

7 Kristallographischer Anhang

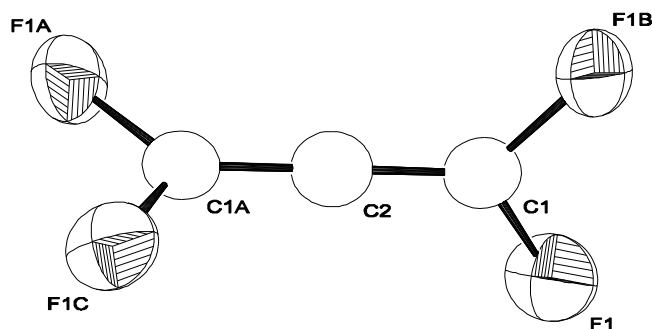


Abbildung 1: ORTEP-Darstellung der Struktur von **1** im Kristall

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

Identifikationscode	cca	
Diffraktometer	Siemens-Vierkreisdiffraktometer	
Farbe	farblos	
Summenformel	C_3F_4	
Molmasse	112.03 g/mol	
Messtemperatur	103(2) K	
Wellenlänge	71.073 pm	
Kristallsystem	Orthorhombisch	
Raumgruppe	Ccca	
Zelldimensionen	$a = 709.21(14)$ pm	$\alpha = 90^\circ$.
	$b = 1333.8(3)$ pm	$\beta = 90^\circ$.
	$c = 415.00(8)$ pm	$\gamma = 90^\circ$.
Volumen	$0.39258(13)$ nm ³	
Z	4	
Dichte (berechnet)	1.895 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	0.245 mm ⁻¹	
Absorptionskorrektur	Keine	
F(000)	216	
Kristalldimensionen	$4 \times 0.3 \times 0.3$ mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	3.05 bis 29.94° .	
Bereich der Indizes	$-2 \leq h \leq 9, -18 \leq k \leq 18, -5 \leq l \leq 1$	
Anzahl gemessene Reflexe	445	
unabhängige Reflexe	225 [R(int) = 0.0142]	
Vollständigkeit zu $\Theta = 29.94^\circ$	78.4 %	
Reflexe $>2\sigma(I)^\circ$	173	
Methode der Strukturverfeinerung	Methode der kleinsten Fehlerquadrate F ²	
Reflexe / unterdrückt / Parameter	225 / 0 / 18	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.099	
Endgültiger Fehler R [$>2\sigma(I)$]	R1 = 0.0341, wR2 = 0.0987	
R (alle Daten)	R1 = 0.0460, wR2 = 0.1043	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.185 und -0.193×10^{-6} e pm ⁻³	

Tab. 11. Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **1**.
 $U(\text{eq})$ ist definiert als $1/3$ des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
F(1)	-1062(1)	968(1)	684(3)	54(1)
C(1)	0	1543(2)	2500	38(1)
C(2)	0	2500	2500	43(1)

Tab. 12. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **1**.

F(1)-C(1)	131.30(16)
C(1)-C(2)	127.7(2)
C(1)-F(1)#1	131.30(16)
C(2)-C(1)#2	127.7(2)
C(2)-C(1)-F(1)	125.76(9)
C(2)-C(1)-F(1)#1	125.75(9)
F(1)-C(1)-F(1)#1	108.49(17)
C(1)-C(2)-C(1)#2	180.0

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

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

Tab. 13. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **1**. Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^2 U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
F(1)	53(1)	51(1)	58(1)	-22(1)	-4(1)	4(1)
C(1)	34(1)	44(1)	36(1)	0	6(1)	0
C(2)	39(1)	48(1)	43(2)	0	0	0

Tab. 14. Torsionswinkel [°] für **1**.

F(1)-C(1)-C(1A)-F(1A)	90.0(0)
-----------------------	---------

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

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

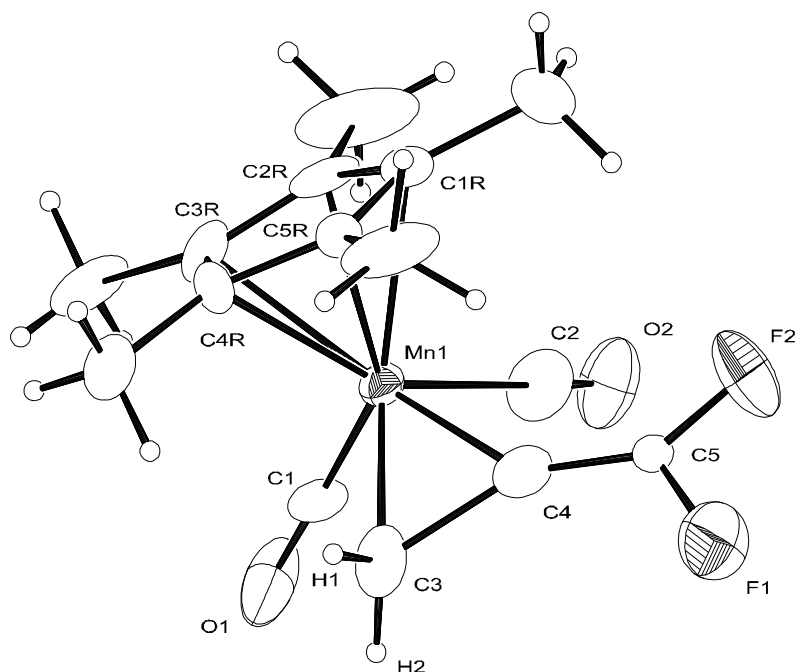


Abbildung 2: ORTEP-Darstellung der Struktur von **2** im Kristall

Tab. 15. Kristall- und Strukturdaten von **2**.

Identifikationscode	mnall2	
Diffraktometer	Stoe-Vierkreisdiffraktometer	
Farbe	gelb	
Summenformel	$C_{15} H_{17} F_2 Mn O_2$	
Molmasse	322.23 g/mol	
Messtemperatur	293(2) K	
Wellenlänge	71.069 pm	
Kristallsystem	Monoklin	
Raumgruppe	$P2_1$	
Zelldimensionen	$a = 675.85(7)$ pm	$\alpha = 90^\circ$.
	$b = 1247.9(2)$ pm	$\beta = 94.040(10)^\circ$.
	$c = 894.60(10)$ pm	$\gamma = 90^\circ$.
Volumen	$0.75262(17)$ nm ³	
Z	2	
Dichte (berechnet)	1.422 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	0.896 mm ⁻¹	
Absorptionskorrektur	Keine	
F(000)	332	
Kristalldimensionen	$0.4 \times 0.3 \times 0.1$ mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	2.28 bis 25.00° .	
Bereich der Indizes	$0 \leq h \leq 8, -14 \leq k \leq 14, -10 \leq l \leq 10$	
Anzahl gemessene Reflexe	2884	
unabhängige Reflexe	2649 [R(int) = 0.0263]	
Vollständigkeit zu Theta = 25.00°	100.0 %	
Reflexe > $2\sigma(I)^\circ$	1747	
Methode der Strukturverfeinerung	Methode der kleinsten Fehlerquadrate F^2	
Reflexe / unterdrückt / Parameter	2649 / 1 / 131	
Goodness-of-fit gegen F^2	1.084	
Endgültiger Fehler R [$I > 2\sigma(I)$]	$R1 = 0.0674, wR2 = 0.1766$	
R (alle Daten)	$R1 = 0.1148, wR2 = 0.2092$	
Absol. Strukturparameter (Flack-Par.)	0.39(8)	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.553 und -0.347×10^{-6} e pm ⁻³	

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

	x	y	z	U(eq)
Mn(1)	4931(1)	8106(3)	2783(1)	65(1)
C(1R)	2098(4)	7499(3)	1839(3)	87(4)
C(2R)	2398(5)	7165(3)	3346(4)	97(5)
C(3R)	2516(4)	8089(4)	4259(3)	109(4)
C(4R)	2289(5)	8995(4)	3316(4)	105(5)
C(5R)	2031(4)	8630(3)	1821(3)	65(3)
C(1M)	1887(6)	6779(4)	493(5)	131(6)
C(2M)	2562(8)	6026(4)	3884(7)	224(14)
C(3M)	2828(5)	8105(7)	5937(4)	251(12)
C(4M)	2318(9)	10143(4)	3816(7)	162(8)
C(5M)	1737(6)	9323(4)	452(5)	152(8)
C(1)	6682(4)	8064(6)	4359(3)	110(3)
O(1)	7783(5)	8164(8)	5353(4)	211(6)
C(2)	6354(6)	6867(4)	2191(4)	113(5)
O(2)	7140(9)	6101(5)	2184(6)	162(5)
C(3)	6439(7)	9524(4)	2228(5)	124(6)
C(4)	6164(5)	8555(4)	988(3)	92(3)
C(5)	6392(5)	8255(5)	-448(3)	144(7)
F(1)	7338(7)	8854(6)	-1392(4)	170(4)
F(2)	6151(7)	7318(5)	-1048(4)	177(5)

Tab. 17. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **2**.

Mn(1)-C(1)	177.6(3)
Mn(1)-C(2)	191.6(4)
Mn(1)-C(4)	194.3(3)
Mn(1)-C(3)	211.9(5)
Mn(1)-C(2R)	216.5(3)
Mn(1)-C(3R)	217.1(3)
Mn(1)-C(1R)	217.4(3)
Mn(1)-C(4R)	218.3(3)
Mn(1)-C(5R)	218.5(3)
C(1)-O(1)	112.55
C(2)-O(2)	109.30
C(3)-C(4)	164.33(12)
C(3)-H(1)	96.99
C(3)-H(2)	96.99
C(4)-C(5)	135.7(2)
C(5)-F(2)	129.24
C(5)-F(1)	132.53
C(1)-Mn(1)-C(2)	82.86(14)
C(1)-Mn(1)-C(4)	111.33(13)
C(2)-Mn(1)-C(4)	75.60(9)
C(1)-Mn(1)-C(3)	84.62(14)
C(2)-Mn(1)-C(3)	110.52(11)
C(4)-Mn(1)-C(3)	47.49(9)
O(1)-C(1)-Mn(1)	171.88(16)
O(2)-C(2)-Mn(1)	163.91(8)
C(4)-C(3)-Mn(1)	60.64(7)
C(4)-C(3)-H(1)	117.7
Mn(1)-C(3)-H(1)	117.7

C(4)-C(3)-H(2)	117.7
Mn(1)-C(3)-H(2)	117.7
H(1)-C(3)-H(2)	114.8
C(5)-C(4)-C(3)	145.87
C(5)-C(4)-Mn(1)	141.90(12)
C(3)-C(4)-Mn(1)	71.87(13)
F(2)-C(5)-F(1)	107.4
F(2)-C(5)-C(4)	128.5
F(1)-C(5)-C(4)	122.7

Tab. 18. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **2**. Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^2 U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Mn(1)	49(1)	86(1)	59(1)	-1(1)	2(1)	0(1)
C(1R)	44(6)	95(10)	121(12)	-21(9)	7(7)	-6(6)
C(2R)	25(4)	140(12)	124(12)	42(10)	-2(6)	-6(6)
C(3R)	51(4)	219(12)	58(4)	-13(14)	6(3)	30(12)
C(4R)	101(10)	98(9)	118(12)	-67(9)	33(9)	-20(8)
C(5R)	57(6)	87(8)	51(6)	4(5)	-1(5)	-4(6)
C(1M)	147(14)	132(12)	115(12)	-24(9)	10(11)	-57(10)
C(2M)	116(13)	183(19)	370(30)	190(20)	-20(16)	-44(12)
C(3M)	96(7)	610(40)	52(5)	-40(20)	25(5)	-130(20)
C(4M)	102(11)	189(19)	202(18)	-90(15)	56(11)	5(11)
C(5M)	65(7)	192(16)	193(18)	128(14)	-26(9)	-15(8)
C(1)	64(4)	198(10)	68(4)	-2(12)	4(4)	-47(10)
O(1)	84(4)	472(19)	75(4)	-57(13)	-16(4)	76(13)
C(2)	121(11)	61(6)	159(13)	46(7)	24(9)	48(7)
O(2)	185(11)	149(9)	160(9)	26(7)	61(8)	74(8)
C(3)	77(8)	213(16)	78(8)	-26(9)	-24(6)	67(9)
C(4)	70(5)	108(7)	97(7)	20(5)	5(5)	1(4)
C(5)	89(6)	270(17)	79(6)	-106(11)	50(5)	-104(10)
F(1)	212(10)	192(8)	108(6)	18(6)	30(6)	-31(7)
F(2)	262(13)	167(8)	95(5)	-40(5)	-46(7)	1(8)

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

	x	y	z	U(eq)
H(1M1)	1988	6045	811	197
H(1M2)	2921	6935	-157	197
H(1M3)	619	6897	-34	197
H(2M1)	2431	5550	3040	337
H(2M2)	1529	5881	4539	337
H(2M3)	3830	5919	4415	337
H(3M1)	2851	8834	6283	377
H(3M2)	4066	7766	6239	377
H(3M3)	1765	7728	6363	377
H(4M1)	2516	10174	4889	243
H(4M2)	1077	10476	3502	243

H(4M3)	3378	10514	3378	243
H(5M1)	1750	10064	745	228
H(5M2)	486	9156	-71	228
H(5M3)	2787	9194	-194	228
H(1)	5655	10169	2051	149
H(2)	7755	9642	2705	149

Tab. 20. Torsionswinkel [°] für **2**.

C(1)-Mn(1)-C(3)-C(4)	125.60(13)
C(2)-Mn(1)-C(3)-C(4)	45.30(7)
Mn(1)-C(3)-C(4)-C(5)	172.35(9)
C(1)-Mn(1)-C(4)-C(5)	126.62(14)
C(2)-Mn(1)-C(4)-C(5)	50.39(14)
C(3)-Mn(1)-C(4)-C(5)	-173.03(9)
C(1)-Mn(1)-C(4)-C(3)	-60.4(2)
C(2)-Mn(1)-C(4)-C(3)	-136.58(7)
C(3)-C(4)-C(5)-F(2)	172.9
Mn(1)-C(4)-C(5)-F(2)	-18.90(15)
C(3)-C(4)-C(5)-F(1)	8.4
Mn(1)-C(4)-C(5)-F(1)	176.60(15)

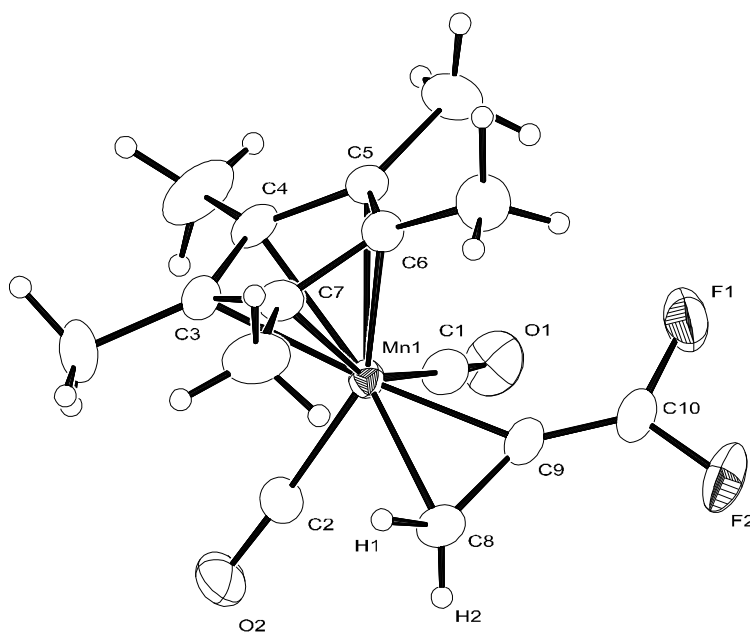


Abbildung 3: ORTEP-Darstellung der Struktur von **2a** im Kristall

Tab. 21. Kristall- und Strukturdaten von **2a**.

Identifikationscode	mnall3
Diffraktometer	Stoe-Vierkreisdiffraktometer
Farbe	gelb
Summenformel	C ₁₅ H ₁₇ F ₂ Mn O ₂
Molmasse	322.23 g/mol
Messtemperatur	293(2) K
Wellenlänge	71.069 pm

Kristallsystem	Monoklin	
Raumgruppe	P2 ₁ /n	
Zelldimensionen	a = 1082.2(3) pm	$\alpha = 90^\circ$.
	b = 1030.3(3) pm	$\beta = 90.86(3)^\circ$.
	c = 1331.4(4) pm	$\gamma = 90^\circ$.
Volumen	1.4843(7) nm ³	
Z	4	
Dichte (berechnet)	1.442 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	0.908 mm ⁻¹	
Absorptionskorrektur	Keine	
F(000)	664	
Kristalldimensionen	0.85 x 0.3 x 0.12 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	2.44 bis 27.00°.	
Bereich der Indizes	-13<=h<=13, -13<=k<=13, -17<=l<=0	
Anzahl gemessene Reflexe	6534	
unabhängige Reflexe	3226 [R(int) = 0.0590]	
Vollständigkeit zu Theta = 27.00°	99.7 %	
Reflexe verwendet >2sigma(I)°	2222	
Methode der Strukturverfeinerung	Methode der kleinsten Fehlerquadrate F ²	
Reflexe / unterdrückt / Parameter	3226 / 0 / 189	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.096	
Endgültiger Fehler R [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0653, wR2 = 0.1893	
R (alle Daten)	R1 = 0.1038, wR2 = 0.2121	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.990 und -0.514 x 10 ⁻⁶ e pm ⁻³	

Tab. 22. Atomkoordinaten (x 10⁴) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren (pm²x 10⁻¹) für **2a**. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Mn(1)	-70(1)	1314(1)	7243(1)	36(1)
C(1)	-843(6)	693(6)	8315(4)	52(1)
C(2)	413(6)	-289(5)	6982(5)	57(1)
C(3)	1804(5)	1932(5)	7022(4)	47(1)
C(4)	1474(5)	2077(5)	8052(4)	49(1)
C(5)	484(5)	2996(5)	8074(4)	48(1)
C(6)	208(5)	3381(5)	7082(4)	46(1)
C(7)	1020(5)	2734(5)	6437(4)	47(1)
C(8)	-1219(6)	917(8)	5965(5)	62(2)
C(9)	-1802(5)	1565(6)	6746(4)	49(1)
C(10)	-2836(5)	2065(7)	7004(5)	60(2)
C(31)	2857(6)	1171(7)	6634(8)	82(2)
C(41)	2113(9)	1474(9)	8934(6)	96(3)
C(51)	-109(9)	3542(8)	9012(6)	84(2)
C(61)	-696(7)	4415(6)	6760(7)	81(2)
C(71)	1104(9)	2958(8)	5320(5)	81(2)
O(1)	-1302(5)	320(6)	9021(4)	85(2)
O(2)	783(5)	-1326(4)	6787(6)	88(2)
F(1)	-3053(4)	2637(5)	7881(4)	89(1)
F(2)	-3880(4)	2114(5)	6456(4)	91(2)

Tab. 23. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **2a**.

Mn(1)-C(2)	176.8(6)
Mn(1)-C(1)	178.3(6)
Mn(1)-C(9)	199.5(5)
Mn(1)-C(4)	212.5(5)
Mn(1)-C(8)	213.2(7)
Mn(1)-C(5)	213.8(5)
Mn(1)-C(3)	215.0(5)
Mn(1)-C(6)	216.2(5)
Mn(1)-C(7)	217.3(5)
C(1)-O(1)	113.7(7)
C(2)-O(2)	117.2(7)
C(3)-C(7)	141.0(8)
C(3)-C(4)	143.0(8)
C(3)-C(31)	148.3(8)
C(4)-C(5)	143.0(8)
C(4)-C(41)	149.1(8)
C(5)-C(6)	140.7(8)
C(5)-C(51)	152.0(8)
C(6)-C(7)	140.6(8)
C(6)-C(61)	150.5(9)
C(7)-C(71)	150.9(8)
C(8)-C(9)	139.4(9)
C(8)-H(1)	115(6)
C(8)-H(2)	82(9)
C(9)-C(10)	128.4(8)
C(10)-F(1)	133.2(8)
C(10)-F(2)	133.7(7)
C(2)-Mn(1)-C(1)	88.1(3)
C(2)-Mn(1)-C(9)	109.6(3)
C(1)-Mn(1)-C(9)	82.1(3)
C(2)-Mn(1)-C(4)	102.3(3)
C(1)-Mn(1)-C(4)	95.9(2)
C(9)-Mn(1)-C(4)	148.0(2)
C(2)-Mn(1)-C(8)	80.5(3)
C(1)-Mn(1)-C(8)	107.1(3)
C(9)-Mn(1)-C(8)	39.3(3)
O(1)-C(1)-Mn(1)	177.3(6)
O(2)-C(2)-Mn(1)	176.8(6)
C(9)-C(8)-Mn(1)	65.0(3)
C(9)-C(8)-H(1)	128(3)
Mn(1)-C(8)-H(1)	99(3)
C(9)-C(8)-H(2)	122(7)
Mn(1)-C(8)-H(2)	125(7)
H(1)-C(8)-H(2)	108(7)
C(10)-C(9)-C(8)	142.9(6)
C(10)-C(9)-Mn(1)	141.4(5)
C(8)-C(9)-Mn(1)	75.7(4)
C(9)-C(10)-F(1)	125.3(6)
C(9)-C(10)-F(2)	127.0(7)
F(1)-C(10)-F(2)	107.6(5)

Tab. 24. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **2a**. Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^*^2 U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂
Mn(1)	33(1)	36(1)	39(1)	2(1)	3(1)	-1(1)
C(1)	54(3)	53(3)	50(3)	7(2)	2(3)	-11(3)
C(2)	51(3)	38(3)	81(4)	1(3)	5(3)	1(2)
C(3)	37(2)	43(3)	63(3)	4(2)	7(2)	-9(2)
C(4)	45(3)	52(3)	50(3)	12(2)	-11(2)	-17(2)
C(5)	45(3)	50(3)	48(3)	-9(2)	12(2)	-16(2)
C(6)	46(3)	34(2)	59(3)	2(2)	5(2)	-5(2)
C(7)	55(3)	43(3)	43(3)	3(2)	3(2)	-10(2)
C(8)	58(4)	73(4)	57(3)	-16(3)	-8(3)	-8(3)
C(9)	37(2)	56(3)	55(3)	8(2)	-5(2)	-5(2)
C(10)	37(3)	69(4)	74(4)	10(3)	-2(3)	-3(3)
C(31)	48(3)	73(5)	126(7)	0(4)	29(4)	9(3)
C(41)	99(6)	106(6)	83(5)	48(5)	-47(5)	-40(5)
C(51)	102(6)	87(5)	65(4)	-29(4)	28(4)	-20(5)
C(61)	80(5)	43(3)	121(7)	15(4)	-3(5)	4(3)
C(71)	112(6)	81(5)	49(3)	8(3)	8(4)	-36(5)
O(1)	89(4)	103(4)	64(3)	28(3)	18(3)	-22(3)
O(2)	76(3)	49(3)	139(5)	-13(3)	16(4)	8(2)
F(1)	63(3)	107(3)	98(3)	-9(3)	19(2)	19(2)
F(2)	41(2)	113(4)	120(4)	24(3)	-17(2)	2(2)

Tab. 25. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **2a**.

	x	y	z	U(eq)
H(31A)	2866	1230	5914	123
H(31B)	2772	279	6829	123
H(31C)	3617	1512	6906	123
H(41A)	1708	1731	9539	144
H(41B)	2959	1756	8961	144
H(41C)	2085	546	8872	144
H(51A)	252	3137	9596	126
H(51B)	-981	3370	8990	126
H(51C)	27	4461	9043	126
H(61A)	-726	4463	6040	122
H(61B)	-438	5237	7030	122
H(61C)	-1502	4204	7005	122
H(71A)	1733	2408	5049	121
H(71B)	1308	3850	5195	121
H(71C)	323	2758	5004	121
H(1)	-610(50)	1350(50)	5350(40)	42(15)
H(2)	-1440(90)	200(90)	5780(70)	110(30)

Tab. 26. Torsionswinkel [°] für **2a**.

C(1)-Mn(1)-C(8)-C(9)	52.8(5)
Mn(1)-C(8)-C(9)-C(10)	178.6(10)
C(2)-Mn(1)-C(9)-C(10)	136.6(8)
C(1)-Mn(1)-C(9)-C(10)	51.5(8)
C(8)-Mn(1)-C(9)-C(10)	-178.7(10)
C(2)-Mn(1)-C(9)-C(8)	-44.7(5)
C(1)-Mn(1)-C(9)-C(8)	-129.8(5)
C(8)-C(9)-C(10)-F(1)	179.7(8)
Mn(1)-C(9)-C(10)-F(1)	-2.4(12)
C(8)-C(9)-C(10)-F(2)	-0.5(15)
Mn(1)-C(9)-C(10)-F(2)	177.4(5)

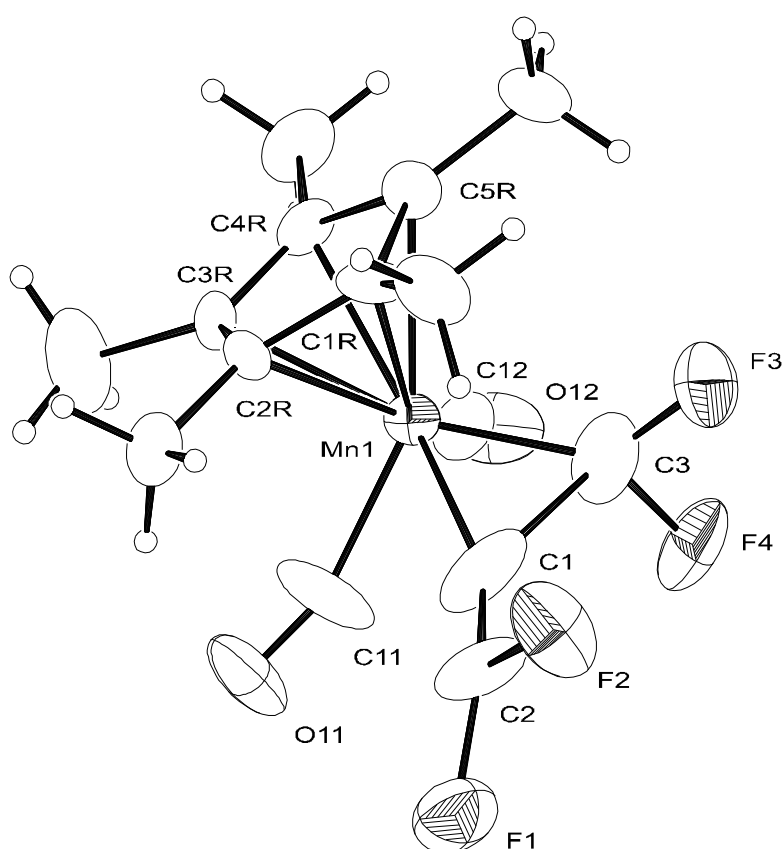


Abbildung 4: ORTEP-Darstellung der Struktur von **3** im Kristall

Tab. 27. Kristall- und Strukturdaten von **3**.

Identifikationscode	mnf4
Diffraktometer	Stoe-Vierkreisdiffraktometer
Farbe	gelb
Summenformel	C ₁₅ H ₁₅ F ₄ Mn O ₂
Molmasse	358.21 g/mol
Messtemperatur	293(2) K
Wellenlänge	71.069 pm
Kristallsystem	Orthorhombisch
Raumgruppe	P2 ₁ cn

Zelldimensionen	a = 1234.1(5) pm b = 744.9(2) pm c = 1706.4(6) pm	$\alpha = 90^\circ$. $\beta = 90^\circ$. $\gamma = 90^\circ$.
Volumen	1.5687(9) nm ³	
Z	4	
Dichte (berechnet)	1.517 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	0.886 mm ⁻¹	
Absorptionskorrektur	Keine	
F(000)	728	
Kristalldimensionen	0.5 x 0.4 x 0.1 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	2.39 bis 25.00°.	
Bereich der Indizes	-8<=h<=14, -8<=k<=8, -20<=l<=17	
Anzahl gemessene Reflexe	3722	
unabhängige Reflexe	1981 [R(int) = 0.0356]	
Vollständigkeit zu Theta = 25.00°	100.0 %	
Reflexe >2sigma(I)°	1142	
Methode der Strukturverfeinerung	Methode der kleinsten Fehlerquadrate F ²	
Reflexe / unterdrückt / Parameter	1981 / 1 / 199	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.026	
Endgültiger Fehler R [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0529, wR2 = 0.1337	
R (alle Daten)	R1 = 0.1169, wR2 = 0.1686	
Absol. Strukturparameter (Flack-Par.)	0.38(7)	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.556 und -0.241 × 10 ⁻⁶ e pm ⁻³	

Tab. 28. Atomkoordinaten (x 10⁴) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren (pm²x 10⁻¹) für **3**. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Mn(1)	2034(2)	1143(2)	8571(1)	62(1)
C(1R)	2636(15)	3230(20)	9343(8)	76(5)
C(2R)	1472(13)	3220(20)	9307(8)	59(4)
C(3R)	1134(15)	3510(30)	8574(8)	67(5)
C(4R)	1956(19)	3753(11)	8081(4)	70(3)
C(5R)	2980(20)	3660(20)	8532(8)	76(6)
C(1M)	3274(16)	3070(30)	10092(7)	102(6)
C(2M)	699(16)	3060(20)	9980(9)	99(6)
C(3M)	-75(18)	3810(40)	8245(15)	159(12)
C(4M)	1940(30)	4352(14)	7232(5)	115(5)
C(5M)	4138(15)	3830(20)	8328(11)	98(6)
C(11)	770(20)	-180(50)	8712(12)	150(11)
C(12)	1990(20)	331(12)	7591(5)	86(3)
C(1)	2160(30)	-671(14)	9349(6)	151(9)
C(2)	1971(18)	-1458(14)	10023(8)	126(6)
C(3)	3210(20)	-480(30)	8698(9)	120(8)
F(1)	1287(11)	-2793(14)	10312(6)	157(4)
F(2)	2785(9)	-1317(19)	10452(5)	166(5)
F(3)	4236(11)	-280(20)	8807(10)	159(6)
F(4)	3291(11)	-2161(11)	8318(5)	158(4)
O(11)	-69(11)	-530(30)	8796(8)	153(8)
O(12)	1955(17)	-159(11)	6955(4)	138(4)

Tab. 29. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **3**.

Mn(1)-C(12)	178.0(8)
Mn(1)-C(11)	186(2)
Mn(1)-C(1)	190.0(10)
Mn(1)-C(3)	190(3)
Mn(1)-C(3R)	208.2(17)
Mn(1)-C(2R)	211.0(16)
Mn(1)-C(4R)	211.8(8)
Mn(1)-C(1R)	217.0(16)
Mn(1)-C(5R)	221.4(19)
C(1R)-C(2R)	143.8(14)
C(1R)-C(5R)	148.4(18)
C(1R)-C(1M)	151(2)
C(2R)-C(3R)	133.5(18)
C(2R)-C(2M)	150(2)
C(3R)-C(4R)	133(2)
C(3R)-C(3M)	161(3)
C(4R)-C(5R)	149(3)
C(4R)-C(4M)	151.7(11)
C(5R)-C(5M)	147(3)
C(11)-O(11)	107(2)
C(12)-O(12)	114.5(9)
C(1)-C(2)	131.1(18)
C(1)-C(3)	172(4)
C(2)-F(2)	124.7(17)
C(2)-F(1)	139.4(19)
C(3)-F(3)	129(3)
C(3)-F(4)	141(2)
C(12)-Mn(1)-C(11)	85.1(10)
C(12)-Mn(1)-C(1)	114.7(5)
C(11)-Mn(1)-C(1)	66.5(14)
C(12)-Mn(1)-C(3)	85.2(8)
C(11)-Mn(1)-C(3)	106.9(10)
C(1)-Mn(1)-C(3)	53.6(12)
O(11)-C(11)-Mn(1)	162(3)
O(12)-C(12)-Mn(1)	178.7(10)
C(2)-C(1)-C(3)	137(3)
C(2)-C(1)-Mn(1)	156.5(19)
C(3)-C(1)-Mn(1)	63.3(9)
F(2)-C(2)-C(1)	110(2)
F(2)-C(2)-F(1)	109.9(10)
C(1)-C(2)-F(1)	137.3(17)
F(3)-C(3)-F(4)	95.9(18)
F(3)-C(3)-C(1)	131.4(16)
F(4)-C(3)-C(1)	106.1(19)
F(3)-C(3)-Mn(1)	134(2)
F(4)-C(3)-Mn(1)	124.3(17)
C(1)-C(3)-Mn(1)	63.1(11)

Tab. 30. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **3**. Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^2 U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂
Mn(1)	75(1)	66(1)	46(1)	-3(1)	1(2)	-6(2)
C(1R)	110(15)	67(10)	51(8)	-3(7)	7(9)	-40(10)
C(2R)	48(9)	68(11)	60(9)	-10(8)	14(8)	-7(8)
C(3R)	56(11)	80(11)	66(10)	23(7)	4(8)	25(9)
C(4R)	93(9)	57(4)	60(4)	8(4)	-21(11)	10(10)
C(5R)	89(15)	79(12)	61(10)	-16(7)	10(9)	-5(10)
C(1M)	96(13)	160(15)	50(6)	8(8)	-14(7)	-28(12)
C(2M)	109(15)	98(11)	91(10)	-29(9)	17(9)	25(11)
C(3M)	100(20)	250(30)	132(15)	-26(18)	-24(15)	45(18)
C(4M)	175(16)	104(7)	65(5)	24(5)	16(13)	28(16)
C(5M)	87(15)	115(13)	91(10)	19(9)	5(9)	-34(11)
C(11)	107(18)	240(30)	100(14)	3(14)	30(13)	-99(19)
C(12)	113(9)	83(5)	61(5)	-4(4)	-18(11)	17(15)
C(1)	290(30)	77(7)	81(7)	9(5)	20(20)	50(20)
C(2)	173(15)	73(6)	131(10)	41(7)	-125(13)	-29(12)
C(3)	170(20)	134(15)	61(9)	-43(9)	-10(11)	47(15)
F(1)	188(10)	128(7)	157(8)	41(6)	2(7)	4(8)
F(2)	116(8)	281(14)	101(6)	38(8)	-26(5)	-4(10)
F(3)	90(10)	170(11)	217(13)	27(10)	-18(9)	27(9)
F(4)	223(11)	104(6)	147(7)	-20(5)	11(7)	74(7)
O(11)	66(9)	270(20)	122(9)	98(11)	6(7)	-16(11)
O(12)	210(11)	138(6)	65(4)	-38(4)	6(10)	-60(14)

Tab. 31. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **3**.

	x	y	z	U(eq)
H(1M1)	4033	3175	9979	153
H(1M2)	3132	1927	10329	153
H(1M3)	3062	4011	10446	153
H(2M1)	1098	2869	10456	149
H(2M2)	220	2066	9892	149
H(2M3)	283	4146	10024	149
H(3M1)	-590	3542	8650	239
H(3M2)	-197	3037	7805	239
H(3M3)	-158	5040	8085	239
H(4M1)	2665	4454	7040	172
H(4M2)	1582	5496	7194	172
H(4M3)	1548	3485	6924	172
H(5M1)	4206	4123	7783	146
H(5M2)	4500	2715	8432	146
H(5M3)	4461	4765	8638	146

Tab. 32. Torsionswinkel [°] für **3**.

C(12)-Mn(1)-C(1)-C(2)	-142(6)
C(11)-Mn(1)-C(1)-C(2)	-69(6)
C(3)-Mn(1)-C(1)-C(2)	155(7)
C(12)-Mn(1)-C(1)-C(3)	63.1(17)
C(11)-Mn(1)-C(1)-C(3)	135.5(10)
C(3)-C(1)-C(2)-F(2)	40(3)
Mn(1)-C(1)-C(2)-F(2)	-106(6)
C(3)-C(1)-C(2)-F(1)	-117(4)
Mn(1)-C(1)-C(2)-F(1)	97(5)
C(2)-C(1)-C(3)-F(3)	-40(4)
Mn(1)-C(1)-C(3)-F(3)	126(3)
C(2)-C(1)-C(3)-F(4)	73(3)
Mn(1)-C(1)-C(3)-F(4)	-120.8(15)
C(2)-C(1)-C(3)-Mn(1)	-166(2)
C(12)-Mn(1)-C(3)-F(3)	111.7(19)
C(11)-Mn(1)-C(3)-F(3)	-165(2)
C(1)-Mn(1)-C(3)-F(3)	-123(2)
C(12)-Mn(1)-C(3)-F(4)	-33.9(18)
C(11)-Mn(1)-C(3)-F(4)	49.5(18)
C(1)-Mn(1)-C(3)-F(4)	92(2)
C(12)-Mn(1)-C(3)-C(1)	-125.6(13)
C(11)-Mn(1)-C(3)-C(1)	-42.2(11)

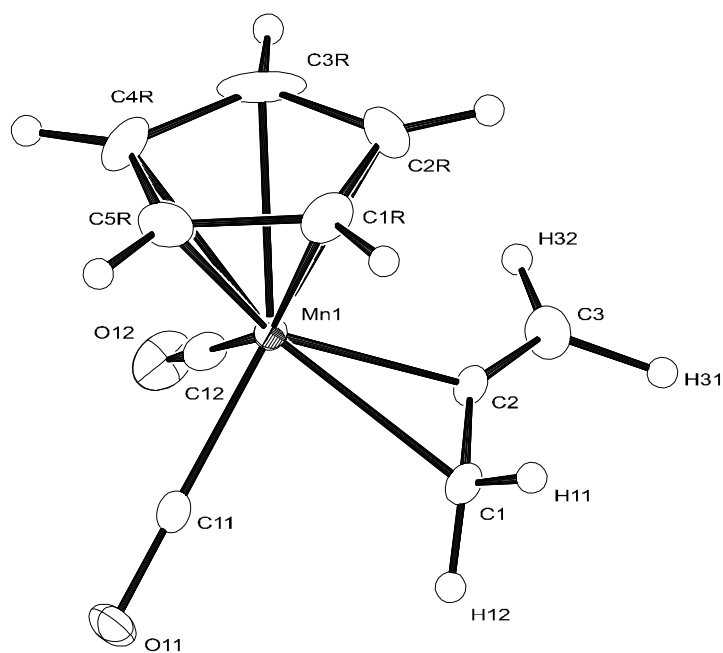


Abbildung 5: ORTEP-Darstellung der Struktur von **4** im Kristall

Tab. 33. Kristall- und Strukturdaten von **4**.

Identifikationscode	mnh
Diffraktometer	Nonius-Enraf CAD4
Farbe	gelb
Summenformel	C ₁₀ H ₉ Mn O ₂
Molmasse	216.11 g/mol

Messtemperatur	133 K	
Wellenlänge	71.069 pm	
Kristallsystem	Monoklin	
Raumgruppe	P2 ₁ /n	
Zelldimensionen	a = 1032.1(2) pm	$\alpha = 90^\circ$.
	b = 739.7(2) pm	$\beta = 99.10(2)^\circ$.
	c = 2388.5(4) pm	$\gamma = 90^\circ$.
Volumen	1.8005(7) nm ³	
Z	8	
Dichte (berechnet)	1.594 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	1.424 mm ⁻¹	
F(000)	880	
Kristalldimensionen	0.3 x 0.2 x 0.1 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	2.89 bis 24.97°.	
Bereich der Indizes	-12<=h<=12, -8<=k<=0, 0<=l<=28	
Anzahl gemessene Reflexe	3238	
unabhängige Reflexe	3159 [R(int) = 0.0461]	
Vollständigkeit zu Theta = 24.97°	99.9 %	
Reflexe >2sigma(I)°	2140	
Methode der Strukturverfeinerung	Methode der kleinsten Fehlerquadrate F ²	
Reflexe / unterdrückt / Parameter	3159 / 0 / 250	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.099	
Endgültiger Fehler R [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0535, wR2 = 0.1422	
R (alle Daten)	R1 = 0.0964, wR2 = 0.1621	
Größte und kleinste Restelektronendichte	1.709 und -0.951 x 10 ⁻⁶ e pm ⁻³	

Tab. 34. Atomkoordinaten (x 10⁴) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren (pm²x 10⁻¹) für 4. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Mn(1)	1964(1)	2018(1)	1129(1)	15(1)
C(11)	1538(5)	71(7)	688(2)	18(1)
O(11)	1275(4)	-1166(5)	409(2)	30(1)
C(12)	3477(5)	2138(7)	858(2)	23(1)
O(12)	4449(4)	2244(6)	685(2)	40(1)
C(1R)	206(4)	3001(5)	1418(2)	30(1)
C(2R)	1310(4)	4034(6)	1665(1)	38(2)
C(3R)	1855(3)	4866(5)	1220(2)	47(2)
C(4R)	1089(4)	4348(6)	698(2)	38(2)
C(5R)	69(4)	3196(6)	820(2)	35(1)
C(2)	3228(5)	1222(7)	1826(2)	21(1)
C(3)	4324(6)	1846(9)	2123(2)	31(1)
C(1)	2234(6)	-41(8)	1765(2)	24(1)

Tab. 35. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für 4.

Mn(1)-C(12)	178.4(5)
Mn(1)-C(11)	179.8(5)
Mn(1)-C(2)	203.2(5)
Mn(1)-C(3R)	212.3(4)
Mn(1)-C(4R)	213.5(4)
Mn(1)-C(1)	213.8(5)

Mn(1)-C(2R)	214.3(4)
Mn(1)-C(5R)	216.1(4)
Mn(1)-C(1R)	216.6(4)
C(11)-O(11)	113.8(6)
C(12)-O(12)	114.7(7)
C(2)-C(3)	132.0(8)
C(2)-C(1)	137.8(8)
C(3)-H(31)	108(6)
C(3)-H(32)	92(8)
C(1)-H(12)	90(6)
C(1)-H(11)	100(6)
C(12)-Mn(1)-C(11)	88.5(2)
C(12)-Mn(1)-C(2)	80.0(2)
C(11)-Mn(1)-C(2)	108.3(2)
C(12)-Mn(1)-C(1)	105.7(2)
C(11)-Mn(1)-C(1)	80.7(2)
C(2)-Mn(1)-C(1)	38.5(2)
O(11)-C(11)-Mn(1)	179.6(5)
O(12)-C(12)-Mn(1)	178.9(5)
C(3)-C(2)-C(1)	148.6(5)
C(3)-C(2)-Mn(1)	136.4(5)
C(1)-C(2)-Mn(1)	74.9(3)
C(2)-C(3)-H(31)	121(4)
C(2)-C(3)-H(32)	128(5)
H(31)-C(3)-H(32)	111(6)
C(2)-C(1)-Mn(1)	66.6(3)
C(2)-C(1)-H(12)	124(4)
Mn(1)-C(1)-H(12)	119(3)
C(2)-C(1)-H(11)	125(3)
Mn(1)-C(1)-H(11)	120(3)
H(12)-C(1)-H(11)	101(5)

Tab. 36. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **4**. Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^*^2 U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Mn(1)	14(1)	16(1)	15(1)	1(1)	4(1)	2(1)
C(11)	17(2)	22(3)	17(2)	4(2)	3(2)	2(2)
O(11)	35(2)	26(2)	27(2)	-11(2)	1(2)	-3(2)
C(12)	25(3)	18(3)	27(3)	3(2)	4(2)	3(2)
O(12)	27(2)	44(3)	52(3)	12(2)	21(2)	7(2)
C(1R)	24(3)	32(3)	39(3)	10(3)	16(2)	9(3)
C(2R)	43(4)	42(4)	26(3)	-13(3)	-4(3)	22(3)
C(3R)	22(3)	14(3)	107(6)	-8(3)	16(4)	2(2)
C(4R)	48(4)	38(4)	34(3)	19(3)	25(3)	27(3)
C(5R)	27(3)	31(3)	41(3)	-9(3)	-9(3)	14(3)
C(2)	25(3)	20(3)	17(2)	5(2)	-1(2)	4(2)
C(3)	26(3)	36(3)	28(3)	-1(3)	-3(2)	-7(3)
C(1)	30(3)	21(3)	20(3)	6(2)	-1(2)	-2(2)

Tab. 37. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **4**.

	x	y	z	U(eq)
H(1R)	-333	2318	1613	37
H(2R)	1621	4145	2051	46
H(3R)	2586	5619	1263	56
H(4R)	1229	4702	338	46
H(5R)	-575	2662	555	42
H(31)	4740(60)	1230(100)	2520(20)	42(18)
H(32)	4820(80)	2820(110)	2040(30)	60(20)
H(12)	2340(50)	-1200(90)	1660(20)	23(15)
H(11)	1570(60)	-190(80)	2030(20)	31(16)

Tab. 38. Torsionswinkel [°] für **4**.

C(12)-Mn(1)-C(2)-C(3)	51.7(6)
C(11)-Mn(1)-C(2)-C(3)	136.8(6)
C(1)-Mn(1)-C(2)-C(3)	-176.7(8)
C(12)-Mn(1)-C(2)-C(1)	-131.5(4)
C(11)-Mn(1)-C(2)-C(1)	-46.5(4)
C(3)-C(2)-C(1)-Mn(1)	175.7(11)
C(12)-Mn(1)-C(1)-C(2)	50.0(4)
C(11)-Mn(1)-C(1)-C(2)	135.8(4)

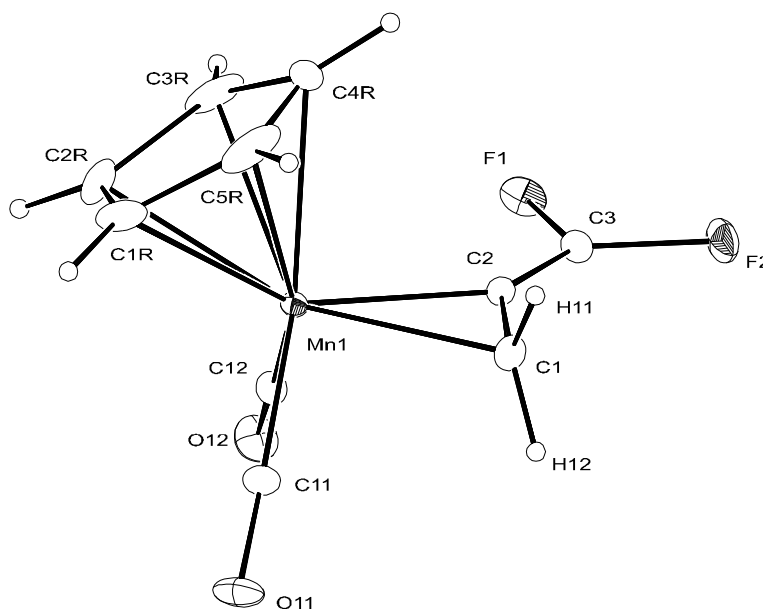


Abbildung 6: ORTEP-Darstellung der Struktur von **5** im Kristall

Tab. 39. Kristall- und Strukturdaten von **5**.

Identifikationscode	mnf2_psi	
Diffraktometer	Nonius-Enraf CAD4	
Farbe	gelb	
Summenformel	C ₁₀ H ₇ F ₂ Mn O ₂	
Molmasse	252.10 g/mol	
Messtemperatur	113(2) K	
Wellenlänge	71.069 pm	
Kristallsystem	Triklin	
Raumgruppe	P-1	
Zelldimensionen	a = 668.25(5) pm	$\alpha = 90.633(9)^\circ$.
	b = 817.76(6) pm	$\beta = 96.430(9)^\circ$.
	c = 900.73(14) pm	$\gamma = 104.234(7)^\circ$.
Volumen	0.47373(9) nm ³	
Z	2	
Dichte (berechnet)	1.767 Mg/m ³	
Zerfall während der Messung	2%	
Absorptionskoeffizient	1.396 mm ⁻¹	
Absorptionskorrektur	Psi-scan [115]	
Max. und min. Transmission	0.96467 und 0.75970	
F(000)	252	
Kristalldimensionen	0.3 x 0.2 x 0.1 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	3.17 bis 29.96°.	
Bereich der Indizes	0<=h<=9, -11<=k<=11, -12<=l<=12	
Anzahl gemessene Reflexe	2974	
unabhängige Reflexe	2755 [R(int) = 0.0214]	
Vollständigkeit zu Theta = 29.96°	99.9 %	
Reflexe >2sigma(I)°	2397	
Methode der Strukturverfeinerung	Methode der kleinsten Fehlerquadrate F ²	
Reflexe / unterdrückt / Parameter	2755 / 0 / 164	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.077	
Endgültiger Fehler R [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0318, wR2 = 0.0761	
R (alle Daten)	R1 = 0.0440, wR2 = 0.0801	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.665 und -0.426 x 10 ⁻⁶ e pm ⁻³	

Tab. 40. Atomkoordinaten (x 10⁴) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren (pm²x 10⁻¹) für **5**. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Mn(1)	2746(1)	3008(1)	2638(1)	15(1)
C(11)	2256(3)	5035(2)	2973(2)	24(1)
C(12)	5468(3)	3977(2)	2872(2)	24(1)
C(1)	1552(3)	3464(3)	424(2)	24(1)
C(2)	3253(3)	2762(2)	520(2)	19(1)
C(3)	4487(3)	2217(2)	-260(2)	23(1)
C(1R)	972(5)	2077(3)	4411(4)	50(1)
C(2R)	2888(5)	1700(4)	4648(3)	47(1)
C(3R)	3015(5)	640(4)	3459(4)	52(1)
C(4R)	1210(7)	388(3)	2513(3)	57(1)
C(5R)	-67(4)	1256(4)	3087(4)	56(1)
O(11)	1940(3)	6322(2)	3207(2)	36(1)
O(12)	7230(2)	4560(2)	3028(2)	38(1)
F(1)	6150(2)	1673(2)	288(2)	33(1)
F(2)	4332(2)	2084(2)	-1755(1)	37(1)

Tab. 41. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für 5.

Mn(1)-C(12)	178.4(2)
Mn(1)-C(11)	179.54(19)
Mn(1)-C(2)	199.14(18)
Mn(1)-C(2R)	211.8(2)
Mn(1)-C(3R)	212.2(2)
Mn(1)-C(1R)	213.1(2)
Mn(1)-C(4R)	213.2(2)
Mn(1)-C(1)	213.5(2)
Mn(1)-C(5R)	214.7(2)
C(11)-O(11)	114.5(2)
C(12)-O(12)	114.9(2)
C(1)-C(2)	138.9(3)
C(1)-H(12)	94(3)
C(1)-H(11)	95(3)
C(2)-C(3)	129.4(3)
C(3)-F(2)	134.1(2)
C(3)-F(1)	134.2(2)
C(1R)-C(2R)	138.3(5)
C(1R)-C(5R)	138.7(5)
C(1R)-H(1)	88(4)
C(2R)-C(3R)	139.4(5)
C(2R)-H(2)	95(4)
C(3R)-C(4R)	136.6(5)
C(3R)-H(3)	90(4)
C(4R)-C(5R)	137.4(5)
C(4R)-H(4)	90(4)
C(5R)-H(5)	100(5)
C(12)-Mn(1)-C(11)	89.23(9)
C(12)-Mn(1)-C(2)	82.30(8)
C(11)-Mn(1)-C(2)	109.97(8)
C(12)-Mn(1)-C(1)	107.54(9)
C(11)-Mn(1)-C(1)	80.68(9)
C(2)-Mn(1)-C(1)	39.15(7)
O(11)-C(11)-Mn(1)	179.01(19)
O(12)-C(12)-Mn(1)	178.26(19)
C(2)-C(1)-Mn(1)	64.84(10)
C(2)-C(1)-H(12)	119.1(17)
Mn(1)-C(1)-H(12)	117.6(17)
C(2)-C(1)-H(11)	121.9(17)
Mn(1)-C(1)-H(11)	111.3(17)
H(12)-C(1)-H(11)	113(2)
C(3)-C(2)-C(1)	143.83(19)
C(3)-C(2)-Mn(1)	140.15(16)
C(1)-C(2)-Mn(1)	76.01(11)
C(2)-C(3)-F(2)	126.38(19)
C(2)-C(3)-F(1)	126.00(18)
F(2)-C(3)-F(1)	107.62(16)

Tab. 42. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **5**. Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^2 U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Mn(1)	16(1)	14(1)	17(1)	0(1)	2(1)	4(1)
C(11)	20(1)	19(1)	32(1)	0(1)	10(1)	3(1)
C(12)	24(1)	24(1)	22(1)	-1(1)	1(1)	6(1)
C(1)	22(1)	28(1)	22(1)	4(1)	0(1)	9(1)
C(2)	20(1)	18(1)	19(1)	2(1)	2(1)	3(1)
C(3)	22(1)	23(1)	23(1)	-2(1)	5(1)	3(1)
C(1R)	81(2)	22(1)	59(2)	10(1)	55(2)	13(1)
C(2R)	51(2)	47(1)	28(1)	19(1)	-9(1)	-13(1)
C(3R)	64(2)	37(1)	77(2)	36(1)	45(2)	33(1)
C(4R)	110(3)	20(1)	26(1)	-3(1)	16(2)	-17(1)
C(5R)	24(1)	55(2)	79(2)	45(2)	-4(1)	-8(1)
O(11)	36(1)	18(1)	59(1)	-3(1)	20(1)	7(1)
O(12)	19(1)	47(1)	43(1)	-3(1)	-2(1)	1(1)
F(1)	22(1)	33(1)	48(1)	-6(1)	7(1)	12(1)
F(2)	43(1)	43(1)	23(1)	-5(1)	15(1)	3(1)

Tab. 43. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **5**.

	x	y	z	U(eq)
H(12)	1720(40)	4590(40)	160(30)	34(7)
H(11)	160(40)	2800(30)	170(30)	33(7)
H(2)	3950(70)	2040(50)	5460(50)	79(12)
H(5)	-1470(80)	1390(60)	2690(60)	105(16)
H(1)	470(60)	2730(50)	4960(50)	80(13)
H(3)	4200(70)	300(50)	3420(50)	82(13)
H(4)	900(70)	-250(50)	1650(50)	88(14)

Tab. 44. Torsionswinkel [°] für **5**.

C(12)-Mn(1)-C(1)-C(2)	52.36(13)
C(11)-Mn(1)-C(1)-C(2)	138.57(13)
Mn(1)-C(1)-C(2)-C(3)	179.0(3)
C(12)-Mn(1)-C(2)-C(3)	50.6(2)
C(11)-Mn(1)-C(2)-C(3)	136.9(2)
C(1)-Mn(1)-C(2)-C(3)	-179.1(3)
C(12)-Mn(1)-C(2)-C(1)	-130.36(13)
C(11)-Mn(1)-C(2)-C(1)	-44.00(14)
C(1)-C(2)-C(3)-F(2)	-4.6(4)
Mn(1)-C(2)-C(3)-F(2)	173.86(15)
C(1)-C(2)-C(3)-F(1)	175.8(2)
Mn(1)-C(2)-C(3)-F(1)	-5.7(4)

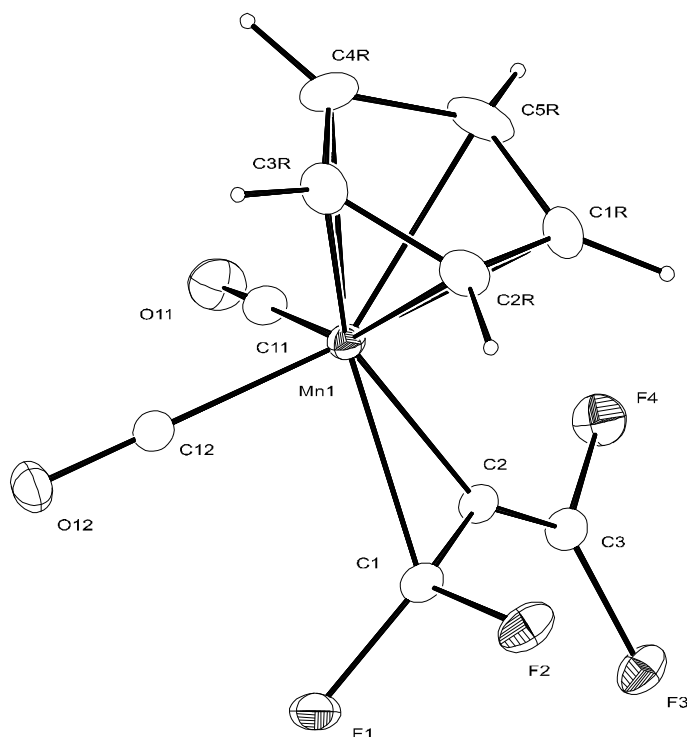


Abbildung 7: ORTEP-Darstellung der Struktur von **6** im Kristall

Tab. 45. Kristall- und Strukturdaten von **6**.

Identifikationscode	cpmnf4	
Diffraktometer	Stoe-Vierkreisdiffraktometer	
Farbe	gelb	
Summenformel	$C_{10} H_5 F_4 Mn O_2$	
Molmasse	288.08 g/mol	
Messtemperatur	293(2) K	
Wellenlänge	71.069 pm	
Kristallsystem	Triklin	
Raumgruppe	P-1	
Zelldimensionen	$a = 666.56(8) \text{ pm}$	$\alpha = 81.320(10)^\circ$
	$b = 718.14(8) \text{ pm}$	$\beta = 84.440(10)^\circ$
	$c = 1180.28(15) \text{ pm}$	$\gamma = 71.330(9)^\circ$
Volumen	$0.52841(11) \text{ nm}^3$	
Z	2	
Dichte (berechnet)	1.811 Mg/m^3	
Zerfall während der Messung	0%	
Absorptionskoeffizient	1.290 mm^{-1}	
Absorptionskorrektur	Psi-scan [115]	
Max. und min. Transmission	0.974 und 0.801	
F(000)	284	
Kristalldimensionen	$0.4 \times 0.3 \times 0.1 \text{ mm}^3$	
Theta-Bereich der Datensammlung	3.02 bis 30.03°	
Bereich der Indizes	$-9 \leq h \leq 9, -10 \leq k \leq 6, -16 \leq l \leq 16$	
Anzahl gemessene Reflexe	3541	
unabhängige Reflexe	3092 [R(int) = 0.0178]	
Vollständigkeit zu $\Theta = 30.03^\circ$	99.8 %	
Reflexe $>2\sigma(I)^\circ$	2530	
Methode der Strukturverfeinerung	Methode der kleinsten Fehlerquadrate F^2	
Reflexe / unterdrückt / Parameter	3092 / 0 / 155	
Goodness-of-fit gegen F^2	1.042	

Endgültiger Fehler R [$I > 2\sigma(I)$]	R1 = 0.0309, wR2 = 0.0816
R (alle Daten)	R1 = 0.0433, wR2 = 0.0871
Extinktionskoeffizient	0.022(3)
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.304 und $-0.249 \times 10^{-6} \text{ e pm}^{-3}$

Tab. 46. Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **6**. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Mn(1)	5213(1)	7338(1)	7252(1)	52(1)
C(1)	3208(3)	10193(3)	7048(2)	62(1)
C(2)	3373(3)	9383(3)	8187(2)	57(1)
C(3)	2692(3)	9818(3)	9204(2)	65(1)
C(11)	3902(4)	5829(3)	8197(2)	70(1)
C(12)	3774(3)	7089(3)	6102(2)	65(1)
C(1R)	7933(4)	8023(5)	7658(3)	86(1)
C(2R)	7904(4)	8161(4)	6478(2)	81(1)
C(3R)	8038(4)	6377(5)	6189(3)	92(1)
C(4R)	8153(4)	5062(4)	7163(4)	111(1)
C(5R)	8078(4)	6095(6)	8105(3)	108(1)
F(1)	1324(2)	10683(2)	6532(1)	85(1)
F(2)	4020(3)	11685(2)	6644(1)	94(1)
F(3)	1361(3)	11535(2)	9474(1)	90(1)
F(4)	3206(3)	8629(3)	10172(1)	95(1)
O(11)	3051(4)	4910(3)	8817(2)	103(1)
O(12)	2887(3)	6930(3)	5362(2)	89(1)

Tab. 47. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **6**.

Mn(1)-C(12)	179.7(2)
Mn(1)-C(11)	179.8(2)
Mn(1)-C(2)	198.75(18)
Mn(1)-C(1)	205.09(19)
Mn(1)-C(5R)	211.3(2)
Mn(1)-C(4R)	211.8(2)
Mn(1)-C(1R)	213.7(2)
Mn(1)-C(3R)	213.8(2)
Mn(1)-C(2R)	214.4(2)
C(1)-F(2)	135.4(2)
C(1)-F(1)	136.8(3)
C(1)-C(2)	138.1(3)
C(2)-C(3)	128.9(3)
C(3)-F(4)	132.2(3)
C(3)-F(3)	133.2(2)
C(11)-O(11)	114.3(3)
C(12)-O(12)	114.0(3)
C(1R)-C(5R)	138.1(5)
C(1R)-C(2R)	138.3(4)
C(2R)-C(3R)	134.8(4)
C(3R)-C(4R)	136.5(5)
C(4R)-C(5R)	141.6(5)
C(12)-Mn(1)-C(11)	88.17(11)
C(12)-Mn(1)-C(2)	110.25(9)
C(11)-Mn(1)-C(2)	80.90(9)

C(12)-Mn(1)-C(1)	82.61(9)
C(11)-Mn(1)-C(1)	108.53(9)
C(2)-Mn(1)-C(1)	39.96(8)
F(2)-C(1)-F(1)	104.97(17)
F(2)-C(1)-C(2)	120.3(2)
F(1)-C(1)-C(2)	120.56(18)
F(2)-C(1)-Mn(1)	119.02(15)
F(1)-C(1)-Mn(1)	121.80(14)
C(2)-C(1)-Mn(1)	67.55(11)
C(3)-C(2)-C(1)	141.28(19)
C(3)-C(2)-Mn(1)	146.22(17)
C(1)-C(2)-Mn(1)	72.49(11)
C(2)-C(3)-F(4)	125.8(2)
C(2)-C(3)-F(3)	126.6(2)
F(4)-C(3)-F(3)	107.56(18)
O(11)-C(11)-Mn(1)	178.1(2)
O(12)-C(12)-Mn(1)	179.0(2)

Tab. 48. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **6**. Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Mn(1)	45(1)	49(1)	59(1)	-9(1)	0(1)	-11(1)
C(1)	63(1)	50(1)	68(1)	-5(1)	4(1)	-13(1)
C(2)	55(1)	52(1)	63(1)	-11(1)	4(1)	-15(1)
C(3)	62(1)	66(1)	68(1)	-16(1)	6(1)	-17(1)
C(11)	65(1)	55(1)	85(1)	0(1)	-8(1)	-16(1)
C(12)	55(1)	65(1)	74(1)	-20(1)	2(1)	-15(1)
C(1R)	54(1)	118(2)	101(2)	-46(2)	1(1)	-31(1)
C(2R)	53(1)	100(2)	88(2)	-4(1)	5(1)	-28(1)
C(3R)	54(1)	127(2)	99(2)	-54(2)	16(1)	-21(1)
C(4R)	55(1)	71(2)	190(4)	-27(2)	7(2)	6(1)
C(5R)	51(1)	157(3)	88(2)	26(2)	-14(1)	-10(2)
F(1)	75(1)	72(1)	89(1)	-8(1)	-18(1)	6(1)
F(2)	112(1)	57(1)	104(1)	3(1)	22(1)	-29(1)
F(3)	92(1)	77(1)	96(1)	-37(1)	22(1)	-16(1)
F(4)	110(1)	105(1)	61(1)	-6(1)	-1(1)	-22(1)
O(11)	102(1)	85(1)	120(2)	28(1)	-4(1)	-44(1)
O(12)	75(1)	113(1)	87(1)	-37(1)	-11(1)	-27(1)

Tab. 49. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **6**.

	x	y	z	U(eq)
H(1R)	7867	9043	8075	104
H(2R)	7807	9302	5966	97
H(3R)	8049	6090	5445	110
H(4R)	8262	3731	7201	133
H(5R)	8118	5576	8877	129

Tab. 50. Torsionswinkel [°] für **6**.

C(12)-Mn(1)-C(1)-F(2)	-112.50(18)
C(11)-Mn(1)-C(1)-F(2)	161.94(17)
C(2)-Mn(1)-C(1)-F(2)	113.2(2)
C(12)-Mn(1)-C(1)-F(1)	21.26(17)
C(11)-Mn(1)-C(1)-F(1)	-64.30(19)
C(2)-Mn(1)-C(1)-F(1)	-113.0(2)
C(12)-Mn(1)-C(1)-C(2)	134.28(14)
C(11)-Mn(1)-C(1)-C(2)	48.72(15)
F(2)-C(1)-C(2)-C(3)	67.8(4)
F(1)-C(1)-C(2)-C(3)	-66.0(4)
Mn(1)-C(1)-C(2)-C(3)	179.3(3)
F(2)-C(1)-C(2)-Mn(1)	-111.50(18)
F(1)-C(1)-C(2)-Mn(1)	114.72(18)
C(12)-Mn(1)-C(2)-C(3)	131.6(3)
C(11)-Mn(1)-C(2)-C(3)	47.0(3)
C(1)-Mn(1)-C(2)-C(3)	-179.2(4)
C(12)-Mn(1)-C(2)-C(1)	-49.18(15)
C(11)-Mn(1)-C(2)-C(1)	-133.81(14)
C(1)-C(2)-C(3)-F(4)	-179.5(3)
Mn(1)-C(2)-C(3)-F(4)	-0.7(5)
C(1)-C(2)-C(3)-F(3)	0.2(5)
Mn(1)-C(2)-C(3)-F(3)	178.95(19)

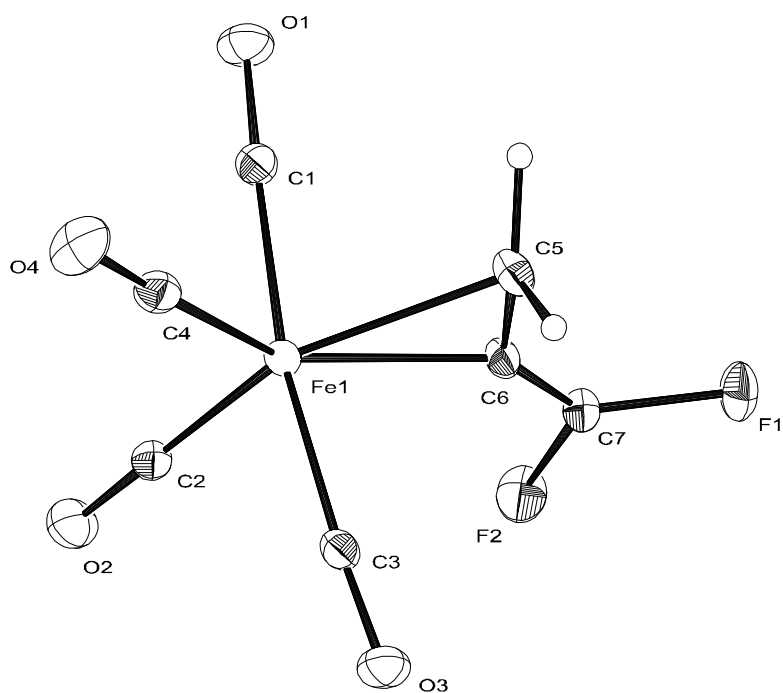


Abbildung 8: ORTEP-Darstellung der Struktur von **7** im Kristall

Tab. 51. Kristall- und Strukturdaten von **7**.

Identifikationscode	wilfe_ps	
Diffraktometer	Nonius-Enraf CAD4	
Farbe	gelb	
Summenformel	C ₇ H ₂ F ₂ Fe O ₄	
Molmasse	243.94 g/mol	
Messtemperatur	133(2) K	
Wellenlänge	71.069 pm	
Kristallsystem	Monoklin	
Raumgruppe	P2 ₁ /c	
Zelldimensionen	a = 713.4(2) pm	$\alpha = 90^\circ$.
	b = 1042.3(2) pm	$\beta = 92.53(2)^\circ$.
	c = 1170.9(2) pm	$\gamma = 90^\circ$.
Volumen	0.8698(3) nm ³	
Z	4	
Dichte (berechnet)	1.863 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	1.750 mm ⁻¹	
Absorptionskorrektur	Psi-scan [115]	
F(000)	480	
Kristalldimensionen	0.5 x 0.1 x 0.05 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	2.62 bis 24.98°.	
Bereich der Indizes	0<=h<=8, -12<=k<=0, -13<=l<=13	
Anzahl gemessene Reflexe	1655	
unabhängige Reflexe	1526 [R(int) = 0.0284]	
Vollständigkeit zu Theta = 24.98°	99.9 %	
Reflexe >2sigma(I)°	1297	
Methode der Strukturverfeinerung	Methode der kleinsten Fehlerquadrate F ²	
Reflexe / unterdrückt / Parameter	1526 / 0 / 135	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.145	
Endgültiger Fehler R [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0269, wR2 = 0.0671	
R (alle Daten)	R1 = 0.0407, wR2 = 0.0723	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.316 und -0.418 x 10 ⁻⁶ e pm ⁻³	

Tab. 52. Atomkoordinaten (x 10⁴) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren (pm²x 10⁻¹) für **7**. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Fe(1)	2260(1)	202(1)	7692(1)	17(1)
C(3)	4449(4)	-248(3)	8446(2)	21(1)
O(3)	5838(3)	-561(2)	8861(2)	31(1)
C(1)	202(4)	518(3)	6760(2)	22(1)
O(2)	15(3)	-1385(2)	9206(2)	33(1)
O(1)	-1055(3)	682(2)	6155(2)	31(1)
C(2)	881(4)	-767(3)	8635(2)	22(1)
O(4)	2230(3)	2851(2)	8581(2)	39(1)
C(5)	3817(4)	329(3)	6208(2)	25(1)
C(6)	3130(4)	-902(3)	6455(2)	20(1)
C(7)	3055(4)	-2079(3)	6124(2)	23(1)
C(4)	2250(4)	1820(3)	8256(2)	25(1)
F(1)	3840(2)	-2566(2)	5199(1)	31(1)
F(2)	2194(2)	-3040(2)	6644(2)	32(1)

Tab. 53. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für 7.

Fe(1)-C(4)	181.1(3)
Fe(1)-C(2)	181.8(3)
Fe(1)-C(1)	182.0(3)
Fe(1)-C(3)	182.1(3)
Fe(1)-C(6)	197.2(3)
Fe(1)-C(5)	210.7(3)
C(3)-O(3)	113.2(3)
C(1)-O(1)	113.1(3)
O(2)-C(2)	113.0(3)
O(4)-C(4)	114.0(4)
C(5)-C(6)	140.8(4)
C(5)-H(1)	96(3)
C(5)-H(2)	96(3)
C(6)-C(7)	128.7(4)
C(7)-F(2)	133.6(3)
C(7)-F(1)	134.0(3)
C(4)-Fe(1)-C(2)	106.56(13)
C(4)-Fe(1)-C(1)	91.93(12)
C(2)-Fe(1)-C(1)	91.19(12)
C(4)-Fe(1)-C(3)	94.61(12)
C(2)-Fe(1)-C(3)	92.16(12)
C(1)-Fe(1)-C(3)	171.48(12)
C(4)-Fe(1)-C(6)	144.86(12)
C(2)-Fe(1)-C(6)	108.57(12)
C(1)-Fe(1)-C(6)	86.40(11)
C(3)-Fe(1)-C(6)	85.11(11)
C(4)-Fe(1)-C(5)	104.64(12)
C(2)-Fe(1)-C(5)	148.77(12)
C(1)-Fe(1)-C(5)	86.31(12)
C(3)-Fe(1)-C(5)	86.77(12)
C(6)-Fe(1)-C(5)	40.22(12)
O(3)-C(3)-Fe(1)	176.2(2)
O(1)-C(1)-Fe(1)	177.5(2)
O(2)-C(2)-Fe(1)	178.7(3)
C(6)-C(5)-Fe(1)	64.70(14)
C(6)-C(5)-H(1)	119.7(19)
Fe(1)-C(5)-H(1)	110.9(18)
C(6)-C(5)-H(2)	120.4(19)
Fe(1)-C(5)-H(2)	112.0(18)
H(1)-C(5)-H(2)	116(3)
C(7)-C(6)-C(5)	144.8(3)
C(7)-C(6)-Fe(1)	140.1(2)
C(5)-C(6)-Fe(1)	75.08(16)
C(6)-C(7)-F(2)	126.3(2)
C(6)-C(7)-F(1)	126.3(3)
F(2)-C(7)-F(1)	107.5(2)
O(4)-C(4)-Fe(1)	178.1(3)

Tab. 54. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **7**. Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^2 U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂
Fe(1)	16(1)	18(1)	16(1)	-1(1)	-1(1)	1(1)
C(3)	25(2)	18(1)	18(1)	0(1)	2(1)	-1(1)
O(3)	23(1)	37(1)	32(1)	5(1)	-6(1)	2(1)
C(1)	27(2)	15(1)	23(1)	-1(1)	1(1)	0(1)
O(2)	27(1)	38(1)	34(1)	10(1)	6(1)	-1(1)
O(1)	28(1)	33(1)	31(1)	-1(1)	-12(1)	4(1)
C(2)	19(1)	26(2)	21(1)	-1(1)	-1(1)	4(1)
O(4)	38(1)	27(1)	51(1)	-14(1)	-10(1)	4(1)
C(5)	27(2)	28(2)	19(1)	1(1)	5(1)	-3(1)
C(6)	19(1)	27(2)	15(1)	-2(1)	0(1)	3(1)
C(7)	20(1)	26(2)	22(1)	-2(1)	3(1)	4(1)
C(4)	21(1)	28(2)	25(2)	-1(1)	-4(1)	1(1)
F(1)	31(1)	32(1)	29(1)	-13(1)	7(1)	2(1)
F(2)	34(1)	22(1)	41(1)	1(1)	9(1)	-3(1)

Tab. 55. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **7**.

	x	y	z	U(eq)
H(1)	5110(50)	540(30)	6400(30)	29(8)
H(2)	3200(40)	850(30)	5630(30)	28(8)

Tab. 56. Torsionswinkel [$^\circ$] für **7**.

C(4)-Fe(1)-C(5)-C(6)	-179.83(17)
C(2)-Fe(1)-C(5)-C(6)	-2.6(3)
C(1)-Fe(1)-C(5)-C(6)	-88.79(17)
C(3)-Fe(1)-C(5)-C(6)	86.24(18)
Fe(1)-C(5)-C(6)-C(7)	-179.8(5)
C(4)-Fe(1)-C(6)-C(7)	-179.9(3)
C(2)-Fe(1)-C(6)-C(7)	-1.6(4)
C(1)-Fe(1)-C(6)-C(7)	-91.7(3)
C(3)-Fe(1)-C(6)-C(7)	89.0(3)
C(5)-Fe(1)-C(6)-C(7)	179.8(4)
C(4)-Fe(1)-C(6)-C(5)	0.3(3)
C(2)-Fe(1)-C(6)-C(5)	178.58(17)
C(1)-Fe(1)-C(6)-C(5)	88.53(18)
C(3)-Fe(1)-C(6)-C(5)	-90.78(18)
C(5)-C(6)-C(7)-F(2)	179.6(4)
Fe(1)-C(6)-C(7)-F(2)	0.0(5)
C(5)-C(6)-C(7)-F(1)	0.2(7)
Fe(1)-C(6)-C(7)-F(1)	-179.5(2)

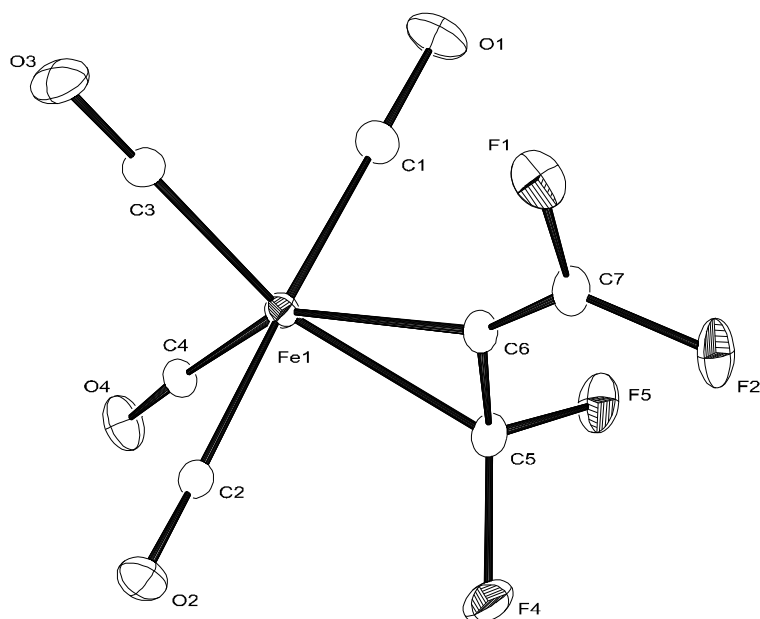


Abbildung 9: ORTEP-Darstellung der Struktur von **8** im Kristall

Tab. 57. Kristall- und Strukturdaten von **8**.

Identifikationscode	fetfa	
Diffraktometer	Nonius-Enraf CAD4	
Farbe	gelb	
Summenformel	$C_7 F_4 Fe O_4$	
Molmasse	279.92 g/mol	
Messtemperatur	133(2) K	
Wellenlänge	71.069 pm	
Kristallsystem	Orthorhombisch	
Raumgruppe	$P2_12_12_1$	
Zelldimensionen	$a = 655.9(2)$ pm	$\alpha = 90^\circ$.
	$b = 678.2(2)$ pm	$\beta = 90^\circ$.
	$c = 2080.5(5)$ pm	$\gamma = 90^\circ$.
Volumen	$0.9255(5)$ nm ³	
Z	4	
Dichte (berechnet)	2.009 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	1.688 mm ⁻¹	
Absorptionskorrektur	Keine	
F(000)	544	
Kristalldimensionen	$0.4 \times 0.4 \times 0.1$ mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	3.16 bis 29.96° .	
Bereich der Indizes	$0 \leq h \leq 9$, $0 \leq k \leq 9$, $-29 \leq l \leq 0$	
Anzahl gemessene Reflexe	1584	
unabhängige Reflexe	1584 [$R(\text{int}) = 0.0000$]	
Vollständigkeit zu $\Theta = 29.96^\circ$	99.9 %	
Reflexe $>2\sigma(I)^\circ$	1144	
Methode der Strukturverfeinerung	Methode der kleinsten Fehlerquadrate F^2	
Reflexe / unterdrückt / Parameter	1584 / 0 / 145	
Goodness-of-fit gegen F^2	1.019	
Endgültiger Fehler R [$I > 2\sigma(I)$]	$R1 = 0.0343$, $wR2 = 0.0718$	
R (alle Daten)	$R1 = 0.0791$, $wR2 = 0.0814$	
Absol. Strukturparameter (Flack-Par.)	-0.06(4)	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.478 und -0.486×10^{-6} e pm ⁻³	

Tab. 58. Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **8**.
 $U(\text{eq})$ ist definiert als $1/3$ des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Fe(1)	7980(1)	-7(1)	1200(1)	21(1)
C(1)	9375(7)	-865(6)	504(2)	30(1)
C(2)	6675(6)	1034(6)	1906(2)	26(1)
C(3)	6060(7)	1168(6)	685(2)	30(1)
C(4)	7055(7)	-2482(6)	1368(2)	26(1)
C(5)	10586(5)	100(8)	1695(2)	30(1)
C(6)	10214(6)	1845(6)	1358(2)	26(1)
C(7)	11119(7)	3496(6)	1264(2)	33(1)
O(1)	10247(6)	-1386(5)	66(2)	48(1)
O(2)	5859(5)	1692(5)	2325(2)	42(1)
O(3)	4887(6)	1922(5)	376(2)	51(1)
O(4)	6575(5)	-4035(4)	1482(2)	39(1)
F(1)	10492(4)	4950(4)	885(1)	46(1)
F(2)	12865(4)	4047(4)	1530(2)	50(1)
F(4)	10537(3)	55(5)	2347(1)	44(1)
F(5)	12174(4)	-1076(4)	1522(2)	42(1)

Tab. 59. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **8**.

Fe(1)-C(1)	181.0(5)
Fe(1)-C(4)	181.8(4)
Fe(1)-C(3)	183.6(4)
Fe(1)-C(2)	184.0(4)
Fe(1)-C(6)	195.7(4)
Fe(1)-C(5)	199.7(4)
C(1)-O(1)	113.1(5)
C(2)-O(2)	111.6(5)
C(3)-O(3)	112.5(5)
C(4)-O(4)	112.5(5)
C(5)-F(4)	135.6(4)
C(5)-F(5)	136.1(5)
C(5)-C(6)	139.7(6)
C(6)-C(7)	128.2(6)
C(7)-F(2)	132.6(5)
C(7)-F(1)	132.8(5)
C(1)-Fe(1)-C(4)	91.46(19)
C(1)-Fe(1)-C(3)	91.1(2)
C(4)-Fe(1)-C(3)	106.48(19)
C(1)-Fe(1)-C(2)	175.7(2)
C(4)-Fe(1)-C(2)	92.65(18)
C(3)-Fe(1)-C(2)	88.84(19)
C(1)-Fe(1)-C(6)	87.83(18)
C(4)-Fe(1)-C(6)	144.10(19)
C(3)-Fe(1)-C(6)	109.42(19)
C(2)-Fe(1)-C(6)	88.18(18)
C(1)-Fe(1)-C(5)	89.55(19)
C(4)-Fe(1)-C(5)	102.7(2)
C(3)-Fe(1)-C(5)	150.7(2)
C(2)-Fe(1)-C(5)	88.45(17)
C(6)-Fe(1)-C(5)	41.4(2)
O(1)-C(1)-Fe(1)	179.4(4)

O(2)-C(2)-Fe(1)	178.5(4)
O(3)-C(3)-Fe(1)	178.6(4)
O(4)-C(4)-Fe(1)	176.6(4)
F(4)-C(5)-F(5)	105.6(4)
F(4)-C(5)-C(6)	121.1(4)
F(5)-C(5)-C(6)	119.8(4)
F(4)-C(5)-Fe(1)	119.6(3)
F(5)-C(5)-Fe(1)	119.8(3)
C(6)-C(5)-Fe(1)	67.8(2)
C(7)-C(6)-C(5)	137.3(4)
C(7)-C(6)-Fe(1)	151.8(4)
C(5)-C(6)-Fe(1)	70.8(2)
C(6)-C(7)-F(2)	125.6(4)
C(6)-C(7)-F(1)	126.6(4)
F(2)-C(7)-F(1)	107.8(4)

Tab. 60. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **8**. Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^*^2 U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂
Fe(1)	22(1)	20(1)	22(1)	0(1)	1(1)	-1(1)
C(1)	34(2)	22(2)	33(2)	4(2)	2(2)	0(2)
C(2)	23(2)	29(2)	26(2)	3(2)	-2(2)	-1(2)
C(3)	32(2)	31(2)	27(2)	-1(2)	-1(2)	5(2)
C(4)	21(2)	30(2)	26(2)	2(2)	3(2)	-1(2)
C(5)	24(2)	30(2)	35(2)	1(3)	-3(2)	-1(3)
C(6)	22(2)	25(2)	32(2)	-6(2)	1(2)	-1(2)
C(7)	26(2)	31(2)	42(3)	-8(2)	0(2)	-2(2)
O(1)	64(2)	41(2)	37(2)	0(2)	21(2)	8(2)
O(2)	45(2)	50(2)	32(2)	-7(2)	9(2)	4(2)
O(3)	55(2)	61(2)	37(2)	6(2)	-10(2)	24(2)
O(4)	33(2)	29(2)	54(2)	4(2)	9(2)	-8(1)
F(1)	54(2)	22(1)	62(2)	8(2)	11(1)	3(2)
F(2)	29(1)	40(1)	82(2)	-14(2)	1(2)	-13(1)
F(4)	46(1)	52(2)	34(1)	9(2)	-15(1)	-2(2)
F(5)	28(1)	33(1)	65(2)	7(1)	-6(2)	8(1)

Tab. 61. Torsionswinkel [°] für **8**.

C(1)-Fe(1)-C(5)-F(4)	-158.5(5)
C(4)-Fe(1)-C(5)-F(4)	-67.1(5)
C(3)-Fe(1)-C(5)-F(4)	110.1(5)
C(2)-Fe(1)-C(5)-F(4)	25.2(5)
C(6)-Fe(1)-C(5)-F(4)	114.2(5)
C(1)-Fe(1)-C(5)-F(5)	-25.4(4)
C(4)-Fe(1)-C(5)-F(5)	66.0(4)
C(3)-Fe(1)-C(5)-F(5)	-116.8(5)
C(2)-Fe(1)-C(5)-F(5)	158.4(4)
C(6)-Fe(1)-C(5)-F(5)	-112.6(4)
C(1)-Fe(1)-C(5)-C(6)	87.2(3)
C(4)-Fe(1)-C(5)-C(6)	178.6(2)
C(3)-Fe(1)-C(5)-C(6)	-4.2(5)
C(2)-Fe(1)-C(5)-C(6)	-89.0(3)

F(4)-C(5)-C(6)-C(7)	70.2(7)
F(5)-C(5)-C(6)-C(7)	-65.0(7)
Fe(1)-C(5)-C(6)-C(7)	-177.6(6)
F(4)-C(5)-C(6)-Fe(1)	-112.2(3)
F(5)-C(5)-C(6)-Fe(1)	112.6(4)
C(1)-Fe(1)-C(6)-C(7)	84.8(7)
C(4)-Fe(1)-C(6)-C(7)	174.3(6)
C(3)-Fe(1)-C(6)-C(7)	-5.5(8)
C(2)-Fe(1)-C(6)-C(7)	-93.7(7)
C(5)-Fe(1)-C(6)-C(7)	176.6(9)
C(1)-Fe(1)-C(6)-C(5)	-91.8(3)
C(4)-Fe(1)-C(6)-C(5)	-2.3(4)
C(3)-Fe(1)-C(6)-C(5)	177.8(2)
C(2)-Fe(1)-C(6)-C(5)	89.7(3)
C(5)-C(6)-C(7)-F(2)	-3.5(9)
Fe(1)-C(6)-C(7)-F(2)	-178.8(5)
C(5)-C(6)-C(7)-F(1)	176.3(5)
Fe(1)-C(6)-C(7)-F(1)	1.0(10)

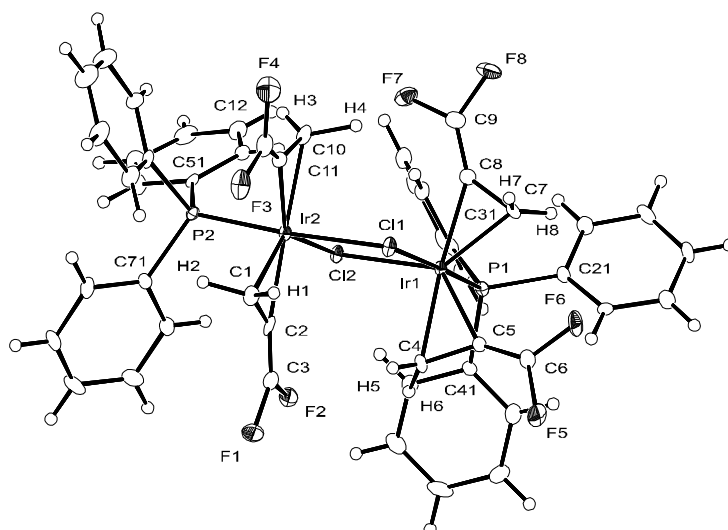


Abbildung 10: ORTEP-Darstellung der Struktur von **9** im Kristall

Tab. 62. Kristall- und Strukturdaten von **9**.

Identifikationscode	iol	
Diffraktometer	SMART CCD, Bruker AXS	
Farbe	farblos	
Summenformel	$C_{48} H_{38} Cl_2 F_8 Ir_2 P_2$	
Molmasse	1284.02 g/mol	
Messtemperatur	293(2) K	
Wellenlänge	71.073 pm	
Kristallsystem	Triklin	
Raumgruppe	P-1	
Zelldimensionen	$a = 1144.80(6)$ pm	$\alpha = 89.4600(10)^\circ$
	$b = 1374.52(7)$ pm	$\beta = 80.9590(10)^\circ$
	$c = 1531.40(8)$ pm	$\gamma = 77.4500(10)^\circ$
Volumen	$2.3222(2)$ nm ³	
Z	2	
Dichte (berechnet)	1.836 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	5.974 mm ⁻¹	
Absorptionskorrektur	Semi empirisch (SADABS) [116, 117]	

F(000)	1232
Kristalldimensionen	0.4 x 0.2 x 0.1 mm ³
Theta-Bereich der Datensammlung	1.85 bis 30.05°
Bereich der Indizes	-16<=h<=16, -19<=k<=19, -21<=l<=21
Anzahl gemessene Reflexe	27519
unabhängige Reflexe	13273 [R(int) = 0.0953]
Vollständigkeit zu Theta = 30.05°	97.4 %
Reflexe verwendet >2sigma(I)°	8615
Methode der Strukturverfeinerung	Methode der kleinsten Fehlerquadrate F ²
Reflexe / unterdrückt / Parameter	13273 / 0 / 589
Goodness-of-fit gegen F ²	0.883
Endgültiger Fehler R [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0421, wR2 = 0.0882
R (alle Daten)	R1 = 0.0782, wR2 = 0.0970
Größte und kleinste Restelektronendichte	2.948 und -2.497 × 10 ⁻⁶ e pm ⁻³

Tab. 63. Atomkoordinaten (x 10⁴) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren (pm²x 10⁻¹) für **9**. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Ir(1)	5401(1)	3182(1)	3004(1)	14(1)
Ir(2)	7408(1)	682(1)	2382(1)	15(1)
Cl(1)	7510(1)	2300(1)	3041(1)	19(1)
Cl(2)	5282(1)	1572(1)	2351(1)	17(1)
P(1)	3461(1)	3921(1)	2915(1)	15(1)
P(2)	7221(1)	-810(1)	1879(1)	14(1)
C(1)	9010(6)	709(5)	1468(5)	26(2)
C(2)	7983(6)	1190(4)	1150(4)	21(1)
C(3)	7660(7)	1640(5)	450(5)	27(2)
C(4)	6121(7)	3657(5)	1722(4)	22(1)
C(5)	6046(6)	4346(4)	2417(4)	18(1)
C(6)	6311(6)	5165(5)	2635(4)	27(2)
C(7)	5330(6)	3783(5)	4293(4)	20(1)
C(8)	4995(6)	2853(5)	4326(4)	20(1)
C(9)	4785(7)	2227(6)	4919(5)	29(2)
C(10)	7121(7)	187(5)	3727(5)	25(2)
C(11)	8343(6)	42(5)	3332(4)	21(1)
C(12)	9440(7)	-272(5)	3486(5)	32(2)
C(21)	2792(5)	4976(4)	3681(4)	16(1)
C(22)	1889(6)	4894(5)	4388(4)	22(1)
C(23)	1389(6)	5688(6)	4971(4)	30(2)
C(24)	1761(6)	6582(5)	4860(4)	26(2)
C(25)	2670(6)	6665(5)	4180(4)	25(1)
C(26)	3208(6)	5854(4)	3621(4)	17(1)
C(31)	2357(5)	3139(5)	3102(4)	17(1)
C(32)	2540(6)	2271(5)	3585(4)	22(1)
C(33)	1619(6)	1733(5)	3766(5)	28(2)
C(34)	537(6)	2061(5)	3454(5)	28(2)
C(35)	349(6)	2924(5)	2964(4)	27(2)
C(36)	1240(6)	3466(5)	2790(4)	22(1)
C(41)	3284(6)	4359(5)	1807(4)	17(1)
C(42)	3049(7)	5345(5)	1566(5)	32(2)
C(43)	2973(8)	5614(6)	700(5)	41(2)
C(44)	3118(8)	4879(6)	54(5)	39(2)
C(45)	3345(8)	3886(6)	291(5)	43(2)
C(46)	3421(7)	3623(5)	1150(4)	29(2)
C(51)	5716(5)	-1093(4)	2157(4)	15(1)
C(52)	4821(6)	-597(5)	2825(4)	20(1)

C(53)	3684(6)	-855(5)	2974(5)	28(2)
C(54)	3439(7)	-1576(5)	2480(5)	32(2)
C(55)	4341(7)	-2088(5)	1835(5)	32(2)
C(56)	5465(7)	-1858(5)	1658(5)	29(2)
C(61)	8239(6)	-1871(4)	2284(4)	18(1)
C(62)	7808(7)	-2521(5)	2874(4)	27(2)
C(63)	8607(8)	-3273(6)	3229(5)	38(2)
C(64)	9834(8)	-3383(6)	2969(6)	42(2)
C(65)	10277(7)	-2745(5)	2392(6)	37(2)
C(66)	9498(6)	-1970(5)	2039(5)	29(2)
C(71)	7474(6)	-965(5)	675(4)	19(1)
C(72)	6684(6)	-302(5)	222(4)	32(1)
C(73)	6762(7)	-392(6)	-687(4)	32(2)
C(74)	7648(7)	-1166(6)	-1161(4)	36(2)
C(75)	8425(7)	-1811(5)	-708(4)	32(2)
C(76)	8352(6)	-1735(5)	212(5)	25(1)
F(1)	8418(5)	1798(3)	-283(3)	48(1)
F(2)	6530(4)	2006(3)	286(3)	35(1)
F(5)	6844(4)	5747(3)	2062(3)	40(1)
F(6)	6132(4)	5577(3)	3448(3)	37(1)
F(8)	4778(4)	2328(3)	5798(3)	40(1)
F(7)	4535(4)	1327(3)	4800(3)	37(1)
F(3)	10459(4)	-299(3)	2889(3)	40(1)
F(4)	9778(5)	-650(3)	4236(3)	49(1)

Tab. 64. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **9**.

Ir(1)-C(5)	204.7(6)
Ir(1)-C(8)	207.3(6)
Ir(1)-C(7)	213.0(6)
Ir(1)-C(4)	215.8(7)
Ir(1)-P(1)	225.76(16)
Ir(1)-Cl(1)	246.41(15)
Ir(1)-Cl(2)	247.60(15)
Ir(2)-C(11)	202.3(6)
Ir(2)-C(2)	206.5(7)
Ir(2)-C(1)	213.3(6)
Ir(2)-C(10)	216.0(7)
Ir(2)-P(2)	226.27(16)
Ir(2)-Cl(2)	248.27(15)
Ir(2)-Cl(1)	248.41(15)
P(1)-C(31)	181.8(6)
P(1)-C(41)	182.1(6)
P(1)-C(21)	182.6(6)
P(2)-C(61)	182.8(6)
P(2)-C(71)	182.9(6)
P(2)-C(51)	183.2(6)
C(1)-C(2)	137.5(10)
C(1)-H(1)	104(9)
C(1)-H(2)	114(8)
C(2)-C(3)	129.7(9)
C(3)-F(2)	134.5(8)
C(3)-F(1)	135.3(8)
C(4)-C(5)	141.2(8)
C(4)-H(5)	93(6)
C(4)-H(6)	101(7)
C(5)-C(6)	128.7(9)
C(6)-F(6)	134.0(7)
C(6)-F(5)	134.7(7)

C(7)-C(8)	141.1(9)
C(7)-H(8)	104(6)
C(7)-H(7)	104(7)
C(8)-C(9)	127.6(9)
C(9)-F(7)	134.8(8)
C(9)-F(8)	135.4(8)
C(10)-C(11)	140.6(9)
C(10)-H(3)	82(6)
C(10)-H(4)	117(6)
C(11)-C(12)	129.4(10)
C(12)-F(4)	133.4(8)
C(12)-F(3)	135.8(9)
C(5)-Ir(1)-C(8)	131.0(2)
C(5)-Ir(1)-C(7)	91.9(2)
C(8)-Ir(1)-C(7)	39.2(2)
C(5)-Ir(1)-C(4)	39.1(2)
C(8)-Ir(1)-C(4)	167.8(3)
C(7)-Ir(1)-C(4)	130.5(2)
C(5)-Ir(1)-P(1)	92.67(18)
C(8)-Ir(1)-P(1)	93.23(18)
C(7)-Ir(1)-P(1)	94.00(19)
C(4)-Ir(1)-P(1)	94.5(2)
P(1)-Ir(1)-Cl(1)	176.68(5)
P(1)-Ir(1)-Cl(2)	94.35(5)
Cl(1)-Ir(1)-Cl(2)	82.47(5)
C(11)-Ir(2)-C(2)	131.3(3)
C(11)-Ir(2)-C(1)	93.3(3)
C(2)-Ir(2)-C(1)	38.2(3)
C(11)-Ir(2)-C(10)	39.1(3)
C(2)-Ir(2)-C(10)	169.5(3)
C(1)-Ir(2)-C(10)	132.4(3)
C(11)-Ir(2)-P(2)	92.26(17)
C(2)-Ir(2)-P(2)	95.26(17)
C(1)-Ir(2)-P(2)	94.22(19)
C(10)-Ir(2)-P(2)	90.09(19)
C(11)-Ir(2)-Cl(2)	134.98(19)
C(2)-Ir(2)-Cl(2)	91.76(19)
C(1)-Ir(2)-Cl(2)	129.6(2)
C(10)-Ir(2)-Cl(2)	96.65(19)
P(2)-Ir(2)-Cl(2)	96.50(5)
C(11)-Ir(2)-Cl(1)	86.03(17)
C(2)-Ir(2)-Cl(1)	88.90(17)
C(1)-Ir(2)-Cl(1)	89.92(19)
C(10)-Ir(2)-Cl(1)	86.03(18)
P(2)-Ir(2)-Cl(1)	175.61(5)
Cl(2)-Ir(2)-Cl(1)	81.93(5)
Ir(1)-Cl(1)-Ir(2)	97.94(5)
Ir(1)-Cl(2)-Ir(2)	97.66(5)
C(2)-C(1)-Ir(2)	68.2(4)
C(2)-C(1)-H(1)	128(5)
Ir(2)-C(1)-H(1)	114(5)
C(2)-C(1)-H(2)	126(4)
Ir(2)-C(1)-H(2)	109(4)
H(1)-C(1)-H(2)	103(6)
C(3)-C(2)-C(1)	140.2(7)
C(3)-C(2)-Ir(2)	146.2(6)
C(1)-C(2)-Ir(2)	73.6(4)
C(2)-C(3)-F(2)	127.9(7)
C(2)-C(3)-F(1)	125.8(7)
F(2)-C(3)-F(1)	106.2(6)
C(5)-C(4)-Ir(1)	66.2(4)
C(5)-C(4)-H(5)	115(4)

Ir(1)-C(4)-H(5)	113(4)
C(5)-C(4)-H(6)	130(4)
Ir(1)-C(4)-H(6)	118(4)
H(5)-C(4)-H(6)	108(5)
C(6)-C(5)-C(4)	145.5(6)
C(6)-C(5)-Ir(1)	139.5(5)
C(4)-C(5)-Ir(1)	74.7(4)
C(5)-C(6)-F(6)	127.1(6)
C(5)-C(6)-F(5)	124.4(6)
F(6)-C(6)-F(5)	108.5(5)
C(8)-C(7)-Ir(1)	68.2(3)
C(8)-C(7)-H(8)	108(3)
Ir(1)-C(7)-H(8)	113(3)
C(8)-C(7)-H(7)	104(4)
Ir(1)-C(7)-H(7)	112(4)
H(8)-C(7)-H(7)	132(5)
C(9)-C(8)-C(7)	136.6(6)
C(9)-C(8)-Ir(1)	149.8(6)
C(7)-C(8)-Ir(1)	72.6(3)
C(8)-C(9)-F(7)	127.3(6)
C(8)-C(9)-F(8)	126.9(7)
F(7)-C(9)-F(8)	105.8(5)
C(11)-C(10)-Ir(2)	65.1(4)
C(11)-C(10)-H(3)	119(4)
Ir(2)-C(10)-H(3)	117(4)
C(11)-C(10)-H(4)	120(3)
Ir(2)-C(10)-H(4)	111(3)
H(3)-C(10)-H(4)	115(5)
C(12)-C(11)-C(10)	142.8(7)
C(12)-C(11)-Ir(2)	141.4(6)
C(10)-C(11)-Ir(2)	75.7(4)
C(11)-C(12)-F(4)	127.0(8)
C(11)-C(12)-F(3)	125.2(7)
F(4)-C(12)-F(3)	107.9(6)

Tab. 65. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **9**. Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂
Ir(1)	11(1)	14(1)	17(1)	-2(1)	0(1)	-3(1)
Ir(2)	11(1)	14(1)	20(1)	-2(1)	-1(1)	-3(1)
Cl(1)	10(1)	16(1)	31(1)	-4(1)	-4(1)	-3(1)
Cl(2)	12(1)	14(1)	26(1)	-3(1)	-3(1)	-2(1)
P(1)	11(1)	16(1)	17(1)	-2(1)	-1(1)	-4(1)
P(2)	13(1)	13(1)	18(1)	1(1)	-2(1)	-4(1)
C(1)	18(3)	23(4)	34(4)	-3(3)	7(3)	-6(3)
C(2)	19(3)	8(3)	37(4)	-4(3)	2(3)	-8(2)
C(3)	30(4)	18(3)	31(4)	-1(3)	-1(3)	-4(3)
C(4)	24(4)	20(3)	21(3)	-8(3)	2(3)	-7(3)
C(5)	16(3)	17(3)	18(3)	-2(2)	3(2)	-4(2)
C(6)	26(4)	25(4)	28(4)	-4(3)	6(3)	-10(3)
C(7)	22(3)	25(3)	12(3)	-4(2)	-6(2)	-3(3)
C(8)	14(3)	25(3)	21(3)	1(3)	-1(2)	-4(3)
C(9)	26(4)	35(4)	25(4)	5(3)	-2(3)	-7(3)
C(10)	25(4)	15(3)	38(4)	-1(3)	-7(3)	-9(3)
C(11)	28(4)	17(3)	20(3)	0(2)	-8(3)	-9(3)

C(12)	30(4)	26(4)	42(4)	-7(3)	-13(3)	-3(3)
C(21)	13(3)	19(3)	17(3)	-3(2)	-7(2)	-1(2)
C(22)	15(3)	26(3)	25(3)	-2(3)	-6(2)	-5(3)
C(23)	22(4)	45(5)	19(3)	-7(3)	4(3)	-4(3)
C(24)	25(4)	26(4)	24(3)	-12(3)	-4(3)	1(3)
C(25)	25(4)	27(4)	24(3)	-3(3)	-7(3)	-6(3)
C(26)	16(3)	20(3)	16(3)	5(2)	-2(2)	-5(2)
C(31)	12(3)	22(3)	19(3)	-7(2)	2(2)	-8(2)
C(32)	17(3)	19(3)	27(3)	-3(3)	3(3)	-4(3)
C(33)	22(4)	24(4)	36(4)	-6(3)	5(3)	-7(3)
C(34)	19(3)	28(4)	35(4)	-14(3)	10(3)	-13(3)
C(35)	18(3)	34(4)	27(4)	-13(3)	2(3)	-4(3)
C(36)	14(3)	28(4)	24(3)	-1(3)	-1(2)	-4(3)
C(41)	18(3)	20(3)	15(3)	-1(2)	-4(2)	-6(3)
C(42)	39(4)	25(4)	32(4)	-5(3)	-11(3)	-6(3)
C(43)	73(6)	24(4)	35(4)	7(3)	-22(4)	-20(4)
C(44)	50(5)	60(6)	17(3)	9(3)	-8(3)	-30(4)
C(45)	68(6)	46(5)	22(4)	-8(3)	-10(4)	-22(5)
C(46)	39(4)	25(4)	25(4)	-1(3)	-6(3)	-7(3)
C(51)	13(3)	10(3)	22(3)	4(2)	-2(2)	0(2)
C(52)	16(3)	17(3)	23(3)	3(2)	3(2)	-2(2)
C(53)	20(4)	24(4)	38(4)	3(3)	6(3)	-6(3)
C(54)	23(4)	34(4)	45(4)	14(3)	-14(3)	-18(3)
C(55)	32(4)	30(4)	39(4)	-2(3)	-3(3)	-19(3)
C(56)	31(4)	29(4)	33(4)	-7(3)	0(3)	-18(3)
C(61)	16(3)	11(3)	28(3)	-5(2)	-7(3)	1(2)
C(62)	29(4)	21(4)	29(4)	7(3)	-5(3)	-1(3)
C(63)	38(5)	33(4)	47(5)	14(4)	-15(4)	-11(4)
C(64)	40(5)	34(4)	55(5)	10(4)	-28(4)	-1(4)
C(65)	25(4)	28(4)	59(5)	1(4)	-12(4)	-3(3)
C(66)	15(3)	23(4)	45(5)	1(3)	3(3)	-2(3)
C(71)	21(3)	20(3)	17(3)	-3(2)	-2(2)	-5(3)
C(72)	23(3)	23(3)	24(3)	-4(3)	-5(3)	-6(3)
C(73)	35(4)	43(5)	22(3)	3(3)	-4(3)	-18(4)
C(74)	46(5)	52(5)	15(3)	-6(3)	-3(3)	-27(4)
C(75)	36(4)	32(4)	23(4)	-12(3)	10(3)	-8(3)
C(76)	15(3)	18(3)	38(4)	-7(3)	3(3)	-2(3)
F(1)	63(3)	39(3)	33(3)	6(2)	20(2)	-11(2)
F(2)	46(3)	30(2)	28(2)	0(2)	-10(2)	-3(2)
F(5)	48(3)	28(2)	49(3)	-5(2)	11(2)	-27(2)
F(6)	39(3)	31(2)	43(3)	-20(2)	1(2)	-16(2)
F(8)	39(3)	56(3)	21(2)	12(2)	2(2)	-3(2)
F(7)	31(2)	33(2)	45(3)	13(2)	0(2)	-9(2)
F(3)	18(2)	37(3)	66(3)	-14(2)	-10(2)	-2(2)
F(4)	49(3)	52(3)	48(3)	-1(2)	-34(2)	2(2)

Tab. 66. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **9**.

	x	y	z	U(eq)
H(22)	1623	4302	4466	26
H(23)	794	5623	5443	36
H(24)	1398	7121	5243	31
H(25)	2922	7264	4097	30
H(26)	3866	5897	3192	21
H(32)	3273	2046	3789	26
H(33)	1739	1158	4095	34

H(34)	-70	1703	3571	33
H(35)	-381	3137	2753	32
H(36)	1106	4046	2468	27
H(42)	2938	5842	1997	38
H(43)	2826	6282	553	49
H(44)	3064	5049	-530	47
H(45)	3448	3390	-141	52
H(46)	3563	2954	1296	35
H(52)	4974	-100	3170	24
H(53)	3089	-524	3422	34
H(54)	2675	-1725	2572	38
H(55)	4184	-2601	1511	38
H(56)	6053	-2204	1215	35
H(62)	6976	-2457	3037	32
H(63)	8313	-3699	3641	46
H(64)	10367	-3900	3190	50
H(65)	11111	-2825	2231	44
H(66)	9805	-1529	1650	35
H(72)	6100	204	535	28
H(73)	6236	53	-983	38
H(74)	7705	-1239	-1770	43
H(75)	9016	-2312	-1022	38
H(76)	8874	-2185	508	30
H(1)	9630(80)	1020(60)	1730(60)	59
H(2)	9530(80)	-90(60)	1300(50)	59
H(5)	6890(60)	3290(40)	1510(40)	4(14)
H(8)	4550(60)	4330(40)	4490(40)	10(15)
H(3)	6810(50)	-300(40)	3810(40)	1(14)
H(4)	6700(60)	860(50)	4220(40)	22(18)
H(6)	5620(70)	3690(50)	1240(50)	30(20)
H(7)	6180(60)	3640(50)	4490(40)	26(19)

Tab. 67. Torsionswinkel [°] für **9**.

P(1)-Ir(1)-Cl(1)-Ir(2)	-16.0(10)
Cl(2)-Ir(1)-Cl(1)-Ir(2)	0.15(6)
P(2)-Ir(2)-Cl(1)-Ir(1)	-69.5(7)
Cl(2)-Ir(2)-Cl(1)-Ir(1)	-0.15(6)
P(1)-Ir(1)-Cl(2)-Ir(2)	178.92(6)
Cl(1)-Ir(1)-Cl(2)-Ir(2)	-0.15(6)
Cl(1)-Ir(2)-Cl(2)-Ir(1)	0.15(6)
C(11)-Ir(2)-C(1)-C(2)	-174.3(4)
C(10)-Ir(2)-C(1)-C(2)	-172.9(4)
Ir(2)-C(1)-C(2)-C(3)	-177.3(10)
C(11)-Ir(2)-C(2)-C(3)	-175.6(8)
C(1)-Ir(2)-C(2)-C(3)	176.9(11)
C(10)-Ir(2)-C(2)-C(3)	-153.0(12)
C(11)-Ir(2)-C(2)-C(1)	7.5(5)
C(10)-Ir(2)-C(2)-C(1)	30.1(15)
C(1)-C(2)-C(3)-F(2)	175.2(8)
C(1)-C(2)-C(3)-F(1)	-2.0(14)
Cl(2)-Ir(1)-C(5)-C(4)	4.0(5)
C(4)-C(5)-C(6)-F(6)	-175.1(9)
C(4)-C(5)-C(6)-F(5)	3.8(16)
C(5)-Ir(1)-C(7)-C(8)	-177.0(4)
C(4)-Ir(1)-C(7)-C(8)	-170.4(4)
Ir(1)-C(7)-C(8)-C(9)	170.6(9)
C(5)-Ir(1)-C(8)-C(9)	-163.1(10)
C(7)-Ir(1)-C(8)-C(9)	-167.1(13)

C(4)-Ir(1)-C(8)-C(9)	-130.2(13)
Cl(1)-Ir(1)-C(8)-C(9)	-76.5(11)
Cl(2)-Ir(1)-C(8)-C(9)	5.6(11)
C(5)-Ir(1)-C(8)-C(7)	4.0(5)
C(4)-Ir(1)-C(8)-C(7)	36.9(13)
C(7)-C(8)-C(9)-F(7)	-175.8(7)
C(7)-C(8)-C(9)-F(8)	3.6(14)
C(10)-C(11)-C(12)-F(4)	1.9(15)
C(10)-C(11)-C(12)-F(3)	179.8(8)

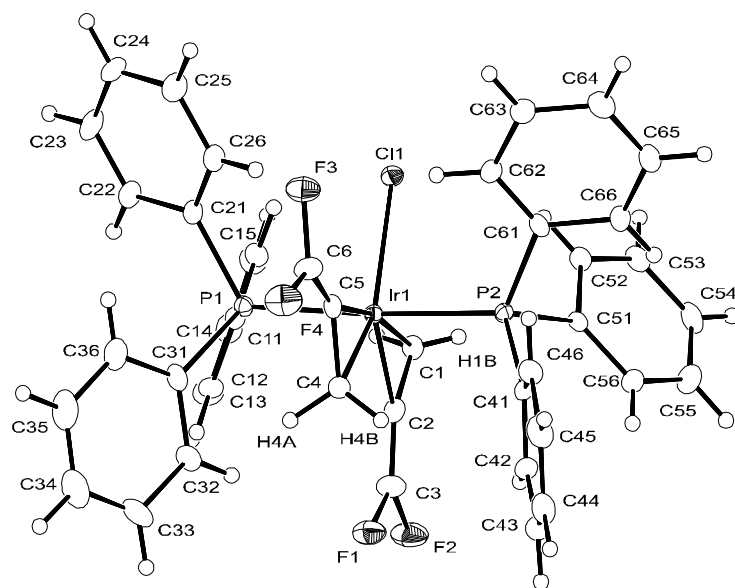


Abbildung 11: ORTEP-Darstellung der Struktur von **10** im Kristall

Tab. 68. Kristall- und Strukturdaten von **10**.

Identifikationscode	squeeze	
Diffraktometer	SMART CCD, Bruker AXS	
Farbe	farblos	
Summenformel	C ₄₂ H ₃₄ Cl ₄ F ₄ Ir P ₂	
Molmasse	904.28g/mol	
Messtemperatur	153(2) K	
Wellenlänge	71.073 pm	
Kristallsystem	Orthorhombisch	
Raumgruppe	P2 ₁ 2 ₁ 2 ₁	
Zelldimensionen	a = 1185.19(11) pm	$\alpha = 90^\circ$.
	b = 1762.85(16) pm	$\beta = 90^\circ$.
	c = 2151.89(17) pm	$\gamma = 90^\circ$.
Volumen	4.4960(7) nm ³	
Z	4	
Dichte (berechnet)	1.336 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	3.141 mm ⁻¹	
Absorptionskorrektur	Keine	
F(000)	1784	
Kristalldimensionen	0.4 x 0.2 x 0.1 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	1.49 bis 30.54°.	
Bereich der Indizes	-16<=h<=16, -24<=k<=25, -30<=l<=30	
Anzahl gemessene Reflexe	53461	
unabhängige Reflexe	13515 [R(int) = 0.0625]	

Vollständigkeit zu Theta = 30.54°	99.2 %
Reflexe >2sigma(I)°	11230
Methode der Strukturverfeinerung	Methode der kleinsten Fehlerquadrate F2
Reflexe / unterdrückt / Parameter	13515 / 0 / 464
Goodness-of-fit gegen F ²	0.956
Endgültiger Fehler R [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0333, wR2 = 0.0691
R (alle Daten)	R1 = 0.0439, wR2 = 0.0716
Absol. Strukturparameter (Flack-Par.)	0.013(5)
Extinktionskoeffizient	0.00000(4)
Größte und kleinste Restelektronendichte	1.264 und -0.877 × 10 ⁻⁶ e pm ⁻³

Tab. 69. Atomkoordinaten (× 10⁴) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren (pm² × 10⁻¹) für **10**. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Ir(1)	3775(1)	5859(1)	1202(1)	18(1)
P(1)	1832(1)	5935(1)	930(1)	21(1)
P(2)	5722(1)	5872(1)	1474(1)	20(1)
C(1)	4198(4)	5538(3)	251(2)	26(1)
C(2)	3987(4)	4929(3)	642(2)	27(1)
C(3)	3943(4)	4196(3)	663(2)	35(1)
C(4)	3393(4)	5152(3)	1982(2)	24(1)
C(5)	3325(3)	5934(3)	2145(2)	24(1)
C(6)	3049(4)	6297(3)	2632(2)	35(1)
C(11)	1572(3)	5821(3)	95(2)	24(1)
C(12)	1178(4)	5149(2)	-179(2)	28(1)
C(13)	1036(4)	5107(3)	-821(2)	37(1)
C(14)	1284(4)	5723(2)	-1187(2)	36(1)
C(15)	1674(4)	6383(3)	-925(2)	34(1)
C(16)	1824(4)	6430(3)	-289(2)	27(1)
C(21)	1112(4)	6840(2)	1067(2)	25(1)
C(22)	135(4)	7012(3)	727(2)	32(1)
C(23)	-413(4)	7685(3)	810(2)	38(1)
C(24)	-25(4)	8215(3)	1240(3)	38(1)
C(25)	924(4)	8044(3)	1580(2)	39(1)
C(26)	1487(3)	7361(3)	1501(2)	30(1)
C(31)	919(3)	5246(3)	1318(2)	27(1)
C(32)	1072(4)	4471(2)	1215(2)	33(1)
C(33)	373(4)	3942(3)	1505(3)	45(1)
C(34)	-475(5)	4175(4)	1896(3)	57(2)
C(35)	-608(5)	4934(4)	2020(3)	51(2)
C(36)	87(4)	5472(3)	1737(2)	37(1)
C(41)	6105(4)	5128(2)	2027(2)	25(1)
C(42)	6105(4)	4370(2)	1840(2)	32(1)
C(43)	6338(5)	3794(3)	2267(3)	44(1)
C(44)	6525(4)	3983(3)	2888(3)	47(2)
C(45)	6504(4)	4721(3)	3066(3)	44(1)
C(46)	6299(4)	5301(3)	2646(2)	32(1)
C(51)	6701(3)	5787(2)	821(2)	20(1)
C(52)	6671(4)	6391(3)	379(2)	27(1)
C(53)	7426(4)	6392(3)	-112(2)	30(1)
C(54)	8209(4)	5824(3)	-174(2)	35(1)
C(55)	8235(4)	5233(3)	241(2)	38(1)
C(56)	7493(4)	5211(3)	749(2)	29(1)
C(61)	6301(4)	6714(2)	1862(2)	23(1)
C(62)	5646(4)	7236(3)	2178(2)	27(1)
C(63)	6161(5)	7816(3)	2516(2)	33(1)

C(64)	7319(4)	7875(3)	2541(2)	36(1)
C(65)	7974(4)	7358(3)	2222(2)	35(1)
C(66)	7486(4)	6781(3)	1884(2)	28(1)
F(1)	3700(3)	3752(1)	1155(1)	44(1)
F(2)	4136(3)	3732(2)	176(1)	52(1)
F(3)	2982(3)	7061(2)	2706(1)	43(1)
F(4)	2772(3)	5990(2)	3185(1)	49(1)
Cl(1)	4001(1)	7190(1)	914(1)	26(1)

Tab. 70. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **10**.

Ir(1)-C(2)	204.9(4)
Ir(1)-C(5)	210.2(4)
Ir(1)-C(4)	213.9(4)
Ir(1)-C(1)	218.1(5)
Ir(1)-P(2)	238.05(10)
Ir(1)-P(1)	238.08(10)
Ir(1)-Cl(1)	244.16(10)
P(1)-C(31)	182.8(4)
P(1)-C(21)	183.2(4)
P(1)-C(11)	183.4(4)
P(2)-C(51)	182.8(4)
P(2)-C(41)	183.0(4)
P(2)-C(61)	183.5(4)
C(1)-C(2)	138.6(6)
C(1)-H(1A)	99(5)
C(1)-H(1B)	85(5)
C(2)-C(3)	129.5(6)
C(3)-F(1)	134.7(5)
C(3)-F(2)	134.9(5)
C(4)-C(5)	142.5(6)
C(4)-H(4A)	103(5)
C(4)-H(4B)	96(5)
C(5)-C(6)	127.0(6)
C(6)-F(4)	134.8(5)
C(6)-F(3)	135.8(5)
C(2)-Ir(1)-C(5)	130.47(18)
C(2)-Ir(1)-C(4)	91.23(18)
C(5)-Ir(1)-C(4)	39.26(17)
C(2)-Ir(1)-C(1)	38.10(17)
C(5)-Ir(1)-C(1)	168.56(18)
C(4)-Ir(1)-C(1)	129.32(18)
C(2)-Ir(1)-P(2)	91.94(12)
C(5)-Ir(1)-P(2)	90.48(10)
C(4)-Ir(1)-P(2)	91.06(13)
C(1)-Ir(1)-P(2)	90.59(13)
C(2)-Ir(1)-P(1)	91.10(12)
C(5)-Ir(1)-P(1)	89.31(10)
C(4)-Ir(1)-P(1)	91.19(13)
C(1)-Ir(1)-P(1)	90.37(13)
P(2)-Ir(1)-P(1)	176.17(4)
C(2)-Ir(1)-Cl(1)	127.28(13)
C(5)-Ir(1)-Cl(1)	102.25(13)
C(4)-Ir(1)-Cl(1)	141.47(13)
C(1)-Ir(1)-Cl(1)	89.19(13)
P(2)-Ir(1)-Cl(1)	86.92(4)
P(1)-Ir(1)-Cl(1)	89.39(4)
C(31)-P(1)-Ir(1)	115.01(13)
C(21)-P(1)-Ir(1)	117.40(14)

C(11)-P(1)-Ir(1)	113.37(12)
C(51)-P(2)-Ir(1)	115.17(13)
C(41)-P(2)-Ir(1)	113.15(15)
C(61)-P(2)-Ir(1)	118.82(16)
C(2)-C(1)-Ir(1)	65.8(2)
C(2)-C(1)-H(1A)	117(3)
Ir(1)-C(1)-H(1A)	116(3)
C(2)-C(1)-H(1B)	125(3)
Ir(1)-C(1)-H(1B)	122(3)
H(1A)-C(1)-H(1B)	107(4)
C(3)-C(2)-C(1)	143.2(4)
C(3)-C(2)-Ir(1)	140.6(3)
C(1)-C(2)-Ir(1)	76.1(3)
C(2)-C(3)-F(1)	128.0(4)
C(2)-C(3)-F(2)	124.8(4)
F(1)-C(3)-F(2)	107.2(4)
C(5)-C(4)-Ir(1)	69.0(2)
C(5)-C(4)-H(4A)	120(3)
Ir(1)-C(4)-H(4A)	114(3)
C(5)-C(4)-H(4B)	123(3)
Ir(1)-C(4)-H(4B)	111(3)
H(4A)-C(4)-H(4B)	111(4)
C(6)-C(5)-C(4)	134.8(4)
C(6)-C(5)-Ir(1)	153.3(4)
C(4)-C(5)-Ir(1)	71.8(2)
C(5)-C(6)-F(4)	126.1(4)
C(5)-C(6)-F(3)	127.6(5)
F(4)-C(6)-F(3)	106.3(4)

Tab. 71. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **10**. Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Ir(1)	18(1)	18(1)	19(1)	2(1)	0(1)	0(1)
P(1)	19(1)	22(1)	21(1)	2(1)	0(1)	-1(1)
P(2)	18(1)	20(1)	22(1)	3(1)	0(1)	1(1)
C(1)	24(2)	30(2)	22(2)	-3(2)	3(2)	-1(2)
C(2)	24(2)	31(2)	24(2)	-4(2)	1(2)	5(2)
C(3)	47(3)	25(2)	32(2)	-5(2)	6(2)	-1(3)
C(4)	26(2)	25(2)	22(2)	4(2)	-1(2)	0(2)
C(5)	17(2)	30(2)	24(2)	3(2)	0(1)	-1(2)
C(6)	44(3)	27(2)	32(3)	-1(2)	1(2)	4(2)
C(11)	21(2)	27(2)	23(2)	3(2)	-1(1)	2(2)
C(12)	34(2)	22(2)	28(2)	-3(2)	1(2)	0(2)
C(13)	51(3)	36(3)	23(2)	-8(2)	-3(2)	1(2)
C(14)	38(2)	48(3)	23(2)	-2(2)	3(2)	3(2)
C(15)	38(3)	41(3)	23(2)	8(2)	-1(2)	-1(2)
C(16)	28(2)	28(2)	25(2)	-2(2)	-4(2)	-3(2)
C(21)	20(2)	30(2)	26(2)	4(2)	-3(2)	1(2)
C(22)	25(2)	38(3)	33(3)	-1(2)	-8(2)	5(2)
C(23)	29(2)	49(3)	35(3)	-3(2)	-5(2)	15(2)
C(24)	33(2)	31(2)	49(3)	-7(2)	1(3)	13(2)
C(25)	34(3)	42(3)	39(3)	-16(2)	1(2)	3(2)
C(26)	24(2)	37(3)	28(2)	-4(2)	-1(2)	1(2)
C(31)	23(2)	38(2)	21(2)	10(2)	-2(2)	-6(2)
C(32)	33(2)	33(2)	33(2)	19(2)	-3(2)	-6(2)

C(33)	46(3)	40(3)	48(3)	17(2)	-16(3)	-20(2)
C(34)	40(3)	76(5)	53(3)	40(4)	-4(2)	-12(3)
C(35)	36(3)	84(5)	32(3)	27(3)	9(2)	2(3)
C(36)	28(2)	53(3)	30(3)	10(2)	-4(2)	4(2)
C(41)	19(2)	23(2)	34(2)	9(2)	-2(2)	4(2)
C(42)	28(2)	25(2)	45(3)	13(2)	4(2)	3(2)
C(43)	30(3)	30(2)	71(4)	19(2)	8(3)	2(2)
C(44)	29(3)	50(4)	62(4)	36(3)	-1(2)	-2(2)
C(45)	35(3)	55(3)	41(3)	24(3)	-3(2)	-6(2)
C(46)	32(2)	32(2)	32(2)	12(2)	0(2)	-3(2)
C(51)	21(2)	20(2)	20(2)	-6(2)	1(1)	-4(2)
C(52)	26(2)	29(2)	26(2)	6(2)	7(2)	-2(2)
C(53)	32(2)	35(3)	23(2)	4(2)	2(2)	-8(2)
C(54)	29(2)	49(3)	27(2)	-11(3)	11(2)	-13(3)
C(55)	33(3)	44(3)	37(3)	-8(2)	5(2)	8(2)
C(56)	27(2)	29(2)	30(2)	-2(2)	2(2)	3(2)
C(61)	21(2)	27(2)	20(2)	7(2)	-2(2)	-6(2)
C(62)	25(2)	27(2)	30(2)	0(2)	-2(2)	4(2)
C(63)	35(2)	32(2)	32(2)	-6(2)	1(2)	2(2)
C(64)	39(3)	36(3)	32(3)	-2(2)	-5(2)	-7(2)
C(65)	25(2)	41(3)	39(3)	0(2)	-7(2)	-5(2)
C(66)	23(2)	33(3)	29(2)	-1(2)	2(2)	-1(2)
F(1)	60(2)	29(1)	45(2)	4(1)	5(2)	1(1)
F(2)	77(2)	30(2)	49(2)	-12(1)	14(2)	-4(2)
F(3)	62(2)	32(2)	35(2)	-6(1)	0(1)	-1(1)
F(4)	74(2)	49(2)	23(1)	6(1)	9(1)	1(2)
Cl(1)	26(1)	22(1)	29(1)	5(1)	-2(1)	1(1)

Tab. 72. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **10**.

	x	y	z	U(eq)
H(1A)	3620(40)	5650(20)	-70(20)	31
H(1B)	4830(40)	5640(30)	90(20)	31
H(4A)	2670(40)	4840(30)	1930(20)	29
H(4B)	4020(40)	4840(30)	2090(20)	29
H(12)	1008	4722	73	33
H(13)	766	4652	-1006	44
H(14)	1186	5692	-1624	44
H(15)	1840	6808	-1181	41
H(16)	2104	6886	-113	33
H(22)	-150	6655	436	38
H(23)	-1068	7794	572	45
H(24)	-407	8683	1296	45
H(25)	1198	8400	1875	46
H(26)	2132	7250	1747	35
H(32)	1655	4303	945	40
H(33)	486	3416	1432	54
H(34)	-968	3813	2079	68
H(35)	-1178	5095	2302	61
H(36)	-8	5995	1830	44
H(42)	5946	4245	1420	39
H(43)	6369	3279	2136	52
H(44)	6666	3596	3185	56
H(45)	6633	4843	3490	52
H(46)	6291	5814	2782	38

H(52)	6136	6789	421	32
H(53)	7401	6790	-408	36
H(54)	8737	5840	-506	42
H(55)	8762	4834	184	45
H(56)	7532	4807	1040	34
H(62)	4847	7200	2166	33
H(63)	5707	8175	2732	39
H(64)	7664	8268	2777	43
H(65)	8772	7401	2235	42
H(66)	7947	6430	1666	34

Tab. 73. Torsionswinkel [°] für **10**.

C(5)-Ir(1)-C(1)-C(2)	-3.0(10)
C(4)-Ir(1)-C(1)-C(2)	0.5(4)
P(2)-Ir(1)-C(1)-C(2)	92.4(3)
P(1)-Ir(1)-C(1)-C(2)	-91.3(3)
Cl(1)-Ir(1)-C(1)-C(2)	179.3(3)
Ir(1)-C(1)-C(2)-C(3)	-179.7(8)
C(5)-Ir(1)-C(2)-C(3)	-1.0(7)
C(4)-Ir(1)-C(2)-C(3)	0.2(6)
C(1)-Ir(1)-C(2)-C(3)	179.8(7)
P(2)-Ir(1)-C(2)-C(3)	91.3(6)
P(1)-Ir(1)-C(2)-C(3)	-91.0(6)
Cl(1)-Ir(1)-C(2)-C(3)	178.9(5)
C(5)-Ir(1)-C(2)-C(1)	179.2(3)
C(4)-Ir(1)-C(2)-C(1)	-179.6(3)
P(2)-Ir(1)-C(2)-C(1)	-88.5(3)
P(1)-Ir(1)-C(2)-C(1)	89.2(3)
Cl(1)-Ir(1)-C(2)-C(1)	-0.9(3)
C(1)-C(2)-C(3)-F(1)	179.5(6)
C(1)-C(2)-C(3)-F(2)	-0.9(10)
C(2)-Ir(1)-C(4)-C(5)	-178.6(2)
C(1)-Ir(1)-C(4)-C(5)	-178.9(2)
P(2)-Ir(1)-C(4)-C(5)	89.5(2)
P(1)-Ir(1)-C(4)-C(5)	-87.4(2)
Cl(1)-Ir(1)-C(4)-C(5)	3.1(4)
Ir(1)-C(4)-C(5)-C(6)	176.5(6)
C(2)-Ir(1)-C(5)-C(6)	-172.6(7)
C(4)-Ir(1)-C(5)-C(6)	-174.5(9)
C(1)-Ir(1)-C(5)-C(6)	-170.2(8)
P(2)-Ir(1)-C(5)-C(6)	94.4(8)
P(1)-Ir(1)-C(5)-C(6)	-81.8(8)
Cl(1)-Ir(1)-C(5)-C(6)	7.5(8)
C(2)-Ir(1)-C(5)-C(4)	1.9(3)
C(1)-Ir(1)-C(5)-C(4)	4.3(9)
P(2)-Ir(1)-C(5)-C(4)	-91.1(2)
P(1)-Ir(1)-C(5)-C(4)	92.7(2)
Cl(1)-Ir(1)-C(5)-C(4)	-178.0(2)
C(4)-C(5)-C(6)-F(4)	3.7(9)
C(4)-C(5)-C(6)-F(3)	-176.9(5)

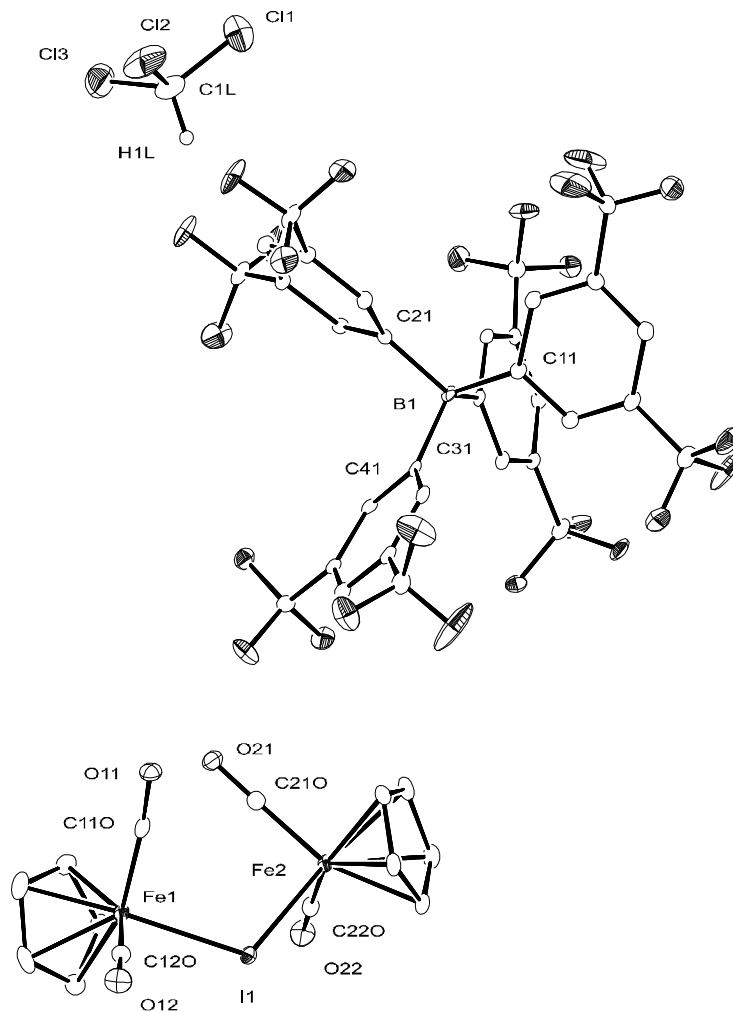


Abbildung 12: ORTEP-Darstellung der Struktur von **12** im Kristall

Tab. 74. Kristall- und Strukturdaten von **12**.

Bezeichnung	eiiabs	
Diffraktometer	SMART CCD, Bruker AXS	
Farbe	braun	
Summenformel	$C_{93} H_{45} B_2 Cl_3 F_{48} Fe_4 I_2 O_8$	
Molmasse	2807.46 g/mol	
Meßtemperatur	143(2) K	
Wellenlänge	71.073 pm	
Kristallsystem	Triklin	
Raumgruppe	P-1	
Zelldimensionen	a = 1371.70(10) pm	$\alpha = 100.474(2)^\circ$.
	b = 1402.22(14) pm	$\beta = 92.491(2)^\circ$.
	c = 3100.8(2) pm	$\gamma = 119.2810(10)^\circ$.
Volumen	5.0541(7) nm ³	
Z	2	
Dichte (berechnet)	1.845 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	1.397 mm ⁻¹	
Absorptionskorrektur	Keine	
F(000)	2740	
Kristalldimensionen	0.3 x 0.2 x 0.2 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	1.69 bis 29.64°.	
Bereich der Indizes	-18<=h<=19, -19<=k<=18, -42<=l<=42	

Anzahl gemessene Reflexe	50388
unabhängige Reflexe	25244 [R(int) = 0.0525]
Vollständigkeit zu Theta = 29.64°	88.4 %
Reflexe >2sigma(I)°	18435
Methode der Strukturverfeinerung	Methode der kleinsten Fehlerquadrate F ²
Reflexe / davon unterdrückt / Parameter	25244 / 0 / 1441
Goodness-of-fit gegen F ²	0.951
Entgültiger Fehler R [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0546, wR2 = 0.1290
R (alle Daten)	R1 = 0.0796, wR2 = 0.1409
Grösste und kleinste Restelektronendichte	1.510 und -1.922 10 ⁻⁶ e.pm ⁻³

Tab. 75. Atomkoordinaten (x 10⁴) und equivalente isotrope Temperaturfaktoren (pm²x 10⁻¹) für 12. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
I(1)	5570(1)	1100(1)	6830(1)	19(1)
Fe(2)	6196(1)	63(1)	6227(1)	16(1)
Fe(1)	4513(1)	1984(1)	6510(1)	16(1)
B(1)	10948(3)	2604(3)	4093(1)	14(1)
C(11)	12325(3)	3112(3)	4170(1)	15(1)
C(12)	12862(3)	3030(3)	4545(1)	18(1)
C(13)	14001(3)	3358(3)	4603(1)	19(1)
C(14)	14672(3)	3780(3)	4283(1)	19(1)
C(15)	14159(3)	3856(3)	3906(1)	18(1)
C(16)	13017(3)	3533(3)	3848(1)	17(1)
C(17)	14517(4)	3227(4)	5011(2)	26(1)
C(18)	14840(4)	4302(4)	3550(2)	24(1)
C(21)	10515(3)	3061(3)	3719(1)	15(1)
C(22)	11098(3)	4175(3)	3668(1)	17(1)
C(23)	10666(3)	4536(3)	3358(1)	18(1)
C(24)	9626(3)	3823(3)	3092(1)	18(1)
C(25)	9018(3)	2732(3)	3146(1)	16(1)
C(26)	9458(3)	2370(3)	3451(1)	16(1)
C(27)	11356(4)	5721(3)	3313(2)	27(1)
C(28)	7893(4)	1909(3)	2871(2)	26(1)
C(31)	10430(3)	1241(3)	3923(1)	14(1)
C(32)	10379(3)	761(3)	3479(1)	16(1)
C(33)	9997(3)	-376(3)	3322(1)	16(1)
C(34)	9668(3)	-1100(3)	3612(1)	17(1)
C(35)	9726(3)	-644(3)	4056(1)	16(1)
C(36)	10079(3)	498(3)	4206(1)	16(1)
C(37)	9905(4)	-827(3)	2839(1)	23(1)
C(38)	9430(4)	-1369(3)	4382(1)	22(1)
C(41)	10495(3)	2940(3)	4542(1)	14(1)
C(42)	9347(3)	2345(3)	4579(1)	16(1)
C(43)	8902(3)	2673(3)	4934(1)	17(1)
C(44)	9600(3)	3611(3)	5272(1)	19(1)
C(45)	10741(3)	4209(3)	5245(1)	18(1)
C(46)	11181(3)	3891(3)	4887(1)	18(1)
C(47)	7659(3)	1974(3)	4948(1)	22(1)
C(48)	11526(4)	5199(4)	5615(2)	26(1)
C(11R)	3077(3)	371(3)	6253(2)	25(1)
C(12R)	2921(3)	889(4)	6660(2)	27(1)
C(13R)	2982(4)	1890(4)	6604(2)	33(1)
C(14R)	3192(4)	2010(4)	6171(2)	35(1)
C(15R)	3239(4)	1054(4)	5952(2)	29(1)

C(21R)	7882(3)	1152(3)	6554(2)	22(1)
C(22R)	7851(3)	1043(3)	6098(1)	21(1)
C(23R)	7406(3)	-119(3)	5889(2)	24(1)
C(24R)	7165(3)	-716(3)	6232(2)	25(1)
C(25R)	7442(3)	67(3)	6644(2)	24(1)
C(11O)	5522(3)	2688(3)	6162(1)	22(1)
C(12O)	5202(4)	3170(3)	6973(1)	23(1)
C(21O)	5571(3)	321(3)	5772(1)	20(1)
C(22O)	4960(4)	-1265(3)	6219(1)	24(1)
O(11)	6110(3)	3159(3)	5931(1)	29(1)
O(12)	5609(3)	3933(3)	7265(1)	36(1)
O(21)	5186(3)	484(3)	5485(1)	27(1)
O(22)	4197(3)	-2118(3)	6207(1)	35(1)
F(171)	14095(3)	3446(3)	5375(1)	50(1)
F(172)	14336(4)	2199(3)	4973(1)	66(1)
F(173)	15625(2)	3940(3)	5118(1)	48(1)
F(181)	14284(3)	3764(4)	3145(1)	73(1)
F(182)	15790(3)	4307(5)	3568(1)	81(2)
F(183)	15092(4)	5348(3)	3556(2)	83(2)
F(271)	11652(3)	6476(2)	3701(1)	38(1)
F(272)	12341(2)	5928(2)	3171(1)	36(1)
F(273)	10834(3)	5991(2)	3023(1)	49(1)
F(281)	7534(2)	2351(2)	2600(1)	40(1)
F(282)	7886(3)	1033(2)	2613(1)	53(1)
F(283)	7081(2)	1462(3)	3119(1)	57(1)
F(371)	10040(2)	-1733(2)	2755(1)	29(1)
F(372)	8893(3)	-1163(3)	2613(1)	43(1)
F(373)	10684(3)	-67(2)	2645(1)	35(1)
F(381)	8885(3)	-2472(2)	4189(1)	43(1)
F(382)	10349(2)	-1145(2)	4647(1)	33(1)
F(383)	8754(2)	-1223(2)	4656(1)	28(1)
F(471)	7395(2)	967(2)	5036(1)	32(1)
F(472)	7289(2)	2454(2)	5251(1)	38(1)
F(473)	7022(2)	1708(2)	4555(1)	30(1)
F(481)	11950(4)	4927(3)	5923(1)	89(2)
F(482)	11045(3)	5757(3)	5803(1)	50(1)
F(483)	12416(3)	5988(3)	5472(1)	60(1)
Cl(1)	7759(1)	779(1)	1224(1)	61(1)
Cl(3)	5649(2)	724(2)	1249(1)	85(1)
Cl(2)	7757(2)	2814(1)	1599(1)	84(1)
C(1L)	7036(6)	1342(5)	1527(2)	49(1)

Tab. 76. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **12**.

I(1)-Fe(1)	258.93(6)
I(1)-Fe(2)	259.22(6)
Fe(2)-C(21O)	180.2(4)
Fe(2)-C(22O)	179.8(4)
Fe(1)-C(12O)	178.8(4)
Fe(1)-C(11O)	179.6(4)
B(1)-C(41)	163.4(5)
B(1)-C(11)	164.8(5)
B(1)-C(21)	164.1(5)
B(1)-C(31)	164.5(5)
C(11)-C(12)	140.3(5)
C(11)-C(16)	141.0(5)
C(12)-C(13)	138.9(5)
C(13)-C(14)	139.3(5)
C(13)-C(17)	150.8(6)

C(14)-C(15)	138.6(6)
C(15)-C(16)	139.4(5)
C(15)-C(18)	150.0(5)
C(17)-F(172)	131.8(5)
C(17)-F(173)	133.0(5)
C(17)-F(171)	134.5(6)
C(18)-F(182)	129.9(5)
C(18)-F(181)	131.8(6)
C(18)-F(183)	132.7(5)
C(21)-C(26)	140.1(5)
C(21)-C(22)	140.9(5)
C(22)-C(23)	139.6(5)
C(23)-C(24)	138.5(5)
C(23)-C(27)	149.5(5)
C(24)-C(25)	138.6(5)
C(25)-C(26)	139.2(5)
C(25)-C(28)	149.2(5)
C(27)-F(272)	134.8(5)
C(27)-F(273)	134.0(5)
C(27)-F(271)	134.5(5)
C(28)-F(282)	133.4(5)
C(28)-F(281)	133.5(5)
C(28)-F(283)	134.0(5)
C(31)-C(32)	140.1(5)
C(31)-C(36)	140.3(5)
C(32)-C(33)	138.9(5)
C(33)-C(34)	139.9(5)
C(33)-C(37)	149.0(6)
C(34)-C(35)	139.0(5)
C(35)-C(36)	140.2(5)
C(35)-C(38)	149.4(5)
C(37)-F(372)	134.0(5)
C(37)-F(373)	134.7(5)
C(37)-F(371)	135.3(5)
C(38)-F(382)	133.8(5)
C(38)-F(381)	134.2(4)
C(38)-F(383)	134.6(5)
C(41)-C(42)	139.8(5)
C(41)-C(46)	140.5(5)
C(42)-C(43)	139.4(5)
C(43)-C(44)	138.7(5)
C(43)-C(47)	150.1(5)
C(44)-C(45)	138.3(6)
C(45)-C(46)	139.4(5)
C(45)-C(48)	150.0(6)
C(47)-F(472)	132.0(5)
C(47)-F(473)	134.4(5)
C(47)-F(471)	136.1(4)
C(48)-F(481)	130.2(5)
C(48)-F(482)	132.7(5)
C(48)-F(483)	134.6(5)
C(11O)-O(11)	114.2(5)
C(12O)-O(12)	113.9(5)
C(21O)-O(21)	112.9(5)
C(22O)-O(22)	113.3(5)
Cl(1)-C(1L)	175.1(6)
Cl(3)-C(1L)	175.6(7)
Cl(2)-C(1L)	176.2(6)
C(1L)-H(1L)	100.00
Fe(1)-I(1)-Fe(2)	113.44(2)
C(21O)-Fe(2)-C(22O)	94.32(19)
C(21O)-Fe(2)-I(1)	94.21(12)

C(22O)-Fe(2)-I(1)	91.24(13)
C(25R)-Fe(2)-I(1)	97.34(12)
C(24R)-Fe(2)-I(1)	135.15(13)
C(23R)-Fe(2)-I(1)	153.39(12)
C(22R)-Fe(2)-I(1)	114.92(11)
C(21R)-Fe(2)-I(1)	88.06(11)
C(12O)-Fe(1)-C(11O)	92.74(19)
C(12O)-Fe(1)-I(1)	89.69(14)
C(11O)-Fe(1)-I(1)	96.89(13)
C(41)-B(1)-C(11)	112.6(3)
C(41)-B(1)-C(21)	104.5(3)
C(11)-B(1)-C(21)	114.0(3)
C(41)-B(1)-C(31)	113.1(3)
C(11)-B(1)-C(31)	103.1(3)
C(21)-B(1)-C(31)	109.8(3)
O(11)-C(11O)-Fe(1)	174.9(4)
O(12)-C(12O)-Fe(1)	177.4(4)
O(21)-C(21O)-Fe(2)	179.5(4)
O(22)-C(22O)-Fe(2)	177.9(4)
Cl(1)-C(1L)-Cl(3)	109.4(3)
Cl(1)-C(1L)-Cl(2)	110.2(3)
Cl(3)-C(1L)-Cl(2)	111.0(3)
Cl(1)-C(1L)-H(1L)	108.7
Cl(3)-C(1L)-H(1L)	108.7
Cl(2)-C(1L)-H(1L)	108.7

Tab. 77. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **12**. Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂
I(1)	24(1)	20(1)	21(1)	8(1)	5(1)	14(1)
Fe(2)	16(1)	11(1)	22(1)	6(1)	4(1)	7(1)
Fe(1)	15(1)	13(1)	22(1)	7(1)	4(1)	6(1)
B(1)	16(2)	12(2)	18(2)	10(2)	3(2)	7(2)
C(11)	16(2)	9(2)	20(2)	6(1)	3(1)	5(1)
C(12)	20(2)	14(2)	22(2)	8(1)	5(2)	9(2)
C(13)	21(2)	14(2)	22(2)	7(2)	1(2)	9(2)
C(14)	15(2)	14(2)	28(2)	8(2)	5(2)	6(1)
C(15)	20(2)	12(2)	26(2)	10(2)	9(2)	8(1)
C(16)	20(2)	10(2)	22(2)	7(1)	4(1)	8(1)
C(17)	23(2)	26(2)	29(2)	9(2)	-4(2)	10(2)
C(18)	23(2)	24(2)	32(2)	14(2)	13(2)	13(2)
C(21)	17(2)	13(2)	20(2)	7(1)	6(1)	8(1)
C(22)	16(2)	12(2)	25(2)	8(1)	5(1)	6(1)
C(23)	19(2)	13(2)	25(2)	10(2)	7(2)	8(1)
C(24)	21(2)	13(2)	22(2)	8(1)	4(2)	9(2)
C(25)	15(2)	13(2)	20(2)	6(1)	2(1)	6(1)
C(26)	16(2)	11(2)	20(2)	7(1)	4(1)	7(1)
C(27)	28(2)	18(2)	34(2)	15(2)	-1(2)	9(2)
C(28)	26(2)	17(2)	34(2)	13(2)	-3(2)	9(2)
C(31)	12(2)	13(2)	21(2)	9(1)	4(1)	7(1)
C(32)	15(2)	14(2)	22(2)	10(1)	7(1)	9(1)
C(33)	16(2)	15(2)	21(2)	8(1)	5(1)	10(1)
C(34)	18(2)	12(2)	22(2)	7(1)	2(1)	7(1)
C(35)	18(2)	14(2)	22(2)	9(1)	4(1)	9(1)
C(36)	15(2)	14(2)	21(2)	7(1)	2(1)	7(1)

C(37)	26(2)	22(2)	23(2)	7(2)	5(2)	13(2)
C(38)	27(2)	12(2)	27(2)	9(2)	2(2)	9(2)
C(41)	19(2)	11(2)	19(2)	9(1)	4(1)	10(1)
C(42)	20(2)	13(2)	16(2)	6(1)	2(1)	8(1)
C(43)	18(2)	17(2)	17(2)	8(1)	3(1)	10(2)
C(44)	26(2)	18(2)	19(2)	7(2)	4(2)	14(2)
C(45)	23(2)	16(2)	18(2)	4(1)	0(2)	12(2)
C(46)	19(2)	14(2)	22(2)	8(1)	2(2)	9(1)
C(47)	23(2)	20(2)	24(2)	9(2)	8(2)	11(2)
C(48)	27(2)	22(2)	26(2)	1(2)	-2(2)	12(2)
C(11R)	17(2)	16(2)	33(2)	4(2)	-2(2)	3(2)
C(12R)	15(2)	27(2)	33(2)	13(2)	8(2)	5(2)
C(13R)	19(2)	30(2)	48(3)	3(2)	6(2)	13(2)
C(14R)	21(2)	31(2)	55(3)	22(2)	1(2)	12(2)
C(15R)	19(2)	35(2)	25(2)	9(2)	-1(2)	9(2)
C(21R)	15(2)	16(2)	36(2)	6(2)	4(2)	9(2)
C(22R)	18(2)	16(2)	32(2)	12(2)	9(2)	9(2)
C(23R)	20(2)	17(2)	36(2)	5(2)	7(2)	10(2)
C(24R)	23(2)	15(2)	44(3)	11(2)	8(2)	11(2)
C(25R)	18(2)	25(2)	36(2)	16(2)	5(2)	12(2)
C(11O)	21(2)	22(2)	25(2)	8(2)	0(2)	11(2)
C(12O)	27(2)	19(2)	28(2)	11(2)	11(2)	13(2)
C(21O)	18(2)	17(2)	21(2)	5(2)	5(2)	6(2)
C(22O)	24(2)	21(2)	28(2)	8(2)	4(2)	13(2)
O(11)	26(2)	32(2)	29(2)	17(1)	10(1)	10(1)
O(12)	43(2)	22(2)	34(2)	0(1)	5(2)	12(2)
O(21)	27(2)	32(2)	22(2)	11(1)	2(1)	14(1)
O(22)	26(2)	18(2)	50(2)	12(1)	4(1)	2(1)
F(171)	52(2)	78(2)	31(2)	20(2)	3(1)	39(2)
F(172)	105(3)	30(2)	58(2)	4(2)	-37(2)	37(2)
F(173)	25(1)	59(2)	50(2)	29(2)	-7(1)	10(1)
F(181)	47(2)	95(3)	36(2)	12(2)	21(2)	7(2)
F(182)	52(2)	162(4)	87(3)	94(3)	50(2)	73(3)
F(183)	140(4)	52(2)	100(3)	60(2)	86(3)	61(3)
F(271)	50(2)	12(1)	49(2)	7(1)	5(1)	12(1)
F(272)	29(1)	23(1)	45(2)	19(1)	10(1)	2(1)
F(273)	40(2)	25(1)	76(2)	33(2)	-15(2)	6(1)
F(281)	40(2)	28(1)	47(2)	13(1)	-20(1)	13(1)
F(282)	53(2)	25(1)	67(2)	-15(1)	-29(2)	20(1)
F(283)	20(1)	73(2)	57(2)	32(2)	1(1)	1(2)
F(371)	40(2)	20(1)	28(1)	2(1)	6(1)	17(1)
F(372)	40(2)	69(2)	23(1)	-2(1)	-6(1)	34(2)
F(373)	55(2)	25(1)	22(1)	11(1)	17(1)	16(1)
F(381)	76(2)	12(1)	33(2)	11(1)	7(1)	15(1)
F(382)	32(1)	41(2)	38(2)	27(1)	5(1)	21(1)
F(383)	32(1)	30(1)	31(1)	22(1)	15(1)	16(1)
F(471)	26(1)	23(1)	45(2)	22(1)	10(1)	7(1)
F(472)	26(1)	37(2)	45(2)	1(1)	17(1)	12(1)
F(473)	18(1)	35(1)	33(1)	14(1)	3(1)	9(1)
F(481)	138(4)	32(2)	67(3)	-11(2)	-74(3)	36(2)
F(482)	43(2)	38(2)	56(2)	-20(2)	0(2)	21(2)
F(483)	43(2)	32(2)	58(2)	-13(2)	13(2)	-8(1)
CI(1)	41(1)	36(1)	96(1)	15(1)	16(1)	12(1)
CI(3)	54(1)	118(2)	110(2)	74(2)	31(1)	47(1)
CI(2)	154(2)	42(1)	65(1)	24(1)	14(1)	53(1)
C(1L)	70(4)	43(3)	40(3)	19(2)	10(3)	30(3)

Tab. 78. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **12**.

	x	y	z	U(eq)
H(12)	12429	2740	4769	22
H(14)	15452	4006	4322	23
H(16)	12696	3598	3586	20
H(22)	11805	4697	3850	21
H(24)	9340	4073	2880	22
H(26)	9017	1616	3478	19
H(32)	10617	1234	3276	19
H(34)	9414	-1877	3508	21
H(36)	10081	777	4510	19
H(42)	8852	1692	4355	19
H(44)	9302	3837	5515	23
H(46)	11966	4328	4875	21
H(11R)	3072	-320	6194	30
H(12R)	2798	612	6922	32
H(13R)	2896	2401	6823	39
H(14R)	3284	2617	6048	42
H(15R)	3360	903	5654	34
H(21R)	8153	1836	6770	26
H(22R)	8086	1639	5949	25
H(23R)	7292	-432	5580	29
H(24R)	6871	-1501	6193	30
H(25R)	7350	-102	6928	29
H(1L)	7002	1162	1825	58

Tab. 79. Torsionswinkel [°] für **12**.

Fe(1)-I(1)-Fe(2)-C(21O)	-2.17(19)
Fe(1)-I(1)-Fe(2)-C(22O)	-96.5(2)
Fe(2)-I(1)-Fe(1)-C(12O)	-142.1(2)
Fe(2)-I(1)-Fe(1)-C(11O)	-49.5(2)

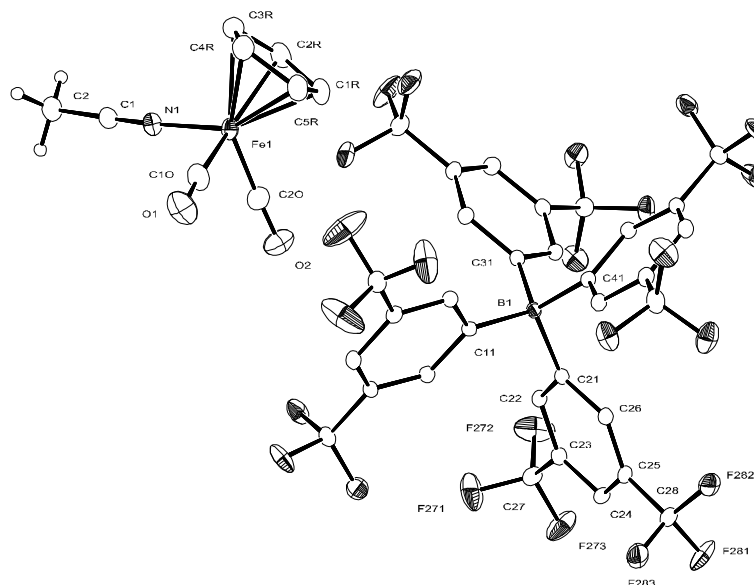


Abbildung 13: ORTEP-Darstellung der Struktur von **13** im Kristall

Tab. 80. Kristall- und Strukturdaten von **13**.

Identifikationscode	fecla	
Diffraktometer	SMART CCD, Bruker AXS	
Farbe	rotorange	
Summenformel	$C_{41}H_{20}BF_{24}FeNO_2$	
Molmasse	1081.24 g/mol	
Messtemperatur	133(2) K	
Wellenlänge	71.073 pm	
Kristallsystem	Monoklin	
Raumgruppe	$P2_1/c$	
Zelldimensionen	$a = 1598.03(9)$ pm	$\alpha = 90^\circ$.
	$b = 1649.14(10)$ pm	$\beta = 91.5490(10)^\circ$.
	$c = 1612.15(10)$ pm	$\gamma = 90^\circ$.
Volumen	$4.2471(4)$ nm ³	
Z	4	
Dichte (berechnet)	1.691 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	0.499 mm ⁻¹	
Absorptionskorrektur	Semi empirisch (SADABS) [116, 117]	
Max. und min. Transmission	0.7561 und 1.0000	
F(000)	2144	
Kristalldimensionen	$0.6 \times 0.3 \times 0.05$ mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	1.77 bis 31.34° .	
Bereich der Indizes	$-23 \leq h \leq 23$, $-23 \leq k \leq 23$, $-23 \leq l \leq 23$	
Anzahl gemessene Reflexe	13071	
unabhängige Reflexe	13071 [R(int) = 0.0417]	
Vollständigkeit zu $\Theta = 31.34^\circ$	93.7 %	
Reflexe $>2\sigma(I)^\circ$	8715	
Methode der Strukturverfeinerung	Methode der kleinsten Fehlerquadrate F^2	
Reflexe / unterdrückt / Parameter	13071 / 0 / 631	
Goodness-of-fit gegen F^2	0.878	
Endgültiger Fehler R [$I > 2\sigma(I)$]	$R1 = 0.0447$, $wR2 = 0.0993$	
R (alle Daten)	$R1 = 0.0751$, $wR2 = 0.1112$	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.935 und -0.625×10^{-6} e pm ⁻³	

Tab. 81. Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **13**.
 $U(\text{eq})$ ist definiert als $1/3$ des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Fe(1)	7467(1)	8834(1)	5854(1)	29(1)
C(10)	8199(2)	8029(2)	6097(2)	43(1)
C(20)	8072(2)	9562(2)	6446(1)	41(1)
C(1)	8188(1)	9310(1)	4188(1)	33(1)
C(2)	8477(2)	9569(2)	3380(1)	45(1)
C(1R)	6441(1)	9143(1)	6552(1)	37(1)
C(2R)	6312(1)	9424(2)	5728(1)	40(1)
C(3R)	6308(1)	8736(2)	5208(1)	45(1)
C(4R)	6446(2)	8039(2)	5692(2)	44(1)
C(5R)	6533(1)	8294(1)	6534(1)	38(1)
C(11)	8124(1)	10529(1)	9540(1)	19(1)
C(12)	8930(1)	10747(1)	9301(1)	21(1)
C(13)	9466(1)	10204(1)	8922(1)	22(1)
C(14)	9232(1)	9409(1)	8773(1)	24(1)
C(15)	8436(1)	9174(1)	9004(1)	23(1)
C(16)	7895(1)	9722(1)	9370(1)	22(1)
C(17)	10301(1)	10509(1)	8654(1)	26(1)
C(18)	8164(1)	8319(1)	8852(1)	32(1)
C(21)	8062(1)	11812(1)	10544(1)	20(1)
C(22)	8482(1)	12485(1)	10220(1)	21(1)
C(23)	9009(1)	12976(1)	10703(1)	23(1)
C(24)	9152(1)	12816(1)	11541(1)	25(1)
C(25)	8743(1)	12155(1)	11877(1)	23(1)
C(26)	8209(1)	11672(1)	11394(1)	21(1)
C(27)	9433(1)	13676(1)	10300(1)	31(1)
C(28)	8916(1)	11941(1)	12768(1)	29(1)
C(31)	7040(1)	11739(1)	9197(1)	20(1)
C(32)	6735(1)	12523(1)	9342(1)	21(1)
C(33)	6335(1)	12985(1)	8728(1)	22(1)
C(34)	6208(1)	12683(1)	7930(1)	24(1)
C(35)	6496(1)	11905(1)	7772(1)	23(1)
C(36)	6905(1)	11448(1)	8386(1)	22(1)
C(37)	6072(1)	13830(1)	8933(1)	28(1)
C(38)	6347(1)	11546(1)	6928(1)	31(1)
C(41)	6766(1)	10772(1)	10502(1)	21(1)
C(42)	5951(1)	11078(1)	10524(1)	22(1)
C(43)	5342(1)	10742(1)	11026(1)	24(1)
C(44)	5514(1)	10071(1)	11514(1)	26(1)
C(45)	6319(1)	9750(1)	11502(1)	24(1)
C(46)	6931(1)	10097(1)	11015(1)	22(1)
C(47)	4494(1)	11124(1)	11030(1)	31(1)
C(48)	6499(1)	9023(1)	12027(1)	34(1)
B(1)	7493(1)	11204(1)	9944(1)	19(1)
F(171)	10232(1)	10974(1)	7974(1)	44(1)
F(172)	10688(1)	10970(1)	9226(1)	48(1)
F(173)	10834(1)	9917(1)	8473(1)	48(1)
F(181)	8767(1)	7794(1)	8865(2)	103(1)
F(182)	7599(1)	8057(1)	9365(1)	81(1)
F(183)	7784(2)	8230(1)	8116(1)	103(1)
F(271)	10017(1)	13444(1)	9777(1)	68(1)
F(272)	8908(1)	14123(1)	9842(1)	70(1)
F(273)	9809(1)	14178(1)	10832(1)	64(1)
F(281)	9130(1)	12576(1)	13233(1)	54(1)
F(282)	8261(1)	11596(1)	13128(1)	43(1)

F(283)	9545(1)	11403(1)	12857(1)	52(1)
F(371)	5670(1)	13870(1)	9657(1)	38(1)
F(372)	6726(1)	14338(1)	9027(1)	47(1)
F(373)	5556(1)	14161(1)	8359(1)	43(1)
F(381)	7033(1)	11208(1)	6620(1)	54(1)
F(382)	5783(1)	10942(1)	6938(1)	51(1)
F(383)	6070(1)	12073(1)	6366(1)	60(1)
F(471)	4158(1)	11221(1)	10269(1)	44(1)
F(472)	4504(1)	11854(1)	11383(1)	74(1)
F(473)	3939(1)	10687(1)	11445(1)	52(1)
F(481)	7212(1)	8643(1)	11839(1)	45(1)
F(482)	5888(1)	8463(1)	11959(1)	53(1)
F(483)	6563(1)	9198(1)	12840(1)	51(1)
O(1)	8639(1)	7524(1)	6292(1)	66(1)
O(2)	8439(1)	10010(1)	6853(1)	62(1)
N(1)	7950(1)	9118(1)	4814(1)	33(1)

Tab. 82. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **13**.

Fe(1)-C(2O)	180.0(3)
Fe(1)-C(1O)	180.5(2)
Fe(1)-N(1)	192.27(17)
Fe(1)-C(5R)	207.7(2)
Fe(1)-C(1R)	207.8(2)
Fe(1)-C(2R)	209.2(2)
Fe(1)-C(4R)	210.5(2)
Fe(1)-C(3R)	210.7(2)
C(1O)-O(1)	112.9(3)
C(2O)-O(2)	113.9(3)
C(1)-N(1)	113.2(3)
C(1)-C(2)	145.8(3)
C(2)-H(2A)	98.00
C(2)-H(2B)	98.00
C(2)-H(2C)	98.00
C(1R)-C(5R)	140.9(3)
C(1R)-C(2R)	141.7(3)
C(2R)-C(3R)	141.1(4)
C(3R)-C(4R)	140.3(4)
C(4R)-C(5R)	142.3(3)
C(21)-C(26)	140.3(2)
C(21)-C(22)	140.5(2)
C(21)-B(1)	165.0(3)
C(22)-C(23)	139.1(2)
C(23)-C(24)	138.9(2)
C(23)-C(27)	149.6(3)
C(24)-C(25)	138.8(3)
C(25)-C(26)	139.1(2)
C(25)-C(28)	149.8(2)
C(27)-F(273)	132.4(2)
C(27)-F(272)	132.6(3)
C(27)-F(271)	133.1(3)
C(28)-F(281)	132.8(2)
C(28)-F(282)	133.8(2)
C(28)-F(283)	134.5(2)
C(31)-B(1)	164.6(3)
C(41)-B(1)	165.1(3)
C(2O)-Fe(1)-C(1O)	92.32(11)
C(2O)-Fe(1)-N(1)	94.47(9)
C(1O)-Fe(1)-N(1)	95.49(9)

O(1)-C(1O)-Fe(1)	176.2(2)
O(2)-C(2O)-Fe(1)	176.9(2)
N(1)-C(1)-C(2)	178.7(2)
C(26)-C(21)-C(22)	115.10(16)
C(26)-C(21)-B(1)	123.20(15)
C(22)-C(21)-B(1)	121.58(14)
C(23)-C(22)-C(21)	122.71(16)
C(24)-C(23)-C(22)	120.99(17)
C(24)-C(23)-C(27)	120.26(17)
C(22)-C(23)-C(27)	118.74(16)
C(23)-C(24)-C(25)	117.45(16)
C(26)-C(25)-C(24)	121.37(16)
C(26)-C(25)-C(28)	119.71(17)
C(24)-C(25)-C(28)	118.85(16)
C(25)-C(26)-C(21)	122.37(16)
F(273)-C(27)-F(272)	106.42(19)
F(273)-C(27)-F(271)	106.04(18)
F(272)-C(27)-F(271)	104.52(18)
F(273)-C(27)-C(23)	113.85(16)
F(272)-C(27)-C(23)	112.60(17)
F(271)-C(27)-C(23)	112.69(18)
F(281)-C(28)-F(282)	106.49(16)
F(281)-C(28)-F(283)	106.28(17)
F(282)-C(28)-F(283)	105.32(17)
F(281)-C(28)-C(25)	113.14(17)
F(282)-C(28)-C(25)	112.97(16)
F(283)-C(28)-C(25)	112.05(15)
C(11)-B(1)-C(31)	109.57(13)
C(11)-B(1)-C(21)	107.99(13)
C(31)-B(1)-C(21)	109.13(14)
C(11)-B(1)-C(41)	111.83(14)
C(31)-B(1)-C(41)	109.15(13)
C(21)-B(1)-C(41)	109.12(13)
C(1)-N(1)-Fe(1)	175.55(18)

Tab. 83. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **13**. Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂
Fe(1)	34(1)	26(1)	27(1)	2(1)	6(1)	2(1)
C(1O)	45(1)	36(1)	48(1)	7(1)	10(1)	5(1)
C(2O)	46(1)	42(1)	34(1)	4(1)	0(1)	0(1)
C(1)	30(1)	38(1)	32(1)	0(1)	5(1)	1(1)
C(2)	41(1)	61(2)	33(1)	5(1)	10(1)	-2(1)
C(1R)	43(1)	33(1)	36(1)	2(1)	14(1)	3(1)
C(2R)	36(1)	42(1)	42(1)	11(1)	11(1)	9(1)
C(3R)	34(1)	70(2)	32(1)	0(1)	2(1)	-5(1)
C(4R)	45(1)	41(1)	47(1)	-12(1)	9(1)	-10(1)
C(5R)	45(1)	30(1)	39(1)	5(1)	12(1)	-1(1)
C(11)	18(1)	23(1)	17(1)	1(1)	-1(1)	2(1)
C(12)	21(1)	22(1)	20(1)	2(1)	1(1)	1(1)
C(13)	19(1)	27(1)	19(1)	4(1)	2(1)	3(1)
C(14)	24(1)	26(1)	21(1)	0(1)	3(1)	5(1)
C(15)	25(1)	23(1)	22(1)	-2(1)	0(1)	1(1)
C(16)	19(1)	26(1)	20(1)	-1(1)	1(1)	0(1)
C(17)	22(1)	30(1)	26(1)	6(1)	5(1)	5(1)

C(18)	31(1)	28(1)	36(1)	-7(1)	6(1)	0(1)
C(21)	18(1)	22(1)	19(1)	-2(1)	2(1)	3(1)
C(22)	22(1)	25(1)	18(1)	1(1)	1(1)	1(1)
C(23)	23(1)	25(1)	22(1)	0(1)	3(1)	-2(1)
C(24)	25(1)	29(1)	21(1)	-5(1)	-1(1)	-2(1)
C(25)	25(1)	28(1)	16(1)	-2(1)	1(1)	3(1)
C(26)	21(1)	23(1)	20(1)	-1(1)	2(1)	1(1)
C(27)	33(1)	34(1)	26(1)	-1(1)	-1(1)	-10(1)
C(28)	32(1)	35(1)	19(1)	-2(1)	0(1)	-1(1)
C(31)	18(1)	22(1)	19(1)	0(1)	2(1)	-1(1)
C(32)	21(1)	24(1)	19(1)	-2(1)	1(1)	-1(1)
C(33)	20(1)	21(1)	24(1)	-1(1)	3(1)	0(1)
C(34)	26(1)	25(1)	22(1)	3(1)	-1(1)	1(1)
C(35)	26(1)	24(1)	19(1)	-1(1)	1(1)	0(1)
C(36)	24(1)	20(1)	21(1)	-1(1)	1(1)	1(1)
C(37)	30(1)	25(1)	28(1)	0(1)	0(1)	4(1)
C(38)	42(1)	27(1)	23(1)	-2(1)	-3(1)	5(1)
C(41)	21(1)	23(1)	19(1)	-3(1)	0(1)	-1(1)
C(42)	21(1)	25(1)	20(1)	-1(1)	1(1)	0(1)
C(43)	20(1)	30(1)	22(1)	-5(1)	2(1)	-2(1)
C(44)	25(1)	28(1)	24(1)	-4(1)	6(1)	-6(1)
C(45)	29(1)	22(1)	22(1)	-2(1)	4(1)	-1(1)
C(46)	22(1)	23(1)	22(1)	-3(1)	3(1)	1(1)
C(47)	20(1)	41(1)	31(1)	-5(1)	4(1)	-2(1)
C(48)	40(1)	27(1)	34(1)	3(1)	11(1)	2(1)
B(1)	17(1)	21(1)	19(1)	0(1)	2(1)	1(1)
F(171)	31(1)	65(1)	37(1)	28(1)	12(1)	8(1)
F(172)	35(1)	69(1)	40(1)	-7(1)	8(1)	-22(1)
F(173)	26(1)	37(1)	81(1)	7(1)	21(1)	10(1)
F(181)	45(1)	29(1)	234(3)	-28(1)	10(1)	4(1)
F(182)	105(1)	35(1)	106(1)	-17(1)	66(1)	-25(1)
F(183)	180(2)	60(1)	67(1)	-8(1)	-46(1)	-49(1)
F(271)	76(1)	56(1)	75(1)	0(1)	49(1)	-16(1)
F(272)	62(1)	53(1)	93(1)	44(1)	-27(1)	-22(1)
F(273)	96(1)	60(1)	35(1)	-5(1)	0(1)	-52(1)
F(281)	97(1)	47(1)	19(1)	-7(1)	-3(1)	-21(1)
F(282)	44(1)	63(1)	23(1)	10(1)	3(1)	-10(1)
F(283)	49(1)	79(1)	26(1)	7(1)	-4(1)	27(1)
F(371)	48(1)	34(1)	33(1)	-5(1)	10(1)	12(1)
F(372)	44(1)	24(1)	72(1)	-7(1)	5(1)	-6(1)
F(373)	58(1)	35(1)	36(1)	1(1)	-8(1)	21(1)
F(381)	52(1)	78(1)	33(1)	-23(1)	4(1)	14(1)
F(382)	66(1)	53(1)	36(1)	-16(1)	-1(1)	-21(1)
F(383)	112(1)	42(1)	23(1)	-2(1)	-20(1)	22(1)
F(471)	29(1)	69(1)	35(1)	15(1)	3(1)	12(1)
F(472)	30(1)	64(1)	126(2)	-57(1)	-1(1)	10(1)
F(473)	22(1)	87(1)	46(1)	22(1)	10(1)	1(1)
F(481)	48(1)	34(1)	54(1)	14(1)	17(1)	13(1)
F(482)	53(1)	28(1)	77(1)	12(1)	11(1)	-8(1)
F(483)	80(1)	45(1)	29(1)	10(1)	6(1)	12(1)
O(1)	63(1)	51(1)	86(2)	22(1)	12(1)	23(1)
O(2)	72(1)	60(1)	52(1)	-6(1)	-14(1)	-14(1)
N(1)	34(1)	32(1)	34(1)	1(1)	6(1)	2(1)

Tab. 84. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **13**.

	x	y	z	U(eq)
H(2A)	8073	9951	3131	67
H(2B)	8529	9096	3017	67
H(2C)	9023	9834	3448	67
H(1R)	6462	9472	7036	44
H(2R)	6242	9972	5558	47
H(3R)	6225	8743	4622	55
H(4R)	6475	7497	5495	53
H(5R)	6636	7952	7000	45
H(12)	9118	11285	9401	25
H(14)	9602	9037	8522	29
H(16)	7352	9544	9510	26
H(22)	8403	12609	9648	26
H(24)	9516	13147	11872	30
H(26)	7933	11230	11650	25
H(32)	6805	12748	9882	25
H(34)	5934	12996	7509	29
H(36)	7100	10922	8252	26
H(42)	5807	11532	10186	26
H(44)	5097	9836	11847	31
H(46)	7478	9871	11030	27

Tab. 85. Torsionswinkel [°] für **13**.

C(2O)-Fe(1)-C(1O)-O(1)	75(4)
N(1)-Fe(1)-C(1O)-O(1)	169(4)
C(1O)-Fe(1)-C(2O)-O(2)	-81(4)
N(1)-Fe(1)-C(2O)-O(2)	-177(100)
C(2)-C(1)-N(1)-Fe(1)	11(14)
C(2O)-Fe(1)-N(1)-C(1)	-105(2)
C(1O)-Fe(1)-N(1)-C(1)	162(2)

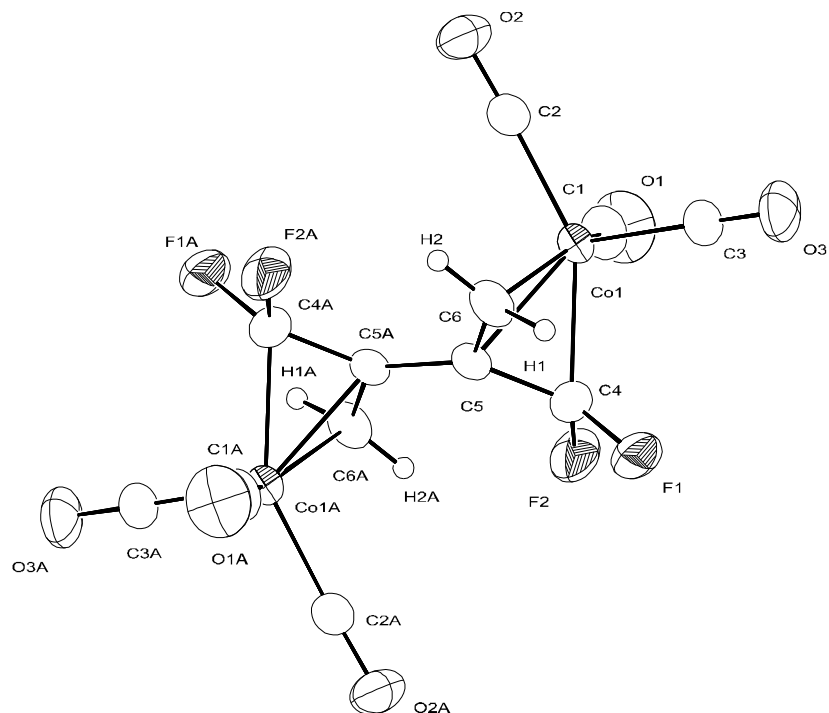


Abbildung 14: ORTEP-Darstellung der Struktur von **15a** im Kristall

Tab. 86. Kristall- und Strukturdaten von **15a**.

Identifikationscode	codfa_psi	
Diffraktometer	Stoe-Vierkreisdiffraktometer	
Farbe	gelb	
Summenformel	$C_{12} H_4 Co_2 F_4 O_6$	
Molmasse	438.01 g/mol	
Messtemperatur	293(2) K	
Wellenlänge	71.069 pm	
Kristallsystem	Triklin	
Raumgruppe	P-1,	
Zelldimensionen	$a = 667.50(10)$ pm	$\alpha = 92.77(2)^\circ$.
	$b = 688.6(2)$ pm	$\beta = 101.55(2)^\circ$.
	$c = 851.4(2)$ pm	$\gamma = 100.05(2)^\circ$.
Volumen	$0.37612(15)$ nm ³	
Z	1	
Dichte (berechnet)	1.934 Mg/m ³	
Zerfall während der Messung	0.0%	
Absorptionskoeffizient	2.276 mm ⁻¹	
Absorptionskorrektur	Psi-scan [115]	
Max. und min. Transmission	0.99628 und 0.93642	
F(000)	214	
Kristalldimensionen	$0.50 \times 0.45 \times 0.40$ mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	2.45 bis 29.99°.	
Bereich der Indizes	$-9 \leq h \leq 8, -9 \leq k \leq 9, -6 \leq l \leq 11$	
Anzahl gemessene Reflexe	2593	
unabhängige Reflexe	2193 [R(int) = 0.0117]	
Vollständigkeit zu Theta = 29.99°	99.8 %	
Reflexe >2 σ (I)°	1955	
Methode der Strukturverfeinerung	Methode der kleinsten Fehlerquadrate F ²	
Reflexe / unterdrückt / Parameter	2193 / 0 / 117	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.061	

Endgültiger Fehler R [$I > 2\sigma(I)$] R1 = 0.0228, wR2 = 0.0601
R (alle Daten) R1 = 0.0293, wR2 = 0.0629
Größte und kleinste Restelektronendichte 0.333 und $-0.179 \times 10^{-6} \text{ e pm}^{-3}$

Tab. 87. Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **15a**.
U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Co(1)	3467(1)	7687(1)	7593(1)	40(1)
C(1)	5673(3)	6766(3)	7165(3)	63(1)
C(2)	2410(3)	5551(3)	8548(2)	54(1)
C(3)	1635(3)	7529(3)	5660(2)	53(1)
C(4)	4906(3)	10453(3)	7744(2)	56(1)
C(5)	4274(2)	10045(2)	9230(2)	43(1)
C(6)	2074(3)	9476(3)	8894(2)	51(1)
O(1)	7063(3)	6213(4)	6875(3)	104(1)
O(2)	1747(3)	4278(2)	9187(2)	87(1)
O(3)	487(3)	7468(3)	4493(2)	82(1)
F(1)	3938(3)	11678(2)	6779(2)	85(1)
F(2)	6940(2)	10933(2)	7712(2)	86(1)

Tab. 88. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **15a**.

Co(1)-C(1)	179.5(2)
Co(1)-C(2)	181.8(2)
Co(1)-C(3)	182.91(18)
Co(1)-C(4)	196.32(19)
Co(1)-C(5)	201.07(16)
Co(1)-C(6)	207.06(18)
C(1)-O(1)	112.8(3)
C(2)-O(2)	112.6(2)
C(3)-O(3)	112.1(2)
C(4)-F(2)	134.6(2)
C(4)-F(1)	136.0(2)
C(4)-C(5)	143.7(3)
C(5)-C(6)	141.9(2)
C(5)-C(5)#1	147.8(3)
C(4)-Co(1)-C(5)	42.36(8)
C(4)-Co(1)-C(6)	69.90(9)
C(5)-Co(1)-C(6)	40.64(7)
O(1)-C(1)-Co(1)	178.6(2)
O(2)-C(2)-Co(1)	177.24(18)
O(3)-C(3)-Co(1)	178.1(2)
F(2)-C(4)-F(1)	105.99(16)
F(2)-C(4)-C(5)	120.31(16)
F(1)-C(4)-C(5)	118.81(19)
F(2)-C(4)-Co(1)	121.85(16)
F(1)-C(4)-Co(1)	116.70(13)
C(5)-C(4)-Co(1)	70.58(9)
C(6)-C(5)-C(4)	108.18(15)
C(6)-C(5)-C(5)#1	126.9(2)
C(4)-C(5)-C(5)#1	124.36(19)

C(6)-C(5)-Co(1)	71.95(9)
C(4)-C(5)-Co(1)	67.05(10)
C(5)#1-C(5)-Co(1)	119.63(14)
C(5)-C(6)-Co(1)	67.41(9)

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

Tab. 89. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **15a**. Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^2 U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂
Co(1)	40(1)	41(1)	37(1)	-2(1)	5(1)	7(1)
C(1)	60(1)	75(1)	59(1)	-2(1)	15(1)	22(1)
C(2)	64(1)	44(1)	51(1)	-2(1)	10(1)	10(1)
C(3)	50(1)	61(1)	44(1)	1(1)	6(1)	4(1)
C(4)	58(1)	53(1)	50(1)	13(1)	3(1)	-2(1)
C(5)	46(1)	34(1)	45(1)	-3(1)	3(1)	6(1)
C(6)	44(1)	54(1)	54(1)	-9(1)	2(1)	17(1)
O(1)	79(1)	132(2)	118(2)	-2(1)	40(1)	49(1)
O(2)	124(2)	54(1)	85(1)	18(1)	38(1)	7(1)
O(3)	70(1)	113(1)	49(1)	8(1)	-7(1)	4(1)
F(1)	109(1)	62(1)	72(1)	29(1)	-7(1)	5(1)
F(2)	65(1)	108(1)	70(1)	25(1)	15(1)	-25(1)

Tab. 90. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **15a**.

	x	y	z	U(eq)
H(2)	1440(40)	8910(30)	9690(30)	60(6)
H(1)	1270(30)	10130(30)	8110(30)	55(6)

Tab. 91. Torsionswinkel [°] für **15a**.

C(6)-Co(1)-C(4)-C(5)	37.08(10)
F(2)-C(4)-C(5)-C(6)	-176.68(18)
F(1)-C(4)-C(5)-C(6)	50.0(2)
Co(1)-C(4)-C(5)-C(6)	-60.45(12)
F(2)-C(4)-C(5)-C(5)#1	-5.1(3)
F(1)-C(4)-C(5)-C(5)#1	-138.37(19)
Co(1)-C(4)-C(5)-C(5)#1	111.15(19)
C(4)-Co(1)-C(5)-C(6)	119.62(15)
C(6)-Co(1)-C(5)-C(4)	-119.62(15)
C(4)-Co(1)-C(5)-C(5)#1	-117.7(2)
C(6)-Co(1)-C(5)-C(5)#1	122.7(2)
C(4)-C(5)-C(6)-Co(1)	57.41(12)
C(5)#1-C(5)-C(6)-Co(1)	-113.9(2)
C(4)-Co(1)-C(6)-C(5)	-38.59(10)

C(6)-C(5)-C(5)#1-C(6)#1
 C(4)-C(5)-C(5)#1-C(4)#1

180.0(2)
 -180.0(2)

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

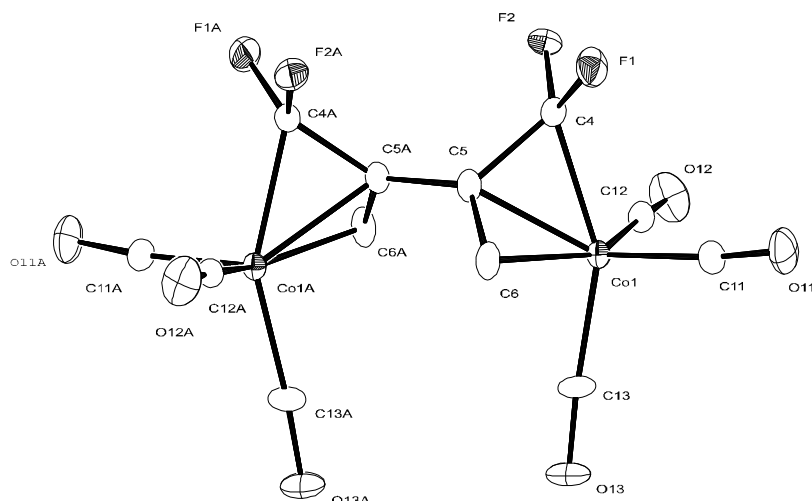


Abbildung 15: ORTEP-Darstellung der Struktur von **15b** im Kristall

Tab. 92. Kristall- und Strukturdaten von **15b**.

Identifikationscode	codfa5	
Diffraktometer	Huber-Euler-Wiege, Eigenbau, Institut für Kristallographie der FU Berlin	
Farbe	gelb	
Summenformel	$C_{12}H_4Co_2F_4O_6$	
Molmasse	438.01 g/mol	
Messtemperatur	20(1) K	
Wellenlänge	56.087 pm falsch	
Kristallsystem	Tetragonal	
Raumgruppe	$P4_12_12$	
Zelldimensionen	a = 644.5 pm	$\alpha = 90^\circ$.
	b = 644.5 pm	$\beta = 90^\circ$.
	c = 3698.0 pm	$\gamma = 90^\circ$.
Volumen	1.5361 nm ³	
Z	4	
Dichte (berechnet)	1.894 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	1.159 mm ⁻¹	
Absorptionskorrektur	Psi-scan [115]	
F(000)	856	
Kristalldimensionen	0.4 x 0.3 x 0.1 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	2.53 bis 16.00°.	
Bereich der Indizes	-6<=h<=6, -6<=k<=6, -36<=l<=8	
Anzahl gemessene Reflexe	3458	
unabhängige Reflexe	766 [R(int) = 0.0750]	
Vollständigkeit zu Theta = 16.00°	99.8 %	
Reflexe >2sigma(I)°	725	
Methode der Strukturverfeinerung	Methode der kleinsten Fehlerquadrate F ²	
Reflexe / unterdrückt / Parameter	766 / 0 / 109	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.369	
Endgültiger Fehler R [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0548, wR2 = 0.1320	

R (alle Daten) R1 = 0.0578, wR2 = 0.1342
 Absol. Strukturparameter (Flack-Par.) 0.5(2)
 Größte und kleinste Restelektronendichte 0.415 und $-0.308 \times 10^{-6} \text{ e pm}^{-3}$

Tab. 93. Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **15b**.
 U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Co(1)	6522(2)	5113(2)	587(1)	41(1)
C(11)	7920(20)	3590(20)	912(3)	55(3)
C(12)	4660(20)	6530(20)	849(3)	55(3)
C(13)	8227(19)	7210(20)	500(4)	61(3)
C(4)	4418(18)	3036(17)	445(3)	45(3)
C(5)	5368(18)	4004(17)	126(3)	51(3)
C(6)	7509(18)	3650(20)	108(3)	56(3)
F(1)	4771(16)	1130(11)	523(2)	83(2)
F(2)	2382(11)	3447(16)	498(2)	84(2)
O(11)	8677(18)	2518(18)	1120(3)	97(3)
O(12)	3566(19)	7456(17)	1016(3)	99(4)
O(13)	9431(17)	8500(18)	458(3)	110(4)

Tab. 94. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **15b**.

Co(1)-C(11)	179.3(12)
Co(1)-C(13)	177.4(13)
Co(1)-C(12)	179.1(15)
Co(1)-C(4)	197.6(10)
Co(1)-C(5)	199.2(10)
Co(1)-C(6)	210.6(10)
C(11)-O(11)	114.3(13)
C(12)-O(12)	111.2(14)
C(13)-O(13)	114.6(13)
C(4)-F(1)	128.2(13)
C(4)-F(2)	135.3(13)
C(4)-C(5)	146.8(15)
C(5)-C(6)	140.0(15)
C(5)-C(5)#1	156(2)
C(4)-Co(1)-C(5)	43.4(4)
C(4)-Co(1)-C(6)	71.3(5)
C(5)-Co(1)-C(6)	39.9(4)
O(11)-C(11)-Co(1)	174.6(14)
O(12)-C(12)-Co(1)	177.4(13)
O(13)-C(13)-Co(1)	175.1(13)
F(1)-C(4)-F(2)	109.1(10)
F(1)-C(4)-C(5)	120.9(11)
F(2)-C(4)-C(5)	116.0(10)
F(1)-C(4)-Co(1)	117.9(8)
F(2)-C(4)-Co(1)	119.6(9)
C(5)-C(4)-Co(1)	68.8(6)
C(6)-C(5)-C(4)	112.3(10)
C(6)-C(5)-C(5)#1	128.4(10)
C(4)-C(5)-C(5)#1	119.2(10)
C(6)-C(5)-Co(1)	74.5(7)
C(4)-C(5)-Co(1)	67.7(6)

C(5)#1-C(5)-Co(1)	121.5(9)
C(5)-C(6)-Co(1)	65.7(6)

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

Tab. 95. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **15b**. Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^* 2 U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂
Co(1)	44(1)	43(1)	36(1)	2(1)	-2(1)	3(1)
C(11)	68(9)	49(8)	50(7)	7(7)	-4(7)	6(7)
C(12)	74(9)	46(7)	45(6)	1(6)	-8(8)	-6(7)
C(13)	34(7)	61(9)	87(9)	-8(8)	8(7)	-16(7)
C(4)	51(8)	41(8)	44(7)	1(6)	-6(6)	6(6)
C(5)	65(9)	50(7)	37(6)	-2(5)	-3(6)	4(6)
C(6)	47(8)	83(9)	37(6)	1(6)	-1(6)	29(7)
F(1)	127(7)	54(5)	69(5)	11(4)	-20(6)	-6(5)
F(2)	58(5)	122(7)	72(5)	16(5)	7(4)	-39(5)
O(11)	100(8)	120(9)	70(6)	32(7)	-17(6)	25(7)
O(12)	118(9)	94(8)	84(8)	-11(6)	40(7)	47(7)
O(13)	88(8)	112(9)	131(9)	15(8)	-6(7)	-67(8)

Tab. 96. Torsionswinkel [°] für **15b**.

Co(1)-C(4)-C(5)-C(5)#1	-114.7(9))
C(4)-Co(1)-C(5)-C(6)	-122.7(11)
C(6)-Co(1)-C(5)-C(4)	122.7(11)
C(4)-Co(1)-C(5)-C(5)#1	111.5(11)
C(6)-Co(1)-C(5)-C(5)#1	-125.8(11)
C(4)-C(5)-C(6)-Co(1)	-57.4(8)
C(5)#1-C(5)-C(6)-Co(1)	118.1(12)
C(4)-Co(1)-C(6)-C(5)	37.6(7)
C(6)-C(5)-C(5)#1-C(6)#1	93.9(2)
C(4)-C(5)-C(5)#1-C(4)#1	84.1(2)

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

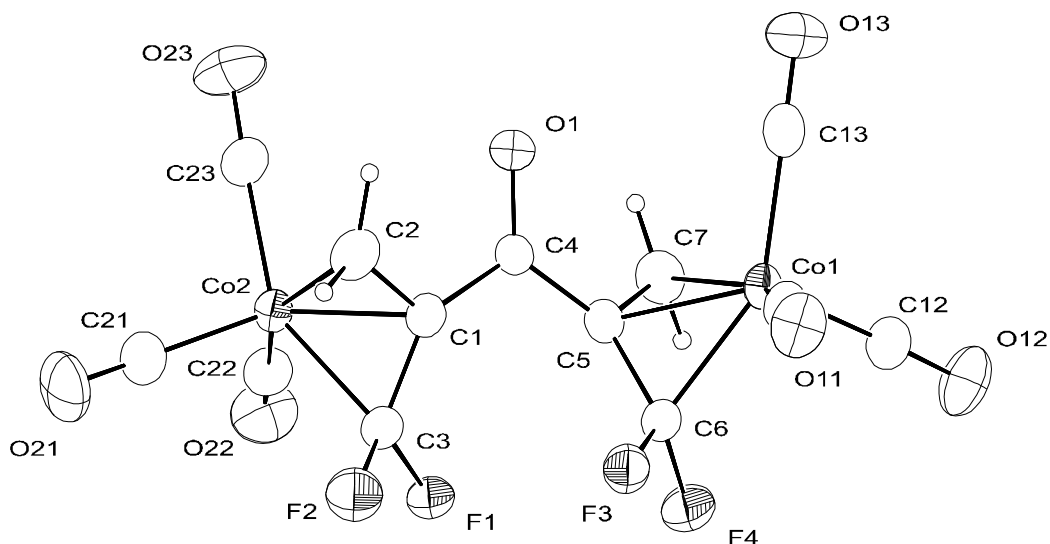


Abbildung 16: ORTEP-Darstellung der Struktur von **16** im Kristall

Tab. 97. Kristall- und Strukturdaten von **16**.

Identifikationscode	wilco	
Diffraktometer	Stoe-Vierkreisdiffraktometer	
Farbe	gelb	
Summenformel	$C_{13} H_4 Co_2 F_4 O_7$	
Molmasse	466.02 g/mol	
Messtemperatur	293(2) K	
Wellenlänge	71.069 pm	
Kristallsystem	Monoklin	
Raumgruppe	$P2_1/a$	
Zelldimensionen	$a = 1264.8(4)$ pm	$\alpha = 90^\circ$.
	$b = 1067.9(3)$ pm	$\beta = 102.84(2)^\circ$.
	$c = 1269.7(3)$ pm	$\gamma = 90^\circ$.
Volumen	$1.6721(8)$ nm ³	
Z	4	
Dichte (berechnet)	1.851 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	2.059 mm ⁻¹	
Absorptionskorrektur	keine	
F(000)	912	
Kristalldimensionen	$0.45 \times 0.3 \times 0.1$ mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	2.52 bis 27.00°.	
Bereich der Indizes	$0 \leq h \leq 16, -13 \leq k \leq 1, -16 \leq l \leq 15$	
Anzahl gemessene Reflexe	4179	
unabhängige Reflexe	3644 [R(int) = 0.0217]	
Vollständigkeit zu Theta = 27.00°	99.8 %	
Reflexe >2sigma(I)°	2609	
Methode der Strukturverfeinerung	Methode der kleinsten Fehlerquadrate F ²	
Reflexe / unterdrückt / Parameter	3644 / 0 / 251	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.098	
Endgültiger Fehler R [$I > 2\sigma(I)$]	R1 = 0.0422, wR2 = 0.1042	
R (alle Daten)	R1 = 0.0736, wR2 = 0.1151	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.800 und -0.596×10^{-6} e pm ⁻³	

Tab. 98. Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **16**.
 $U(\text{eq})$ ist definiert als $1/3$ des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Co(1)	1961(1)	2118(1)	9110(1)	42(1)
Co(2)	3041(1)	-1491(1)	6109(1)	42(1)
C(1)	3387(3)	-329(3)	7354(3)	44(1)
C(2)	4023(4)	-1406(4)	7635(3)	58(1)
C(3)	3616(3)	217(3)	6408(3)	46(1)
C(4)	2454(3)	-60(3)	7858(3)	48(1)
C(5)	1932(3)	1199(3)	7739(3)	44(1)
C(6)	2485(3)	2375(3)	7781(3)	46(1)
C(7)	851(3)	1367(5)	7810(4)	59(1)
C(11)	3311(3)	2329(4)	9911(3)	51(1)
C(12)	1265(3)	3587(4)	9214(3)	56(1)
C(13)	1505(4)	1076(4)	10068(3)	61(1)
C(21)	4026(4)	-2186(4)	5431(4)	61(1)
C(22)	1962(3)	-949(4)	5030(3)	56(1)
C(23)	2314(4)	-2833(4)	6506(3)	62(1)
F(1)	3018(2)	1195(2)	5927(2)	60(1)
F(2)	4640(2)	448(3)	6345(2)	74(1)
F(3)	3554(2)	2401(2)	7819(2)	60(1)
F(4)	2037(2)	3317(2)	7113(2)	71(1)
O(11)	4167(2)	2506(3)	10371(3)	74(1)
O(12)	847(3)	4508(3)	9254(3)	92(1)
O(13)	1249(3)	435(4)	10658(3)	92(1)
O(21)	4645(3)	-2605(4)	5040(3)	96(1)
O(22)	1315(3)	-592(4)	4352(3)	86(1)
O(23)	1881(4)	-3634(4)	6776(4)	103(1)
O(1)	2121(3)	-880(3)	8367(3)	77(1)

Tab. 99. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **16**.

Co(1)-C(11)	179.6(4)
Co(1)-C(12)	181.8(4)
Co(1)-C(13)	183.3(5)
Co(1)-C(6)	196.5(4)
Co(1)-C(5)	199.2(3)
Co(1)-C(7)	207.6(4)
Co(2)-C(22)	180.1(4)
Co(2)-C(21)	182.3(4)
Co(2)-C(23)	183.2(4)
Co(2)-C(3)	196.9(4)
Co(2)-C(1)	198.0(3)
Co(2)-C(2)	205.8(4)
C(1)-C(2)	140.3(5)
C(1)-C(3)	142.2(5)
C(1)-C(4)	149.0(5)
C(3)-F(2)	133.8(4)
C(3)-F(1)	135.3(4)
C(4)-O(1)	121.7(4)
C(4)-C(5)	149.1(5)
C(5)-C(7)	140.2(6)
C(5)-C(6)	143.3(5)
C(6)-F(3)	134.1(4)

C(6)-F(4)	135.5(4)
C(11)-O(11)	112.6(5)
C(12)-O(12)	112.2(5)
C(13)-O(13)	111.5(5)
C(21)-O(21)	111.0(5)
C(22)-O(22)	111.6(5)
C(23)-O(23)	111.0(5)
C(6)-Co(1)-C(5)	42.46(14)
C(6)-Co(1)-C(7)	70.63(17)
C(5)-Co(1)-C(7)	40.24(16)
C(3)-Co(2)-C(1)	42.21(14)
C(3)-Co(2)-C(2)	70.00(16)
C(1)-Co(2)-C(2)	40.60(16)
C(2)-C(1)-C(3)	109.8(4)
C(2)-C(1)-C(4)	120.8(4)
C(3)-C(1)-C(4)	127.8(3)
C(2)-C(1)-Co(2)	72.7(2)
C(3)-C(1)-Co(2)	68.47(19)
C(4)-C(1)-Co(2)	114.1(2)
C(1)-C(2)-Co(2)	66.7(2)
F(2)-C(3)-F(1)	106.4(3)
F(2)-C(3)-C(1)	120.5(3)
F(1)-C(3)-C(1)	120.0(3)
F(2)-C(3)-Co(2)	118.7(3)
F(1)-C(3)-Co(2)	118.9(2)
C(1)-C(3)-Co(2)	69.3(2)
O(1)-C(4)-C(1)	119.4(4)
O(1)-C(4)-C(5)	120.2(4)
C(1)-C(4)-C(5)	120.4(3)
C(7)-C(5)-C(6)	111.2(3)
C(7)-C(5)-C(4)	121.7(4)
C(6)-C(5)-C(4)	125.8(3)
C(7)-C(5)-Co(1)	73.1(2)
C(6)-C(5)-Co(1)	67.79(19)
C(4)-C(5)-Co(1)	115.7(2)
F(3)-C(6)-F(4)	106.6(3)
F(3)-C(6)-C(5)	119.9(3)
F(4)-C(6)-C(5)	119.6(3)
F(3)-C(6)-Co(1)	120.1(3)
F(4)-C(6)-Co(1)	117.8(3)
C(5)-C(6)-Co(1)	69.75(19)
C(5)-C(7)-Co(1)	66.6(2)
O(11)-C(11)-Co(1)	176.2(4)
O(12)-C(12)-Co(1)	178.0(4)
O(13)-C(13)-Co(1)	178.6(4)
O(21)-C(21)-Co(2)	178.3(5)
O(22)-C(22)-Co(2)	178.0(4)
O(23)-C(23)-Co(2)	178.0(4)

Tab. 100. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **16**. Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂
Co(1)	42(1)	40(1)	45(1)	-5(1)	10(1)	5(1)
Co(2)	44(1)	39(1)	42(1)	-4(1)	10(1)	0(1)
C(1)	53(2)	40(2)	38(2)	-4(1)	5(1)	-1(2)

C(2)	61(3)	51(2)	55(2)	1(2)	-3(2)	4(2)
C(3)	49(2)	41(2)	50(2)	-3(2)	13(2)	-6(2)
C(4)	70(2)	41(2)	36(2)	-4(1)	18(2)	-6(2)
C(5)	48(2)	46(2)	39(2)	-6(1)	10(1)	-4(2)
C(6)	55(2)	38(2)	48(2)	-1(1)	16(2)	1(2)
C(7)	50(2)	69(3)	57(2)	-10(2)	7(2)	-10(2)
C(11)	53(2)	47(2)	50(2)	-5(2)	4(2)	7(2)
C(12)	52(2)	53(2)	60(2)	-5(2)	9(2)	7(2)
C(13)	68(3)	55(2)	62(2)	-10(2)	20(2)	8(2)
C(21)	58(2)	59(2)	67(2)	-8(2)	19(2)	1(2)
C(22)	55(2)	55(2)	53(2)	-2(2)	5(2)	-6(2)
C(23)	71(3)	49(2)	67(3)	-4(2)	19(2)	-5(2)
F(1)	86(2)	44(1)	53(1)	10(1)	22(1)	5(1)
F(2)	59(2)	77(2)	94(2)	-8(2)	31(1)	-22(1)
F(3)	56(1)	56(1)	75(2)	-12(1)	28(1)	-13(1)
F(4)	96(2)	51(1)	67(2)	16(1)	20(1)	11(1)
O(11)	53(2)	79(2)	80(2)	-9(2)	-5(2)	7(2)
O(12)	92(3)	61(2)	119(3)	-6(2)	17(2)	34(2)
O(13)	120(3)	75(2)	95(3)	20(2)	52(2)	-5(2)
O(21)	85(3)	105(3)	110(3)	-17(2)	50(2)	25(2)
O(22)	80(2)	93(3)	71(2)	13(2)	-13(2)	-2(2)
O(23)	107(3)	73(2)	132(3)	18(2)	34(3)	-31(2)
O(1)	128(3)	46(2)	74(2)	1(1)	60(2)	-9(2)

Tab. 101. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **16**.

	x	y	z	U(eq)
H(21)	4700(30)	-1400(40)	7540(30)	44(11)
H(22)	3790(30)	-1930(40)	8160(30)	43(10)
H(71)	500(40)	2070(50)	7340(40)	79(16)
H(72)	500(30)	620(40)	7940(30)	44(10)

Tab. 102. Torsionswinkel [°] für **16**.

C(3)-Co(2)-C(1)-C(2)	-120.3(4)
C(2)-Co(2)-C(1)-C(3)	120.3(4)
C(3)-Co(2)-C(1)-C(4)	123.1(4)
C(2)-Co(2)-C(1)-C(4)	-116.7(4)
C(3)-C(1)-C(2)-Co(2)	-58.6(3)
C(4)-C(1)-C(2)-Co(2)	108.1(3)
C(3)-Co(2)-C(2)-C(1)	38.1(2)
C(2)-C(1)-C(3)-F(2)	-50.7(4)
C(4)-C(1)-C(3)-F(2)	143.7(4)
C(2)-C(1)-C(3)-F(1)	173.4(3)
C(4)-C(1)-C(3)-F(1)	7.8(5)
C(2)-C(1)-C(3)-Co(2)	61.2(3)
C(4)-C(1)-C(3)-Co(2)	-104.4(3)
C(2)-Co(2)-C(3)-C(1)	-36.7(2)
C(2)-C(1)-C(4)-O(1)	-13.2(5)
C(3)-C(1)-C(4)-O(1)	151.0(4)
Co(2)-C(1)-C(4)-O(1)	70.3(4)
C(2)-C(1)-C(4)-C(5)	166.9(3)

C(3)-C(1)-C(4)-C(5)	-28.9(5)
Co(2)-C(1)-C(4)-C(5)	-109.5(3)
O(1)-C(4)-C(5)-C(7)	-25.2(6)
C(1)-C(4)-C(5)-C(7)	154.7(3)
O(1)-C(4)-C(5)-C(6)	140.4(4)
C(1)-C(4)-C(5)-C(6)	-39.7(5)
O(1)-C(4)-C(5)-Co(1)	60.2(5)
C(1)-C(4)-C(5)-Co(1)	-120.0(3)
C(6)-Co(1)-C(5)-C(7)	-122.1(3)
C(7)-Co(1)-C(5)-C(6)	122.1(3)
C(6)-Co(1)-C(5)-C(4)	120.3(4)
C(7)-Co(1)-C(5)-C(4)	-117.6(4)
C(7)-C(5)-C(6)-F(3)	174.2(3)
C(4)-C(5)-C(6)-F(3)	7.3(5)
C(7)-C(5)-C(6)-F(4)	-50.8(4)
C(4)-C(5)-C(6)-F(4)	142.3(3)
Co(1)-C(5)-C(6)-F(4)	-111.2(3)
C(7)-C(5)-C(6)-Co(1)	60.4(3)
C(4)-C(5)-C(6)-Co(1)	-106.5(3)
C(7)-Co(1)-C(6)-C(5)	-35.5(2)
C(6)-C(5)-C(7)-Co(1)	-57.3(3)
C(4)-C(5)-C(7)-Co(1)	110.2(3)
C(6)-Co(1)-C(7)-C(5)	37.3(2)

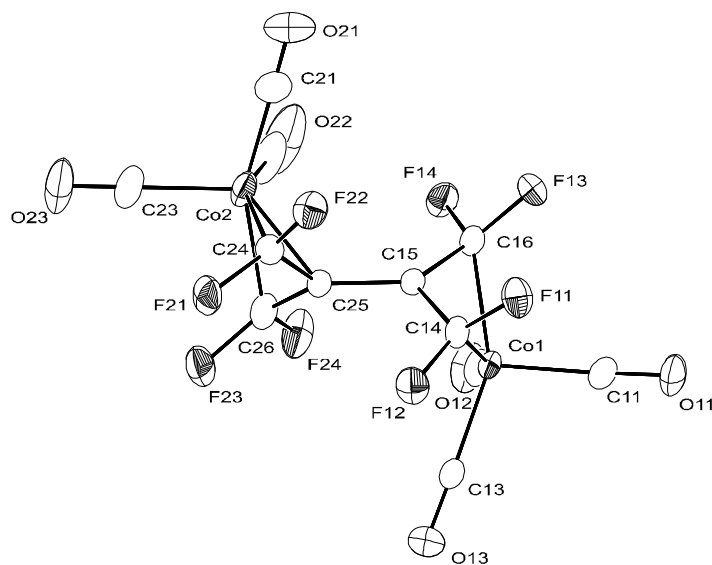


Abbildung 17: ORTEP-Darstellung der Struktur von **17** im Kristall

Tab. 103. Kristall- und Strukturdaten von **17**.

Identifikationscode	17
Diffraktometer	Stoe-Vierkreisdiffraktometer
Farbe	gelb
Summenformel	C ₁₂ Co ₂ F ₈ O ₆
Molmasse	764.97 g/mol
Messtemperatur	293(2) K
Wellenlänge	71.069 pm
Kristallsystem	Orthorhombisch
Raumgruppe	Pcan

Zelldimensionen	a = 1132.90(13) pm	$\alpha = 90^\circ$.
	b = 1273.59(10) pm	$\beta = 90^\circ$.
	c = 3482.6(3) pm	$\gamma = 90^\circ$.
Volumen	5.0248(8) nm ³	
Z	8	
Dichte (berechnet)	2.022 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	2.093 mm ⁻¹	
Absorptionskorrektur	Psi-scan [115]	
F(000)	2952	
Kristalldimensionen	0.3 x 0.25 x 0.1 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	2.34 bis 30.02°.	
Bereich der Indizes	-13<=h<=15, 0<=k<=17, -48<=l<=0	
Anzahl gemessene Reflexe	11502	
unabhängige Reflexe	7328 [R(int) = 0.0354]	
Vollständigkeit zu Theta = 30.02°	99.9 %	
Reflexe >2sigma(I)°	3227	
Methode der Strukturverfeinerung	Methode der kleinsten Fehlerquadrate F ²	
Reflexe / unterdrückt / Parameter	7328 / 0 / 379	
Goodness-of-fit gegen F ²	0.978	
Endgültiger Fehler R [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0411, wR2 = 0.0786	
R (alle Daten)	R1 = 0.1625, wR2 = 0.0992	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.393 und -0.346 x 10 ⁻⁶ e pm ⁻³	

Tab. 104. Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für 17. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Co(1)	1934(1)	3609(1)	4485(1)	45(1)
Co(2)	3289(1)	6685(1)	3836(1)	61(1)
C(11)	2060(3)	2188(3)	4543(1)	61(1)
C(12)	510(4)	3776(3)	4240(1)	62(1)
C(13)	1390(3)	4067(3)	4952(1)	63(1)
C(14)	3570(3)	4004(2)	4613(1)	50(1)
C(15)	3170(3)	4574(2)	4286(1)	42(1)
C(16)	2792(3)	3842(2)	4004(1)	50(1)
F(11)	4398(2)	3253(2)	4587(1)	72(1)
F(12)	3799(2)	4556(2)	4930(1)	69(1)
F(13)	3511(2)	3084(2)	3870(1)	74(1)
F(14)	2227(2)	4221(2)	3693(1)	69(1)
O(11)	2195(3)	1327(2)	4578(1)	93(1)
O(12)	-339(3)	3901(2)	4082(1)	90(1)
O(13)	1072(3)	4377(2)	5235(1)	99(1)
C(21)	4568(6)	6332(4)	3549(1)	100(2)
C(22)	2167(5)	6396(3)	3473(1)	107(2)
C(23)	3338(4)	8118(3)	3833(1)	84(1)
C(24)	4176(3)	6348(2)	4306(1)	51(1)
C(25)	3128(3)	5738(2)	4287(1)	42(1)
C(26)	2164(3)	6433(3)	4256(1)	62(1)
F(21)	4328(2)	7112(2)	4569(1)	77(1)
F(22)	5203(2)	5834(2)	4288(1)	72(1)
F(23)	1983(2)	7219(2)	4511(1)	92(1)
F(24)	1102(2)	6018(2)	4180(1)	93(1)
O(21)	5397(5)	6101(4)	3389(1)	161(2)
O(22)	1473(5)	6207(3)	3257(1)	169(2)
O(23)	3344(4)	8987(2)	3837(1)	123(1)

Tab. 105. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **17**.

Co(1)-C(11)	182.7(3)
Co(1)-C(13)	183.2(4)
Co(1)-C(12)	183.6(4)
Co(1)-C(16)	196.0(3)
Co(1)-C(14)	197.1(3)
Co(1)-C(15)	198.8(3)
Co(2)-C(21)	181.6(6)
Co(2)-C(23)	182.5(4)
Co(2)-C(22)	183.0(5)
Co(2)-C(26)	196.6(4)
Co(2)-C(24)	196.8(3)
Co(2)-C(25)	198.9(3)
C(11)-O(11)	111.4(4)
C(12)-O(12)	112.1(4)
C(13)-O(13)	112.2(4)
C(14)-F(12)	133.5(3)
C(14)-F(11)	134.2(4)
C(14)-C(15)	142.5(4)
C(15)-C(16)	142.1(4)
C(15)-C(25)	148.3(4)
C(16)-F(13)	134.5(4)
C(16)-F(14)	134.9(3)
C(21)-O(21)	113.1(6)
C(22)-O(22)	111.3(5)
C(23)-O(23)	110.7(5)
C(24)-F(22)	133.7(4)
C(24)-F(21)	134.9(3)
C(24)-C(25)	142.0(4)
C(25)-C(26)	141.0(4)
C(26)-F(24)	134.0(4)
C(26)-F(23)	135.4(4)
C(11)-Co(1)-C(13)	104.09(15)
C(11)-Co(1)-C(12)	103.61(15)
C(13)-Co(1)-C(12)	94.56(17)
C(11)-Co(1)-C(16)	101.87(14)
C(13)-Co(1)-C(16)	151.22(14)
C(12)-Co(1)-C(16)	91.22(16)
C(11)-Co(1)-C(14)	98.85(15)
C(13)-Co(1)-C(14)	91.96(15)
C(12)-Co(1)-C(14)	154.28(14)
C(16)-Co(1)-C(14)	71.84(14)
C(11)-Co(1)-C(15)	126.58(14)
C(13)-Co(1)-C(15)	110.42(14)
C(12)-Co(1)-C(15)	112.64(14)
C(16)-Co(1)-C(15)	42.18(12)
C(14)-Co(1)-C(15)	42.18(12)
C(21)-Co(2)-C(23)	102.7(2)
C(21)-Co(2)-C(22)	97.1(3)
C(23)-Co(2)-C(22)	102.66(19)
C(21)-Co(2)-C(26)	152.30(18)
C(23)-Co(2)-C(26)	100.79(19)
C(22)-Co(2)-C(26)	91.8(2)
C(21)-Co(2)-C(24)	89.7(2)
C(23)-Co(2)-C(24)	101.94(16)
C(22)-Co(2)-C(24)	152.26(16)
C(26)-Co(2)-C(24)	71.15(14)
C(21)-Co(2)-C(25)	110.91(18)
C(23)-Co(2)-C(25)	127.82(16)
C(22)-Co(2)-C(25)	111.08(16)

C(26)-Co(2)-C(25)	41.76(13)
C(24)-Co(2)-C(25)	42.07(13)
F(12)-C(14)-F(11)	107.2(3)
F(12)-C(14)-C(15)	117.0(3)
F(11)-C(14)-C(15)	122.0(3)
F(12)-C(14)-Co(1)	120.3(2)
F(11)-C(14)-Co(1)	117.4(2)
C(15)-C(14)-Co(1)	69.55(18)
C(16)-C(15)-C(14)	108.3(3)
C(16)-C(15)-C(25)	130.4(3)
C(14)-C(15)-C(25)	121.3(3)
C(16)-C(15)-Co(1)	67.85(18)
C(14)-C(15)-Co(1)	68.27(18)
C(25)-C(15)-Co(1)	126.5(2)
F(13)-C(16)-F(14)	105.4(2)
F(13)-C(16)-C(15)	121.8(3)
F(14)-C(16)-C(15)	117.6(3)
F(13)-C(16)-Co(1)	119.2(2)
F(14)-C(16)-Co(1)	120.4(2)
C(15)-C(16)-Co(1)	69.96(17)
O(21)-C(21)-Co(2)	176.2(5)
O(22)-C(22)-Co(2)	178.5(5)
O(23)-C(23)-Co(2)	178.3(5)
F(22)-C(24)-F(21)	105.8(3)
F(22)-C(24)-C(25)	117.3(3)
F(21)-C(24)-C(25)	122.2(3)
F(22)-C(24)-Co(2)	121.0(2)
F(21)-C(24)-Co(2)	118.3(2)
C(25)-C(24)-Co(2)	69.73(17)
C(26)-C(25)-C(24)	107.9(3)
C(26)-C(25)-C(15)	130.7(3)
C(24)-C(25)-C(15)	121.3(3)
C(26)-C(25)-Co(2)	68.24(19)
C(24)-C(25)-Co(2)	68.19(17)
C(15)-C(25)-Co(2)	127.0(2)
F(24)-C(26)-F(23)	106.5(3)
F(24)-C(26)-C(25)	117.6(3)
F(23)-C(26)-C(25)	122.0(3)
F(24)-C(26)-Co(2)	120.1(3)
F(23)-C(26)-Co(2)	117.7(2)
C(25)-C(26)-Co(2)	70.00(19)

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

Tab. 106. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **17**. Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^*^2 U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂
Co(1)	48(1)	36(1)	50(1)	7(1)	2(1)	-1(1)
Co(2)	83(1)	45(1)	54(1)	12(1)	-13(1)	-16(1)
C(11)	65(2)	47(2)	70(2)	10(2)	8(2)	-1(2)
C(12)	59(2)	46(2)	83(3)	11(2)	-4(2)	-10(2)
C(13)	70(3)	48(2)	71(2)	11(2)	21(2)	3(2)
C(14)	52(2)	44(2)	54(2)	2(1)	-7(2)	4(2)
C(15)	43(2)	39(1)	44(2)	2(1)	3(1)	-1(1)
C(16)	62(2)	41(2)	48(2)	2(1)	-1(2)	-1(2)

F(11)	57(1)	59(1)	98(2)	6(1)	-12(1)	19(1)
F(12)	82(2)	70(1)	55(1)	-2(1)	-26(1)	-1(1)
F(13)	97(2)	54(1)	72(1)	-15(1)	21(1)	7(1)
F(14)	100(2)	64(1)	43(1)	2(1)	-12(1)	-17(1)
O(11)	111(3)	44(1)	125(2)	19(2)	18(2)	10(2)
O(12)	64(2)	76(2)	130(2)	13(2)	-34(2)	-6(2)
O(13)	133(3)	86(2)	79(2)	-3(2)	43(2)	7(2)
C(21)	154(5)	89(3)	56(2)	9(2)	27(3)	-18(3)
C(22)	156(5)	73(3)	92(3)	37(2)	-61(3)	-42(3)
C(23)	107(4)	57(2)	87(3)	19(2)	-29(3)	-21(2)
C(24)	55(2)	48(2)	51(2)	-4(2)	-4(2)	-5(2)
C(25)	46(2)	40(1)	41(2)	3(1)	-3(2)	-6(2)
C(26)	53(2)	46(2)	88(3)	6(2)	-2(2)	-4(2)
F(21)	103(2)	56(1)	71(1)	-12(1)	-16(1)	-22(1)
F(22)	49(1)	76(1)	91(1)	2(1)	-5(1)	-4(1)
F(23)	94(2)	53(1)	129(2)	-10(1)	28(2)	14(1)
F(24)	49(1)	62(1)	167(2)	21(2)	-7(1)	3(1)
O(21)	212(5)	161(4)	111(3)	6(3)	88(3)	10(4)
O(22)	234(5)	117(3)	156(3)	60(3)	-137(4)	-76(3)
O(23)	168(4)	49(2)	152(3)	18(2)	-42(3)	-22(2)

Tab. 107. Torsionswinkel [°] für 17.

C(16)-Co(1)-C(14)-C(15)	36.92(17)
F(12)-C(14)-C(15)-C(16)	-170.5(3)
F(11)-C(14)-C(15)-C(16)	54.2(4)
Co(1)-C(14)-C(15)-C(16)	-56.0(2)
F(12)-C(14)-C(15)-C(25)	6.0(5)
F(11)-C(14)-C(15)-C(25)	-129.3(3)
Co(1)-C(14)-C(15)-C(25)	120.5(3)
C(14)-Co(1)-C(15)-C(16)	121.8(3)
C(16)-Co(1)-C(15)-C(14)	-121.8(3)
C(16)-Co(1)-C(15)-C(25)	124.6(3)
C(14)-Co(1)-C(15)-C(25)	-113.6(3)
C(14)-C(15)-C(16)-F(13)	-56.3(4)
C(25)-C(15)-C(16)-F(13)	127.6(4)
C(14)-C(15)-C(16)-F(14)	170.9(3)
C(25)-C(15)-C(16)-F(14)	-5.1(5)
C(14)-C(15)-C(16)-Co(1)	56.3(2)
C(25)-C(15)-C(16)-Co(1)	-119.8(4)
C(14)-Co(1)-C(16)-C(15)	-36.92(18)
C(26)-Co(2)-C(24)-C(25)	37.04(18)
F(22)-C(24)-C(25)-C(26)	-171.9(3)
F(21)-C(24)-C(25)-C(26)	54.7(4)
Co(2)-C(24)-C(25)-C(26)	-56.7(2)
F(22)-C(24)-C(25)-C(15)	5.8(4)
F(21)-C(24)-C(25)-C(15)	-127.6(3)
Co(2)-C(24)-C(25)-C(15)	121.1(3)
C(16)-C(15)-C(25)-C(26)	59.1(5)
C(14)-C(15)-C(25)-C(26)	-116.5(4)
Co(1)-C(15)-C(25)-C(26)	-31.7(5)
C(16)-C(15)-C(25)-C(24)	-118.1(4)
C(14)-C(15)-C(25)-C(24)	66.3(4)
Co(1)-C(15)-C(25)-C(24)	151.1(2)
C(16)-C(15)-C(25)-Co(2)	-33.0(5)
C(14)-C(15)-C(25)-Co(2)	151.4(3)
Co(1)-C(15)-C(25)-Co(2)	-123.8(2)
C(24)-Co(2)-C(25)-C(26)	121.1(3)
C(26)-Co(2)-C(25)-C(24)	-121.1(3)

C(26)-Co(2)-C(25)-C(15)	125.3(4)
C(24)-Co(2)-C(25)-C(15)	-113.5(4)
C(24)-C(25)-C(26)-F(24)	171.0(3)
C(15)-C(25)-C(26)-F(24)	-6.5(5)
Co(2)-C(25)-C(26)-F(24)	114.3(3)
C(24)-C(25)-C(26)-F(23)	-54.2(4)
C(15)-C(25)-C(26)-F(23)	128.3(3)
Co(2)-C(25)-C(26)-F(23)	-110.9(3)
C(24)-C(25)-C(26)-Co(2)	56.7(2)
C(15)-C(25)-C(26)-Co(2)	-120.8(3)
C(24)-Co(2)-C(26)-C(25)	-37.31(18)

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

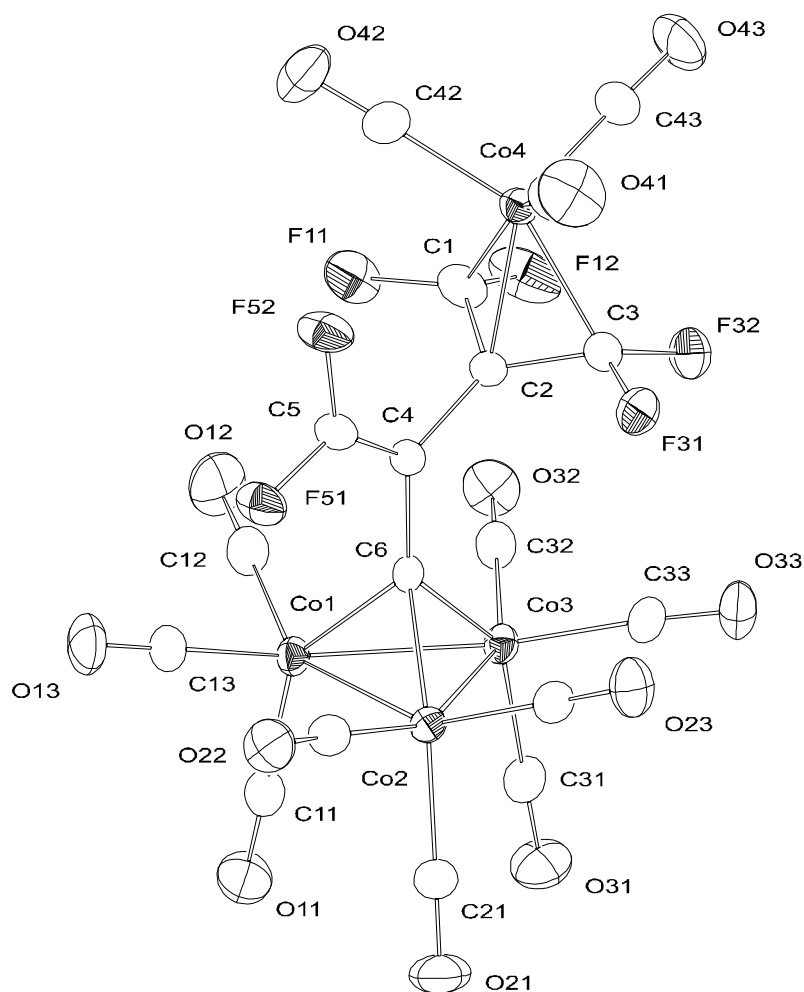


Abbildung 18: ORTEP-Darstellung der Struktur von **18** im Kristall

Tab. 108. Kristall- und Strukturdaten von **18**.

Identifikationscode	cob_mabs
Diffraktometer	Stoe-Vierkreisdiffraktometer
Farbe	schwarz
Summenformel	C ₁₈ Co ₄ F ₆ O ₁₂
Molmasse	757.90 g/mol
Messtemperatur	293(2) K
Wellenlänge	71.069 pm

Kristallsystem	Triklin	
Raumgruppe	P-1	
Zelldimensionen	a = 800.18(12) pm	$\alpha = 75.120(11)^\circ$.
	b = 1160.60(18) pm	$\beta = 86.160(11)^\circ$.
	c = 1371.06(18) pm	$\gamma = 76.020(12)^\circ$.
Volumen	1.1941(3) nm ³	
Z	2	
Dichte (berechnet)	2.108 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	2.838 mm ⁻¹	
Absorptionskorrektur	Psi-scan [115]	
F(000)	732	
Kristalldimensionen	0.6 x 0.2 x 0.1 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	2.10 bis 25.00°.	
Bereich der Indizes	-9<=h<=0, -13<=k<=13, -16<=l<=16	
Anzahl gemessene Reflexe	4797	
unabhängige Reflexe	4214 [R(int) = 0.0126]	
Vollständigkeit zu Theta = 25.00°	99.9 %	
Reflexe >2sigma(I)°	3397	
Methode der Strukturverfeinerung	Methode der kleinsten Fehlerquadrate F ²	
Reflexe / unterdrückt / Parameter	4214 / 0 / 361	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.055	
Endgültiger Fehler R [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0243, wR2 = 0.0608	
R (alle Daten)	R1 = 0.0406, wR2 = 0.0657	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.376 und -0.235 x 10 ⁻⁶ e pm ⁻³	

Tab. 109. Atomkoordinaten (x 10⁴) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren (pm²x 10⁻¹) für **18**. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Co(1)	1795(1)	3900(1)	7614(1)	40(1)
Co(2)	-84(1)	2903(1)	8892(1)	39(1)
Co(3)	-655(1)	3263(1)	7087(1)	40(1)
Co(4)	3359(1)	-1176(1)	6882(1)	43(1)
C(11)	772(4)	5510(3)	7539(3)	60(1)
C(12)	3031(4)	3994(3)	6467(3)	61(1)
C(13)	3560(4)	3706(3)	8427(3)	54(1)
C(21)	-1614(4)	4255(3)	9138(2)	56(1)
C(22)	1267(4)	2541(3)	9981(2)	52(1)
C(23)	-1199(4)	1697(3)	9353(2)	49(1)
C(31)	-2299(4)	4700(3)	6919(3)	59(1)
C(32)	6(4)	3368(3)	5788(2)	53(1)
C(33)	-2079(4)	2240(3)	7209(2)	51(1)
C(41)	3375(5)	-2388(3)	8027(3)	64(1)
C(42)	5703(5)	-1393(3)	6841(2)	61(1)
C(43)	2929(5)	-1854(3)	5890(3)	63(1)
C(1)	3020(5)	550(3)	6131(2)	56(1)
C(2)	2178(3)	476(2)	7081(2)	40(1)
C(3)	1033(4)	-305(3)	7172(3)	56(1)
C(4)	2470(3)	1108(2)	7860(2)	36(1)
C(5)	3740(4)	613(3)	8514(2)	48(1)
C(6)	1331(3)	2305(2)	7863(2)	33(1)
O(11)	174(4)	6501(2)	7513(3)	99(1)
O(12)	3844(4)	4049(3)	5752(2)	102(1)
O(13)	4685(3)	3612(3)	8924(2)	84(1)
O(21)	-2547(4)	5091(2)	9286(2)	92(1)

O(22)	2063(3)	2327(3)	10687(2)	76(1)
O(23)	-1884(3)	932(2)	9650(2)	76(1)
O(31)	-3340(4)	5573(3)	6830(2)	93(1)
O(32)	390(4)	3487(3)	4970(2)	79(1)
O(33)	-3025(3)	1647(3)	7292(2)	77(1)
O(41)	3385(5)	-3133(3)	8740(2)	108(1)
O(42)	7145(4)	-1527(3)	6846(2)	96(1)
O(43)	2633(4)	-2247(3)	5274(2)	103(1)
F(11)	4344(3)	1107(2)	5960(2)	83(1)
F(12)	2154(4)	885(2)	5260(1)	97(1)
F(31)	301(3)	-626(2)	8084(2)	81(1)
F(32)	-191(3)	-99(2)	6476(2)	93(1)
F(51)	4098(2)	1120(2)	9203(1)	66(1)
F(52)	4861(3)	-445(2)	8603(2)	73(1)

Tab. 110. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **18**.

Co(1)-C(13)	179.4(3)
Co(1)-C(12)	179.4(4)
Co(1)-C(11)	183.0(3)
Co(1)-C(6)	191.6(2)
Co(1)-Co(3)	246.43(6)
Co(1)-Co(2)	247.22(6)
Co(2)-C(23)	179.7(3)
Co(2)-C(22)	180.3(3)
Co(2)-C(21)	183.3(3)
Co(2)-C(6)	191.3(2)
Co(2)-Co(3)	245.64(6)
Co(3)-C(32)	180.5(3)
Co(3)-C(33)	180.6(3)
Co(3)-C(31)	182.9(3)
Co(3)-C(6)	191.3(2)
Co(4)-C(41)	181.8(4)
Co(4)-C(43)	182.4(3)
Co(4)-C(42)	183.1(4)
Co(4)-C(3)	196.0(3)
Co(4)-C(1)	196.6(3)
Co(4)-C(2)	200.2(3)
C(11)-O(11)	112.6(4)
C(12)-O(12)	113.6(4)
C(13)-O(13)	113.2(4)
C(21)-O(21)	112.8(4)
C(22)-O(22)	113.4(4)
C(23)-O(23)	112.9(4)
C(31)-O(31)	113.1(4)
C(32)-O(32)	112.6(4)
C(33)-O(33)	112.3(4)
C(41)-O(41)	112.5(4)
C(42)-O(42)	112.6(4)
C(43)-O(43)	112.1(4)
C(1)-F(12)	134.2(4)
C(1)-F(11)	134.7(4)
C(1)-C(2)	141.8(4)
C(2)-C(3)	141.7(4)
C(2)-C(4)	150.0(3)
C(3)-F(31)	134.7(4)
C(3)-F(32)	134.9(4)
C(4)-C(5)	132.0(4)
C(4)-C(6)	146.6(3)

C(5)-F(51)	131.3(3)
C(5)-F(52)	131.6(3)
C(6)-Co(1)-Co(3)	49.89(7)
C(6)-Co(1)-Co(2)	49.75(7)
Co(3)-Co(1)-Co(2)	59.683(17)
C(6)-Co(2)-Co(3)	50.06(7)
C(6)-Co(2)-Co(1)	49.83(7)
Co(3)-Co(2)-Co(1)	60.000(18)
C(6)-Co(3)-Co(2)	50.07(7)
C(31)-Co(3)-Co(1)	100.05(11)
C(6)-Co(3)-Co(1)	49.99(7)
Co(2)-Co(3)-Co(1)	60.317(17)
C(3)-Co(4)-C(1)	71.66(15)
C(3)-Co(4)-C(2)	41.89(12)
C(1)-Co(4)-C(2)	41.88(12)
F(12)-C(1)-F(11)	106.3(3)
F(12)-C(1)-C(2)	122.5(3)
F(11)-C(1)-C(2)	117.4(3)
F(12)-C(1)-Co(4)	116.7(2)
F(11)-C(1)-Co(4)	120.9(2)
C(2)-C(1)-Co(4)	70.41(16)
C(3)-C(2)-C(1)	108.3(3)
C(3)-C(2)-C(4)	126.0(2)
C(1)-C(2)-C(4)	125.7(3)
C(3)-C(2)-Co(4)	67.50(16)
C(1)-C(2)-Co(4)	67.70(16)
C(4)-C(2)-Co(4)	130.10(18)
F(31)-C(3)-F(32)	107.0(3)
F(31)-C(3)-C(2)	116.6(3)
F(32)-C(3)-C(2)	121.7(3)
F(31)-C(3)-Co(4)	120.7(2)
F(32)-C(3)-Co(4)	117.2(2)
C(2)-C(3)-Co(4)	70.61(17)
C(5)-C(4)-C(6)	120.7(2)
C(5)-C(4)-C(2)	120.9(2)
C(6)-C(4)-C(2)	118.3(2)
F(51)-C(5)-F(52)	107.8(2)
F(51)-C(5)-C(4)	124.5(2)
F(52)-C(5)-C(4)	127.7(3)
C(4)-C(6)-Co(3)	132.55(18)
C(4)-C(6)-Co(2)	132.24(18)
Co(3)-C(6)-Co(2)	79.87(10)
C(4)-C(6)-Co(1)	131.16(18)
Co(3)-C(6)-Co(1)	80.12(10)
Co(2)-C(6)-Co(1)	80.42(10)

Tab. 111. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **18**. Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^2 U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂
Co(1)	37(1)	38(1)	47(1)	-8(1)	0(1)	-14(1)
Co(2)	37(1)	41(1)	39(1)	-11(1)	4(1)	-9(1)
Co(3)	35(1)	41(1)	42(1)	-6(1)	-7(1)	-8(1)
Co(4)	47(1)	43(1)	43(1)	-17(1)	5(1)	-14(1)
C(11)	51(2)	47(2)	82(2)	-11(2)	-1(2)	-16(2)
C(12)	62(2)	62(2)	62(2)	-10(2)	5(2)	-26(2)
C(13)	51(2)	53(2)	62(2)	-13(2)	0(2)	-21(2)
C(21)	56(2)	53(2)	62(2)	-20(2)	12(2)	-14(2)
C(22)	53(2)	58(2)	48(2)	-17(1)	5(1)	-14(2)
C(23)	49(2)	55(2)	42(2)	-9(1)	5(1)	-14(2)
C(31)	48(2)	60(2)	65(2)	-11(2)	-9(2)	-9(2)
C(32)	52(2)	49(2)	53(2)	-2(1)	-12(1)	-12(1)
C(33)	39(2)	60(2)	52(2)	-8(1)	-7(1)	-11(1)
C(41)	77(2)	56(2)	62(2)	-16(2)	4(2)	-21(2)
C(42)	57(2)	71(2)	52(2)	-21(2)	6(2)	-9(2)
C(43)	68(2)	66(2)	66(2)	-31(2)	8(2)	-22(2)
C(1)	81(2)	48(2)	39(2)	-10(1)	-1(2)	-15(2)
C(2)	40(1)	38(1)	40(1)	-11(1)	-5(1)	-4(1)
C(3)	46(2)	65(2)	67(2)	-35(2)	0(2)	-13(2)
C(4)	38(1)	38(1)	32(1)	-8(1)	-1(1)	-8(1)
C(5)	52(2)	44(2)	46(2)	-18(1)	-10(1)	0(1)
C(6)	31(1)	38(1)	31(1)	-6(1)	-1(1)	-12(1)
O(11)	87(2)	47(2)	160(3)	-26(2)	-6(2)	-7(1)
O(12)	105(2)	138(3)	75(2)	-27(2)	38(2)	-61(2)
O(13)	63(2)	101(2)	99(2)	-27(2)	-24(2)	-31(2)
O(21)	89(2)	64(2)	122(2)	-42(2)	31(2)	-2(2)
O(22)	74(2)	103(2)	52(1)	-25(1)	-14(1)	-14(2)
O(23)	82(2)	76(2)	74(2)	-4(1)	5(1)	-44(2)
O(31)	77(2)	67(2)	118(2)	-20(2)	-20(2)	21(2)
O(32)	103(2)	88(2)	43(1)	-7(1)	2(1)	-27(2)
O(33)	60(2)	92(2)	91(2)	-24(2)	-4(1)	-38(1)
O(41)	148(3)	78(2)	84(2)	14(2)	4(2)	-36(2)
O(42)	51(2)	134(3)	98(2)	-31(2)	6(1)	-13(2)
O(43)	121(3)	130(3)	94(2)	-74(2)	6(2)	-53(2)
F(11)	119(2)	72(1)	67(1)	-18(1)	39(1)	-52(1)
F(12)	166(2)	76(2)	40(1)	-13(1)	-28(1)	-6(2)
F(31)	65(1)	97(2)	104(2)	-51(1)	40(1)	-45(1)
F(32)	54(1)	125(2)	126(2)	-76(2)	-25(1)	-13(1)
F(51)	70(1)	65(1)	63(1)	-30(1)	-30(1)	7(1)
F(52)	76(1)	59(1)	77(1)	-32(1)	-40(1)	26(1)

Tab. 112. Torsionswinkel [°] für **18**.

Co(3)-Co(1)-Co(2)-C(6)	61.13(9)
C(6)-Co(1)-Co(2)-Co(3)	-61.13(9)
Co(1)-Co(2)-Co(3)-C(6)	60.79(10)
C(6)-Co(2)-Co(3)-Co(1)	-60.79(10)
Co(2)-Co(1)-Co(3)-C(6)	-60.91(9)
C(6)-Co(1)-Co(3)-Co(2)	60.91(9)
C(3)-Co(4)-C(1)-C(2)	36.39(18)
F(12)-C(1)-C(2)-C(3)	54.7(4)

F(11)-C(1)-C(2)-C(3)	-170.6(3)
Co(4)-C(1)-C(2)-C(3)	-55.2(2)
F(12)-C(1)-C(2)-C(4)	-125.9(3)
F(11)-C(1)-C(2)-C(4)	8.8(4)
Co(4)-C(1)-C(2)-C(4)	124.2(3)
C(1)-Co(4)-C(2)-C(3)	122.5(3)
C(3)-Co(4)-C(2)-C(1)	-122.5(3)
C(3)-Co(4)-C(2)-C(4)	118.9(3)
C(1)-Co(4)-C(2)-C(4)	-118.6(3)
C(1)-C(2)-C(3)-F(31)	170.7(3)
C(4)-C(2)-C(3)-F(31)	-8.7(4)
C(1)-C(2)-C(3)-F(32)	-55.3(4)
C(4)-C(2)-C(3)-F(32)	125.3(3)
Co(4)-C(2)-C(3)-F(32)	-110.6(3)
C(1)-C(2)-C(3)-Co(4)	55.3(2)
C(4)-C(2)-C(3)-Co(4)	-124.1(3)
C(1)-Co(4)-C(3)-C(2)	-36.38(17)
C(3)-C(2)-C(4)-C(5)	94.6(4)
C(1)-C(2)-C(4)-C(5)	-84.7(4)
Co(4)-C(2)-C(4)-C(5)	5.0(4)
C(3)-C(2)-C(4)-C(6)	-86.8(3)
C(1)-C(2)-C(4)-C(6)	93.9(3)
Co(4)-C(2)-C(4)-C(6)	-176.41(19)
C(6)-C(4)-C(5)-F(51)	0.0(5)
C(2)-C(4)-C(5)-F(51)	178.6(3)
C(6)-C(4)-C(5)-F(52)	-179.9(3)
C(2)-C(4)-C(5)-F(52)	-1.4(5)
C(5)-C(4)-C(6)-Co(3)	-177.2(2)
C(2)-C(4)-C(6)-Co(3)	4.2(4)
C(5)-C(4)-C(6)-Co(2)	-56.4(4)
C(2)-C(4)-C(6)-Co(2)	125.0(2)
C(5)-C(4)-C(6)-Co(1)	63.3(3)
C(2)-C(4)-C(6)-Co(1)	-115.4(2)
Co(2)-Co(3)-C(6)-C(4)	139.7(3)
Co(1)-Co(3)-C(6)-C(4)	-138.3(3)
Co(1)-Co(3)-C(6)-Co(2)	81.92(8)
Co(2)-Co(3)-C(6)-Co(1)	-81.92(8)
Co(3)-Co(2)-C(6)-C(4)	-140.0(3)
Co(1)-Co(2)-C(6)-C(4)	138.5(3)
Co(1)-Co(2)-C(6)-Co(3)	-81.57(8)
Co(3)-Co(2)-C(6)-Co(1)	81.57(8)
Co(3)-Co(1)-C(6)-C(4)	139.4(3)
Co(2)-Co(1)-C(6)-C(4)	-139.3(3)
Co(2)-Co(1)-C(6)-Co(3)	81.28(8)
Co(3)-Co(1)-C(6)-Co(2)	-81.28(8)

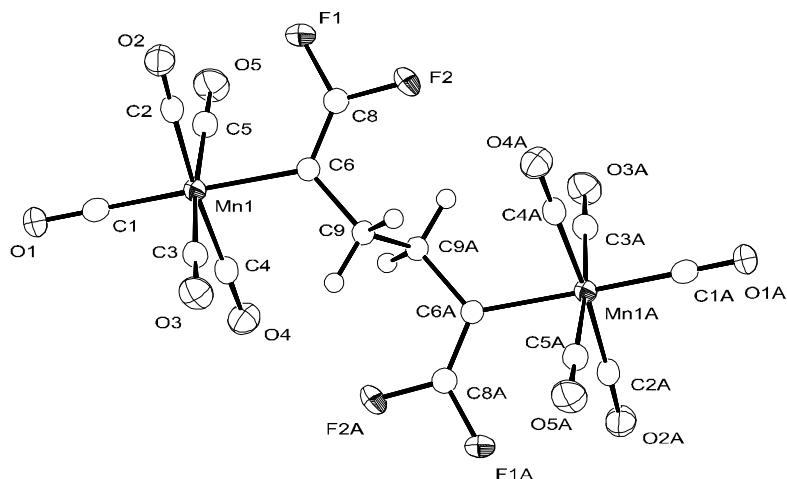


Abbildung 19: ORTEP-Darstellung der Struktur von **19** im Kristall

Tab. 113. Kristall- und Strukturdaten von **19**.

Identifikationscode	sadpat	
Diffraktometer	SMART CCD, Bruker AXS	
Farbe	farblos	
Summenformel	$C_{16} H_4 F_4 Mn_2 O_{10}$	
Molmasse	542.07 g/mol	
Messtemperatur	133(2) K	
Wellenlänge	71.073 pm	
Kristallsystem	Triklin	
Raumgruppe	P-1	
Zelldimensionen	$a = 618.60(6)$ pm	$\alpha = 84.686(2)^\circ$
	$b = 699.12(7)$ pm	$\beta = 78.684(2)^\circ$
	$c = 1236.35(12)$ pm	$\gamma = 68.044(2)^\circ$
Volumen	$0.48616(8)$ nm ³	
Z	1	
Dichte (berechnet)	1.852 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	1.390 mm ⁻¹	
Absorptionskorrektur	Semi empirisch (SADABS) [116, 117]	
F(000)	266	
Kristalldimensionen	$0.43 \times 0.38 \times 0.2$ mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	1.68 bis 30.02°	
Bereich der Indizes	$-8 \leq h \leq 8, -9 \leq k \leq 9, -17 \leq l \leq 17$	
Anzahl gemessene Reflexe	5719	
unabhängige Reflexe	2771 [R(int) = 0.0288]	
Vollständigkeit zu $\Theta = 30.02^\circ$	97.4 %	
Reflexe $>2\sigma(I)^\circ$	2271	
Methode der Strukturverfeinerung	Methode der kleinsten Fehlerquadrate F^2	
Reflexe / unterdrückt / Parameter	2771 / 0 / 153	
Goodness-of-fit gegen F^2	1.001	
Endgültiger Fehler R [$I > 2\sigma(I)$]	$R1 = 0.0320, wR2 = 0.0747$	
R (alle Daten)	$R1 = 0.0425, wR2 = 0.0785$	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.588 und -0.409×10^{-6} e pm ⁻³	

Tab. 114. Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **19**.
 $U(\text{eq})$ ist definiert als $1/3$ des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Mn(1)	4865(1)	2129(1)	2227(1)	18(1)
C(3)	4987(3)	4303(3)	2959(2)	22(1)
O(2)	9750(2)	1487(2)	989(1)	33(1)
O(4)	176(2)	2566(2)	3630(1)	32(1)
O(5)	4875(3)	-1638(2)	1246(1)	38(1)
O(3)	5065(3)	5600(2)	3408(1)	34(1)
C(6)	6512(3)	189(2)	3472(1)	18(1)
C(2)	7891(3)	1731(3)	1440(1)	23(1)
C(1)	3396(3)	3856(3)	1150(1)	22(1)
C(4)	1959(3)	2394(3)	3111(1)	21(1)
C(9)	5677(3)	677(2)	4694(1)	19(1)
C(5)	4887(3)	-216(3)	1614(2)	25(1)
C(8)	8339(3)	-1524(3)	3248(2)	25(1)
F(1)	9386(2)	-2350(2)	2247(1)	38(1)
F(2)	9543(2)	-2836(2)	3981(1)	37(1)
O(1)	2473(2)	4912(2)	494(1)	30(1)

Tab. 115. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **19**.

Mn(1)-C(1)	184.69(18)
Mn(1)-C(5)	186.29(19)
Mn(1)-C(2)	186.37(18)
Mn(1)-C(4)	186.51(18)
Mn(1)-C(3)	187.18(18)
Mn(1)-C(6)	210.83(17)
C(3)-O(3)	112.6(2)
O(2)-C(2)	113.2(2)
O(4)-C(4)	113.1(2)
O(5)-C(5)	113.4(2)
C(6)-C(8)	130.9(2)
C(6)-C(9)	152.4(2)
C(1)-O(1)	113.4(2)
C(9)-C(9)#1	154.3(3)
C(9)-H(1)	104.4(17)
C(9)-H(2)	103.3(17)
C(8)-F(2)	134.8(2)
C(8)-F(1)	135.0(2)
C(1)-Mn(1)-C(5)	92.86(8)
C(1)-Mn(1)-C(2)	93.20(7)
C(5)-Mn(1)-C(2)	90.73(8)
C(1)-Mn(1)-C(4)	91.62(7)
C(5)-Mn(1)-C(4)	89.38(8)
C(2)-Mn(1)-C(4)	175.17(7)
C(1)-Mn(1)-C(3)	93.11(8)
C(5)-Mn(1)-C(3)	174.03(7)
C(2)-Mn(1)-C(3)	89.15(8)
C(4)-Mn(1)-C(3)	90.24(7)
C(1)-Mn(1)-C(6)	179.19(7)
C(5)-Mn(1)-C(6)	87.76(7)
C(2)-Mn(1)-C(6)	87.32(7)
C(4)-Mn(1)-C(6)	87.86(7)

C(3)-Mn(1)-C(6)	86.27(7)
O(3)-C(3)-Mn(1)	179.36(17)
C(8)-C(6)-C(9)	115.16(15)
C(8)-C(6)-Mn(1)	122.17(13)
C(9)-C(6)-Mn(1)	122.67(11)
O(2)-C(2)-Mn(1)	178.06(16)
O(1)-C(1)-Mn(1)	179.28(16)
O(4)-C(4)-Mn(1)	178.68(15)
C(6)-C(9)-C(9)#1	112.34(17)
C(6)-C(9)-H(1)	109.5(9)
C(9)#1-C(9)-H(1)	108.7(9)
C(6)-C(9)-H(2)	109.1(9)
C(9)#1-C(9)-H(2)	110.0(9)
H(1)-C(9)-H(2)	107.0(13)
O(5)-C(5)-Mn(1)	179.23(17)
C(6)-C(8)-F(2)	126.56(17)
C(6)-C(8)-F(1)	127.43(16)
F(2)-C(8)-F(1)	106.01(14)

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

Tab. 116. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **19**. Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^2 U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂
Mn(1)	19(1)	17(1)	18(1)	-1(1)	-4(1)	-5(1)
C(3)	21(1)	21(1)	24(1)	1(1)	-4(1)	-8(1)
O(2)	22(1)	41(1)	32(1)	4(1)	-2(1)	-9(1)
O(4)	23(1)	42(1)	31(1)	-1(1)	-4(1)	-13(1)
O(5)	48(1)	28(1)	39(1)	-10(1)	-12(1)	-13(1)
O(3)	41(1)	25(1)	40(1)	-6(1)	-10(1)	-14(1)
C(6)	20(1)	17(1)	18(1)	-1(1)	-3(1)	-7(1)
C(2)	25(1)	23(1)	20(1)	2(1)	-7(1)	-6(1)
C(1)	22(1)	24(1)	20(1)	-5(1)	0(1)	-8(1)
C(4)	24(1)	22(1)	20(1)	0(1)	-10(1)	-8(1)
C(9)	23(1)	18(1)	17(1)	-1(1)	-5(1)	-7(1)
C(5)	25(1)	24(1)	22(1)	0(1)	-6(1)	-6(1)
C(8)	26(1)	24(1)	20(1)	-1(1)	-3(1)	-3(1)
F(1)	39(1)	30(1)	26(1)	-6(1)	1(1)	7(1)
F(2)	34(1)	28(1)	32(1)	4(1)	-10(1)	7(1)
O(1)	31(1)	29(1)	24(1)	4(1)	-8(1)	-3(1)

Tab. 117. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **19**.

	x	y	z	U(eq)
H(1)	4570(30)	2220(30)	4782(14)	10(4)
H(2)	7120(30)	480(30)	5052(14)	8(4)

Tab. 118. Torsionswinkel [°] für **19**.

C(1)-Mn(1)-C(6)-C(8)	-173(5)
C(5)-Mn(1)-C(6)-C(8)	47.42(16)
C(2)-Mn(1)-C(6)-C(8)	-43.41(16)
C(4)-Mn(1)-C(6)-C(8)	136.89(16)
C(3)-Mn(1)-C(6)-C(8)	-132.74(16)
C(1)-Mn(1)-C(6)-C(9)	7(5)
C(5)-Mn(1)-C(6)-C(9)	-132.87(14)
C(2)-Mn(1)-C(6)-C(9)	136.29(13)
C(4)-Mn(1)-C(6)-C(9)	-43.41(13)
C(3)-Mn(1)-C(6)-C(9)	46.97(13)
C(8)-C(6)-C(9)-C(9)#1	-75.2(2)
Mn(1)-C(6)-C(9)-C(9)#1	105.08(18)
C(9)-C(6)-C(8)-F(2)	-1.4(3)
Mn(1)-C(6)-C(8)-F(2)	178.33(13)
C(9)-C(6)-C(8)-F(1)	177.84(16)
Mn(1)-C(6)-C(8)-F(1)	-2.4(3)

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

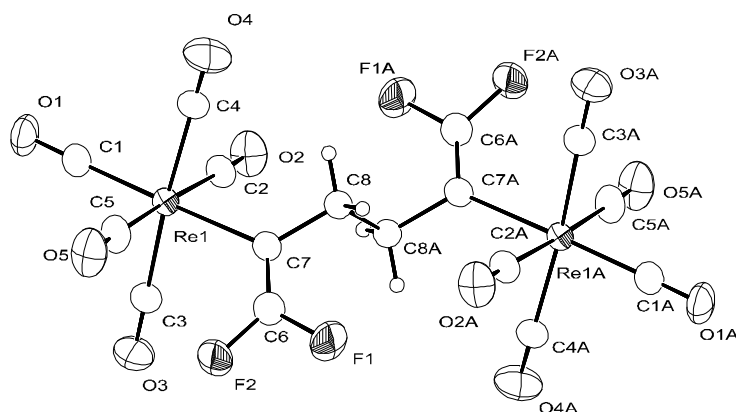


Abbildung 20: ORTEP-Darstellung der Struktur von **20** im Kristall

Tab. 119. Kristall- und Strukturdaten von **20**.

Identifikationscode	wilre	
Diffraktometer	Stoe-Vierkreisdiffraktometer	
Farbe	farblos	
Summenformel	$C_{16} H_4 F_4 O_{10} Re_2$	
Molmasse	402.30g/mol	
Messtemperatur	293(2) K	
Wellenlänge	71.069 pm	
Kristallsystem	Triklin	
Raumgruppe	P-1	
Zelldimensionen	$a = 626.70(10)$ pm	$\alpha = 83.82(2)^\circ$.
	$b = 716.2(2)$ pm	$\beta = 76.78(2)^\circ$.
	$c = 1283.2(3)$ pm	$\gamma = 66.97(2)^\circ$.
Volumen	$0.5159(2)$ nm ³	
Z	2	
Dichte (berechnet)	2.590 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	11.808 mm ⁻¹	
Absorptionskorrektur	Keine	
F(000)	366	
Kristalldimensionen	0.2 x 0.1 x 0.1 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	3.09 bis 30.76°.	

Bereich der Indizes	-9<=h<=8, -8<=k<=10, -17<=l<=18
Anzahl gemessene Reflexe	3505
unabhängige Reflexe	3079 [R(int) = 0.0191]
Vollständigkeit zu Theta = 30.76°	95.6 %
Reflexe verwendet >2sigma(I)°	2440
Methode der Strukturverfeinerung	Methode der kleinsten Fehlerquadrate F ²
Reflexe / unterdrückt / Parameter	3079 / 0 / 145
Goodness-of-fit gegen F ²	1.102
Endgültiger Fehler R [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0661, wR2 = 0.1528
R (alle Daten)	R1 = 0.0880, wR2 = 0.1645
Größte und kleinste Restelektronendichte	5.499 und -5.750 × 10 ⁻⁶ e pm ⁻³

Tab. 120. Atomkoordinaten (x 10⁴) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren (pm²x 10⁻¹) für **20**. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Re(1)	5091(1)	2884(1)	2736(1)	43(1)
C(1)	6570(20)	1070(20)	3834(10)	56(3)
C(2)	8170(20)	2610(20)	1821(9)	54(2)
C(3)	5020(30)	5290(20)	3405(11)	59(3)
C(4)	5130(30)	520(20)	1948(11)	64(3)
C(5)	1920(20)	3260(20)	3588(11)	66(3)
C(6)	1610(30)	6530(20)	1705(12)	71(4)
C(7)	3420(20)	4882(18)	1477(9)	50(2)
C(8)	4290(20)	4393(16)	292(8)	49(2)
O(1)	7480(20)	-16(19)	4465(8)	83(3)
O(2)	9936(19)	2410(20)	1347(10)	84(3)
O(3)	4930(40)	6660(20)	3805(12)	102(5)
O(4)	5040(30)	-670(20)	1547(14)	102(5)
O(5)	140(20)	3490(30)	4041(11)	95(4)
F(1)	457(19)	7860(17)	995(9)	101(4)
F(2)	570(20)	7363(17)	2674(8)	107(4)

Tab. 121. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **20**.

Re(1)-C(1)	194.8(13)
Re(1)-C(5)	196.5(13)
Re(1)-C(2)	196.5(12)
Re(1)-C(3)	198.7(13)
Re(1)-C(4)	205.2(14)
Re(1)-C(7)	220.5(11)
C(1)-O(1)	114.7(15)
C(2)-O(2)	109.6(16)
C(3)-O(3)	113.4(18)
C(4)-O(4)	107.2(18)
C(5)-O(5)	109.1(17)
C(6)-C(7)	127.9(18)
C(6)-F(2)	134.7(17)
C(6)-F(1)	135.5(16)
C(7)-C(8)	152.3(15)
C(8)-C(8)#1	151(2)
C(1)-Re(1)-C(5)	90.9(5)
C(1)-Re(1)-C(2)	92.4(5)
C(5)-Re(1)-C(2)	176.7(5)

C(1)-Re(1)-C(3)	91.8(6)
C(5)-Re(1)-C(3)	90.3(7)
C(2)-Re(1)-C(3)	89.6(6)
C(1)-Re(1)-C(4)	92.1(6)
C(5)-Re(1)-C(4)	90.8(7)
C(2)-Re(1)-C(4)	89.1(6)
C(3)-Re(1)-C(4)	175.9(5)
C(1)-Re(1)-C(7)	178.7(4)
C(5)-Re(1)-C(7)	89.1(5)
C(2)-Re(1)-C(7)	87.7(5)
C(3)-Re(1)-C(7)	89.5(5)
C(4)-Re(1)-C(7)	86.6(5)
C(7)-C(6)-F(2)	127.6(13)
C(7)-C(6)-F(1)	126.2(14)
F(2)-C(6)-F(1)	106.0(12)
C(6)-C(7)-C(8)	115.6(11)
C(6)-C(7)-Re(1)	121.5(10)
C(8)-C(7)-Re(1)	122.8(8)
C(8)#1-C(8)-C(7)	112.3(11)

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

Tab. 122. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **20**. Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^2 U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂
Re(1)	41(1)	46(1)	42(1)	-2(1)	-8(1)	-17(1)
C(1)	55(6)	65(7)	49(5)	-1(5)	-3(5)	-27(5)
C(2)	51(6)	66(7)	50(5)	-6(5)	-5(4)	-29(5)
C(3)	71(8)	56(6)	56(6)	-7(5)	-22(6)	-23(6)
C(4)	76(8)	51(6)	58(7)	-10(5)	-7(6)	-18(6)
C(5)	45(6)	85(9)	54(6)	4(6)	-4(5)	-16(6)
C(6)	62(8)	67(8)	59(7)	-2(6)	-10(6)	-1(6)
C(7)	47(5)	53(5)	48(5)	-4(4)	-10(4)	-16(4)
C(8)	58(6)	47(5)	48(5)	-3(4)	-18(4)	-22(4)
O(1)	83(7)	92(8)	57(5)	23(5)	-25(5)	-16(6)
O(2)	46(5)	122(10)	82(7)	5(7)	-5(5)	-38(6)
O(3)	149(14)	77(8)	94(9)	-21(7)	-38(9)	-45(9)
O(4)	118(12)	87(8)	126(12)	-36(8)	-34(9)	-52(8)
O(5)	53(5)	134(12)	85(8)	21(8)	-3(5)	-32(7)
F(1)	82(6)	86(6)	91(7)	14(5)	-22(5)	14(5)
F(2)	97(7)	87(6)	68(6)	-10(5)	11(5)	24(6)

Tab. 123. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **20**.

	x	y	z	U(eq)
H(8A)	5265	2959	217	59
H(8B)	2941	4672	-32	59

Tab. 124. Torsionswinkel [°] für **20**.

F(2)-C(6)-C(7)-C(8)	-175.9(15)
F(1)-C(6)-C(7)-C(8)	-1(3)
F(2)-C(6)-C(7)-Re(1)	5(3)
F(1)-C(6)-C(7)-Re(1)	179.7(14)
C(1)-Re(1)-C(7)-C(6)	131(18)
C(5)-Re(1)-C(7)-C(6)	43.1(14)
C(2)-Re(1)-C(7)-C(6)	-136.9(14)
C(3)-Re(1)-C(7)-C(6)	-47.2(14)
C(4)-Re(1)-C(7)-C(6)	133.9(14)
C(1)-Re(1)-C(7)-C(8)	-47(19)
C(5)-Re(1)-C(7)-C(8)	-135.6(10)
C(2)-Re(1)-C(7)-C(8)	44.4(9)
C(3)-Re(1)-C(7)-C(8)	134.0(10)
C(4)-Re(1)-C(7)-C(8)	-44.8(10)
C(6)-C(7)-C(8)-C(8)#1	78.4(18)
Re(1)-C(7)-C(8)-C(8)#1	-102.7(12)

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

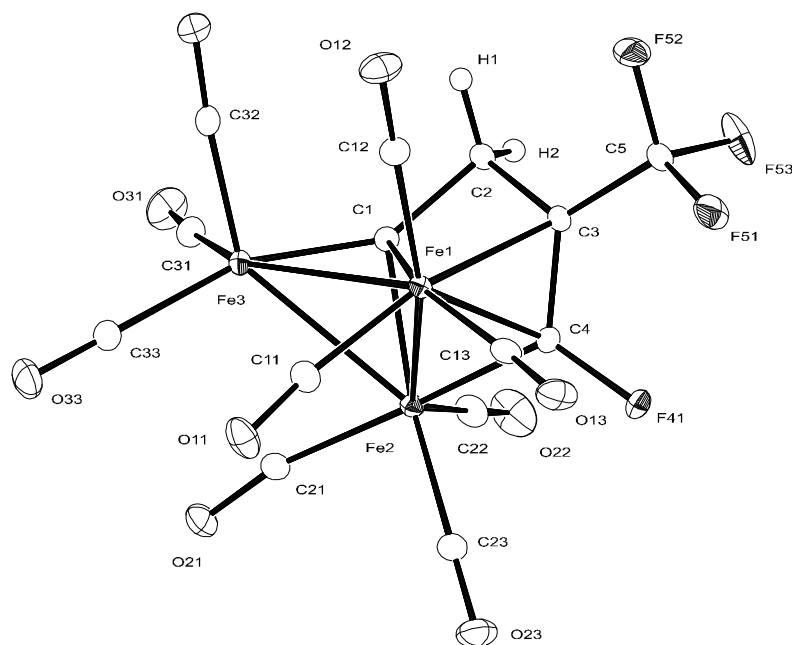


Abbildung 21: ORTEP-Darstellung der Struktur von **21** im Kristall

Tab. 125. Kristall- und Strukturdaten von **21**.

Identifikationscode	eiallena
Diffraktometer	SMART CCD, Bruker AXS
Farbe	dunkelgruen
Summenformel	C ₁₄ H ₂ F ₄ Fe ₃ O ₉
Molmasse	557.71g/mol
Messtemperatur	133(2) K
Wellenlänge	71.073 pm
Kristallsystem	Monoklin
Raumgruppe	P ₂ ₁ /n

Zelldimensionen	a = 875.64(5) pm b = 1321.56(8) pm c = 1519.67(9) pm	$\alpha = 90^\circ$. $\beta = 90.3340(10)^\circ$. $\gamma = 90^\circ$.
Volumen	1.75855(18) nm ³	
Z	4	
Dichte (berechnet)	2.106 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	2.532 mm ⁻¹	
Absorptionskorrektur	Semi empirisch (SADABS) [116, 117]	
F(000)	1088	
Kristalldimensionen	0.75 x 0.5 x 0.5 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	2.04 bis 31.40°.	
Bereich der Indizes	-12<=h<=12, -19<=k<=19, -22<=l<=22	
Anzahl gemessene Reflexe	20984	
unabhängige Reflexe	20984 [R(int) = 0.047]	
Vollständigkeit zu Theta = 31.40°	93.4 %	
Reflexe >2sigma(I)°	5089	
Methode der Strukturverfeinerung	Methode der kleinsten Fehlerquadrate F ²	
Reflexe / unterdrückt / Parameter	5430 / 0 / 279	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.118	
Endgültiger Fehler R [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0196, wR2 = 0.0515	
R (alle Daten)	R1 = 0.0215, wR2 = 0.0524	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.425 und -0.502 x 10 ⁻⁶ e pm ⁻³	

Tab. 126. Atomkoordinaten (x 10⁴) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren (pm²x 10⁻¹) für **21**. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Fe(1)	9289(1)	7990(1)	641(1)	13(1)
Fe(2)	6848(1)	7538(1)	1378(1)	14(1)
Fe(3)	6757(1)	7534(1)	-361(1)	15(1)
C(1)	7762(1)	6777(1)	410(1)	15(1)
C(2)	8840(1)	5927(1)	587(1)	17(1)
C(3)	9790(1)	6528(1)	1241(1)	16(1)
C(4)	8872(1)	7153(1)	1775(1)	16(1)
C(5)	11356(1)	6165(1)	1474(1)	21(1)
C(11)	8331(1)	9146(1)	351(1)	21(1)
C(12)	10655(1)	7830(1)	-252(1)	21(1)
C(13)	10565(1)	8757(1)	1324(1)	20(1)
C(21)	5076(1)	8048(1)	922(1)	19(1)
C(22)	5951(1)	6489(1)	1914(1)	24(1)
C(23)	6780(1)	8511(1)	2236(1)	21(1)
C(31)	5277(1)	6645(1)	-632(1)	23(1)
C(32)	7860(1)	7191(1)	-1295(1)	21(1)
C(33)	5819(1)	8688(1)	-843(1)	23(1)
F(41)	9467(1)	7428(1)	2573(1)	22(1)
F(51)	12175(1)	6822(1)	1944(1)	32(1)
F(52)	12183(1)	5958(1)	753(1)	37(1)
F(53)	11302(1)	5306(1)	1939(1)	43(1)
O(11)	7901(1)	9953(1)	234(1)	32(1)
O(12)	11520(1)	7738(1)	-801(1)	33(1)
O(13)	11308(1)	9257(1)	1752(1)	32(1)
O(21)	3881(1)	8364(1)	792(1)	28(1)
O(22)	5443(1)	5816(1)	2271(1)	44(1)
O(23)	6779(1)	9129(1)	2752(1)	34(1)
O(31)	4411(1)	6034(1)	-785(1)	37(1)

O(32)	8602(1)	6920(1)	-1861(1)	30(1)
O(33)	5229(1)	9368(1)	-1138(1)	35(1)

Tab. 127. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **21**.

Fe(1)-C(11)	179.71(12)
Fe(1)-C(13)	182.70(12)
Fe(1)-C(12)	182.71(12)
Fe(1)-C(4)	208.13(11)
Fe(1)-C(1)	211.51(11)
Fe(1)-C(3)	217.91(11)
Fe(1)-Fe(2)	249.17(2)
Fe(1)-Fe(3)	274.97(2)
Fe(2)-C(22)	179.18(13)
Fe(2)-C(21)	182.44(12)
Fe(2)-C(23)	183.20(12)
Fe(2)-C(4)	193.70(11)
Fe(2)-C(1)	195.77(11)
Fe(2)-Fe(3)	264.42(3)
Fe(3)-C(1)	177.13(11)
Fe(3)-C(32)	178.01(13)
Fe(3)-C(31)	179.44(13)
Fe(3)-C(33)	187.96(13)
C(1)-C(2)	149.05(15)
C(2)-C(3)	151.70(15)
C(2)-H(1)	98.1(15)
C(2)-H(2)	98.6(17)
C(3)-C(4)	141.28(15)
C(3)-C(5)	149.42(15)
C(4)-F(41)	136.66(13)
C(5)-F(51)	133.05(14)
C(5)-F(53)	133.69(15)
C(5)-F(52)	134.54(14)
C(11)-O(11)	114.46(15)
C(12)-O(12)	113.59(15)
C(13)-O(13)	113.09(15)
C(21)-O(21)	114.29(15)
C(22)-O(22)	113.43(16)
C(23)-O(23)	113.22(16)
C(31)-O(31)	113.15(16)
C(32)-O(32)	113.79(15)
C(33)-O(33)	112.72(16)
C(4)-Fe(1)-C(1)	95.28(4)
C(4)-Fe(1)-Fe(3)	101.39(3)
C(1)-Fe(1)-Fe(3)	40.10(3)
C(3)-Fe(1)-Fe(3)	101.37(3)
Fe(2)-Fe(1)-Fe(3)	60.355(7)
C(4)-Fe(2)-C(1)	73.82(5)
C(4)-Fe(2)-Fe(1)	54.33(3)
C(1)-Fe(2)-Fe(1)	55.20(3)
C(4)-Fe(2)-Fe(3)	109.44(3)
C(1)-Fe(2)-Fe(3)	42.06(3)
Fe(1)-Fe(2)-Fe(3)	64.661(7)
C(1)-Fe(3)-Fe(2)	47.76(3)
C(1)-Fe(3)-Fe(1)	50.28(3)
Fe(2)-Fe(3)-Fe(1)	54.983(6)
C(2)-C(1)-Fe(3)	148.95(8)
C(2)-C(1)-Fe(2)	120.87(8)
Fe(3)-C(1)-Fe(2)	90.18(5)

C(2)-C(1)-Fe(1)	98.20(7)
Fe(3)-C(1)-Fe(1)	89.61(5)
Fe(2)-C(1)-Fe(1)	75.33(4)
C(1)-C(2)-C(3)	93.86(8)
C(1)-C(2)-H(1)	110.5(9)
C(3)-C(2)-H(1)	112.2(9)
C(1)-C(2)-H(2)	116.1(9)
C(3)-C(2)-H(2)	114.5(9)
H(1)-C(2)-H(2)	109.1(13)
C(4)-C(3)-C(5)	125.16(10)
C(4)-C(3)-C(2)	111.77(9)
C(5)-C(3)-C(2)	119.12(9)
C(4)-C(3)-Fe(1)	66.93(6)
C(5)-C(3)-Fe(1)	124.51(8)
C(2)-C(3)-Fe(1)	94.73(7)
F(41)-C(4)-C(3)	116.74(9)
F(41)-C(4)-Fe(2)	123.40(8)
C(3)-C(4)-Fe(2)	119.82(8)
F(41)-C(4)-Fe(1)	121.73(7)
C(3)-C(4)-Fe(1)	74.42(6)
Fe(2)-C(4)-Fe(1)	76.55(4)
F(51)-C(5)-F(53)	106.94(10)
F(51)-C(5)-F(52)	106.20(10)
F(53)-C(5)-F(52)	106.18(10)
F(51)-C(5)-C(3)	114.14(10)
F(53)-C(5)-C(3)	111.27(10)
F(52)-C(5)-C(3)	111.62(10)

Tab. 128. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **21**. Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^*^2 U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Fe(1)	13(1)	12(1)	15(1)	-1(1)	0(1)	0(1)
Fe(2)	13(1)	14(1)	14(1)	0(1)	1(1)	1(1)
Fe(3)	16(1)	16(1)	14(1)	-1(1)	-2(1)	2(1)
C(1)	15(1)	14(1)	16(1)	-2(1)	-1(1)	-1(1)
C(2)	19(1)	13(1)	20(1)	-2(1)	-3(1)	2(1)
C(3)	16(1)	15(1)	17(1)	0(1)	-2(1)	2(1)
C(4)	17(1)	18(1)	14(1)	0(1)	-1(1)	0(1)
C(5)	18(1)	20(1)	23(1)	-2(1)	-3(1)	4(1)
C(11)	19(1)	18(1)	26(1)	1(1)	-1(1)	-2(1)
C(12)	20(1)	20(1)	22(1)	-2(1)	1(1)	-2(1)
C(13)	16(1)	19(1)	25(1)	-4(1)	2(1)	3(1)
C(21)	18(1)	19(1)	21(1)	-1(1)	2(1)	1(1)
C(22)	20(1)	24(1)	29(1)	4(1)	4(1)	1(1)
C(23)	16(1)	26(1)	22(1)	-3(1)	1(1)	2(1)
C(31)	23(1)	26(1)	21(1)	-2(1)	-3(1)	1(1)
C(32)	22(1)	22(1)	18(1)	1(1)	-4(1)	3(1)
C(33)	24(1)	23(1)	21(1)	-1(1)	-3(1)	3(1)
F(41)	24(1)	29(1)	14(1)	-3(1)	-4(1)	4(1)
F(51)	21(1)	34(1)	41(1)	-13(1)	-12(1)	5(1)
F(52)	22(1)	57(1)	32(1)	-13(1)	0(1)	15(1)
F(53)	31(1)	32(1)	65(1)	23(1)	-8(1)	7(1)
O(11)	32(1)	16(1)	47(1)	4(1)	-9(1)	1(1)
O(12)	29(1)	41(1)	29(1)	-7(1)	11(1)	-4(1)
O(13)	23(1)	32(1)	41(1)	-18(1)	-3(1)	-2(1)

O(21)	19(1)	35(1)	31(1)	1(1)	0(1)	8(1)
O(22)	38(1)	32(1)	60(1)	19(1)	14(1)	-3(1)
O(23)	32(1)	37(1)	33(1)	-17(1)	1(1)	3(1)
O(31)	33(1)	39(1)	38(1)	-7(1)	-5(1)	-12(1)
O(32)	32(1)	37(1)	22(1)	-2(1)	3(1)	8(1)
O(33)	43(1)	27(1)	36(1)	4(1)	-10(1)	11(1)

Tab. 129. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **21**.

	x	y	z	U(eq)
H(1)	9413(17)	5757(11)	54(10)	16(3)
H(2)	8386(18)	5304(13)	829(10)	22(4)

Tab. 130. Torsionswinkel [°] für **21**.

C(1)-Fe(1)-Fe(2)-C(4)	94.65(6)
C(3)-Fe(1)-Fe(2)-C(4)	30.96(5)
Fe(3)-Fe(1)-Fe(2)-C(4)	142.48(4)
C(4)-Fe(1)-Fe(2)-C(1)	-94.65(6)
C(3)-Fe(1)-Fe(2)-C(1)	-63.69(5)
Fe(3)-Fe(1)-Fe(2)-C(1)	47.83(4)
C(4)-Fe(1)-Fe(2)-Fe(3)	-142.48(4)
C(1)-Fe(1)-Fe(2)-Fe(3)	-47.83(4)
C(3)-Fe(1)-Fe(2)-Fe(3)	-111.52(3)
C(4)-Fe(2)-Fe(3)-C(1)	33.66(6)
Fe(1)-Fe(2)-Fe(3)-C(1)	65.31(5)
C(4)-Fe(2)-Fe(3)-Fe(1)	-31.65(4)
C(1)-Fe(2)-Fe(3)-Fe(1)	-65.31(5)
C(4)-Fe(1)-Fe(3)-C(1)	-32.97(6)
C(3)-Fe(1)-Fe(3)-C(1)	6.48(5)
Fe(2)-Fe(1)-Fe(3)-C(1)	-60.99(5)
C(4)-Fe(1)-Fe(3)-Fe(2)	28.02(3)
C(1)-Fe(1)-Fe(3)-Fe(2)	60.99(5)
C(3)-Fe(1)-Fe(3)-Fe(2)	67.47(3)
Fe(2)-Fe(3)-C(1)-C(2)	179.28(19)
Fe(1)-Fe(3)-C(1)-C(2)	-105.39(17)
Fe(1)-Fe(3)-C(1)-Fe(2)	75.33(4)
Fe(2)-Fe(3)-C(1)-Fe(1)	-75.33(4)
C(4)-Fe(2)-C(1)-C(2)	33.41(8)
Fe(1)-Fe(2)-C(1)-C(2)	90.88(9)
Fe(3)-Fe(2)-C(1)-C(2)	-179.57(11)
C(4)-Fe(2)-C(1)-Fe(3)	-147.03(5)
Fe(1)-Fe(2)-C(1)-Fe(3)	-89.55(4)
C(4)-Fe(2)-C(1)-Fe(1)	-57.47(4)
Fe(3)-Fe(2)-C(1)-Fe(1)	89.55(4)
C(4)-Fe(1)-C(1)-C(2)	-65.36(7)
C(3)-Fe(1)-C(1)-C(2)	-22.93(6)
Fe(2)-Fe(1)-C(1)-C(2)	-119.88(8)
Fe(3)-Fe(1)-C(1)-C(2)	149.84(9)
C(4)-Fe(1)-C(1)-Fe(3)	144.80(6)
C(3)-Fe(1)-C(1)-Fe(3)	-172.77(6)
Fe(2)-Fe(1)-C(1)-Fe(3)	90.29(4)

C(4)-Fe(1)-C(1)-Fe(2)	54.51(4)
C(3)-Fe(1)-C(1)-Fe(2)	96.95(5)
Fe(3)-Fe(1)-C(1)-Fe(2)	-90.29(4)
Fe(3)-C(1)-C(2)-C(3)	132.61(15)
Fe(2)-C(1)-C(2)-C(3)	-48.23(10)
Fe(1)-C(1)-C(2)-C(3)	29.54(8)
C(1)-C(2)-C(3)-C(4)	38.65(11)
C(1)-C(2)-C(3)-C(5)	-162.55(10)
C(1)-C(2)-C(3)-Fe(1)	-28.37(7)
C(1)-Fe(1)-C(3)-C(4)	-89.33(7)
Fe(2)-Fe(1)-C(3)-C(4)	-38.52(6)
Fe(3)-Fe(1)-C(3)-C(4)	-94.08(6)
C(11)-Fe(1)-C(3)-C(5)	-147.98(14)
C(13)-Fe(1)-C(3)-C(5)	-43.74(10)
C(12)-Fe(1)-C(3)-C(5)	51.80(10)
C(4)-Fe(1)-C(3)-C(5)	-117.82(12)
C(1)-Fe(1)-C(3)-C(5)	152.85(11)
Fe(2)-Fe(1)-C(3)-C(5)	-156.34(10)
Fe(3)-Fe(1)-C(3)-C(5)	148.10(9)
C(4)-Fe(1)-C(3)-C(2)	111.67(9)
C(1)-Fe(1)-C(3)-C(2)	22.34(6)
Fe(2)-Fe(1)-C(3)-C(2)	73.15(6)
Fe(3)-Fe(1)-C(3)-C(2)	17.59(7)
C(5)-C(3)-C(4)-F(41)	-1.13(16)
C(2)-C(3)-C(4)-F(41)	156.13(9)
Fe(1)-C(3)-C(4)-F(41)	-118.09(9)
C(5)-C(3)-C(4)-Fe(2)	-179.03(9)
C(2)-C(3)-C(4)-Fe(2)	-21.77(13)
Fe(1)-C(3)-C(4)-Fe(2)	64.01(7)
C(5)-C(3)-C(4)-Fe(1)	116.96(11)
C(2)-C(3)-C(4)-Fe(1)	-85.78(8)
C(1)-Fe(2)-C(4)-F(41)	177.80(10)
Fe(1)-Fe(2)-C(4)-F(41)	119.34(10)
Fe(3)-Fe(2)-C(4)-F(41)	155.05(8)
C(1)-Fe(2)-C(4)-C(3)	-4.45(9)
Fe(1)-Fe(2)-C(4)-C(3)	-62.91(8)
Fe(3)-Fe(2)-C(4)-C(3)	-27.20(10)
C(1)-Fe(2)-C(4)-Fe(1)	58.46(4)
Fe(3)-Fe(2)-C(4)-Fe(1)	35.71(3)
C(1)-Fe(1)-C(4)-F(41)	-176.11(10)
C(3)-Fe(1)-C(4)-F(41)	112.14(11)
Fe(2)-Fe(1)-C(4)-F(41)	-121.17(10)
Fe(3)-Fe(1)-C(4)-F(41)	-153.85(8)
C(1)-Fe(1)-C(4)-C(3)	71.75(7)
Fe(2)-Fe(1)-C(4)-C(3)	126.69(7)
Fe(3)-Fe(1)-C(4)-C(3)	94.01(6)
C(1)-Fe(1)-C(4)-Fe(2)	-54.94(4)
C(3)-Fe(1)-C(4)-Fe(2)	-126.69(7)
Fe(3)-Fe(1)-C(4)-Fe(2)	-32.68(3)
C(4)-C(3)-C(5)-F(51)	-34.02(17)
C(2)-C(3)-C(5)-F(51)	170.24(10)
Fe(1)-C(3)-C(5)-F(51)	50.40(14)
C(4)-C(3)-C(5)-F(53)	87.13(14)
C(2)-C(3)-C(5)-F(53)	-68.61(14)
Fe(1)-C(3)-C(5)-F(53)	171.54(8)
C(4)-C(3)-C(5)-F(52)	-154.44(11)
C(2)-C(3)-C(5)-F(52)	49.82(14)
Fe(1)-C(3)-C(5)-F(52)	-70.03(12)

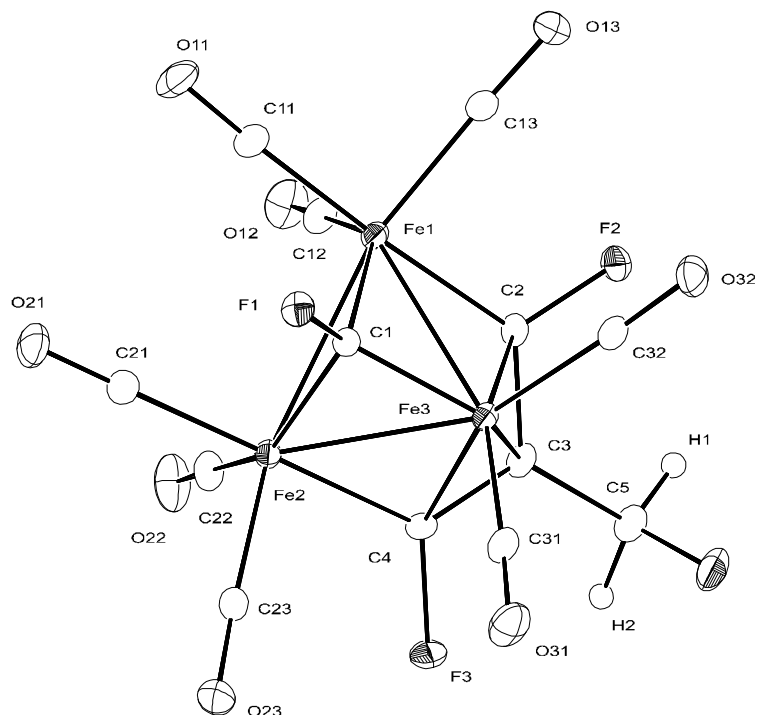


Abbildung 22: ORTEP-Darstellung der Struktur von **22** im Kristall

Tab. 131. Kristall- und Strukturdaten von **22**.

Identifikationscode	feiallea	
Diffraktometer	SMART CCD, Bruker AXS	
Farbe	dunkelgruen	
Summenformel	$C_{13} H_2 F_4 Fe_3 O_8$	
Molmasse	529.69 g/mol	
Messtemperatur	133(2) K	
Wellenlänge	71.073 pm	
Kristallsystem	Monoklin	
Raumgruppe	$P2_1/c$	
Zelldimensionen	$a = 1402.62(8) \text{ pm}$	$\alpha = 90^\circ$.
	$b = 877.23(5) \text{ pm}$	$\beta = 110.5500(10)^\circ$.
	$c = 1412.55(8) \text{ pm}$	$\gamma = 90^\circ$.
Volumen	$1.62743(16) \text{ nm}^3$	
Z	3	
Dichte (berechnet)	2.162 Mg/m^3	
Absorptionskoeffizient	2.725 mm^{-1}	
Absorptionskorrektur	Semi empirisch (SADABS) [116, 117]	
F(000)	1032	
Kristalldimensionen	$0.6 \times 0.3 \times 0.05 \text{ mm}^3$	
Theta-Bereich der Datensammlung	2.54 bis 31.42° .	
Bereich der Indizes	$-19 \leq h \leq 20, -12 \leq k \leq 12, -19 \leq l \leq 19$	
Anzahl gemessene Reflexe	18972	
unabhängige Reflexe	5020 [R(int) = 0.0392]	
Vollständigkeit zu $\Theta = 31.42^\circ$	93.3 %	
Reflexe $>2\sigma(I)^\circ$	4164	
Methode der Strukturverfeinerung	Methode der kleinsten Fehlerquadrate F^2	
Reflexe / unterdrückt / Parameter	5020 / 0 / 261	
Goodness-of-fit gegen F^2	1.087	
Endgültiger Fehler R [$I > 2\sigma(I)$]	R1 = 0.0305, wR2 = 0.0801	
R (alle Daten)	R1 = 0.0410, wR2 = 0.0834	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.646 und $-0.443 \times 10^{-6} \text{ e pm}^{-3}$	

Tab. 132. Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **22**. $U(\text{eq})$ ist definiert als $1/3$ des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Fe(1)	2364(1)	5255(1)	842(1)	16(1)
Fe(2)	2332(1)	5156(1)	-1008(1)	16(1)
Fe(3)	1768(1)	2941(1)	-224(1)	15(1)
C(11)	1699(2)	7051(2)	747(2)	24(1)
C(12)	3621(2)	6121(3)	1314(2)	25(1)
C(13)	2043(2)	4790(2)	1952(2)	23(1)
C(21)	1762(2)	7043(2)	-1326(2)	22(1)
C(22)	3606(2)	5865(3)	-790(2)	24(1)
C(23)	1857(2)	4610(2)	-2332(2)	22(1)
C(31)	1010(2)	1910(2)	-1339(2)	23(1)
C(32)	1153(2)	1951(2)	526(2)	21(1)
C(1)	1230(2)	4806(2)	-453(2)	16(1)
C(2)	3056(2)	3279(2)	1006(2)	18(1)
C(3)	3402(2)	2505(2)	311(2)	19(1)
C(4)	2992(2)	3159(2)	-660(2)	19(1)
C(5)	3987(2)	1026(3)	530(2)	26(1)
F(1)	290(1)	5400(1)	-809(1)	21(1)
F(2)	3337(1)	2595(2)	1931(1)	24(1)
F(3)	3216(1)	2381(2)	-1392(1)	28(1)
F(4)	3323(1)	-211(2)	235(1)	34(1)
O(11)	1257(2)	8152(2)	706(1)	35(1)
O(12)	4410(1)	6655(2)	1608(2)	37(1)
O(13)	1821(2)	4447(2)	2623(1)	33(1)
O(21)	1402(1)	8212(2)	-1522(1)	32(1)
O(22)	4405(1)	6294(2)	-659(2)	38(1)
O(23)	1537(2)	4221(2)	-3153(1)	33(1)
O(31)	514(2)	1324(2)	-2058(2)	37(1)
O(32)	782(1)	1369(2)	1030(1)	30(1)

Tab. 133. Bindungslängen [pm] und Winkel [°] für **22**.

Fe(1)-C(11)	181.2(2)
Fe(1)-C(12)	181.8(2)
Fe(1)-C(13)	182.4(2)
Fe(1)-C(2)	196.0(2)
Fe(1)-C(1)	199.6(2)
Fe(1)-Fe(3)	249.08(4)
Fe(1)-Fe(2)	259.97(4)
Fe(2)-C(22)	181.3(2)
Fe(2)-C(23)	181.5(2)
Fe(2)-C(21)	182.4(2)
Fe(2)-C(4)	196.1(2)
Fe(2)-C(1)	198.78(19)
Fe(2)-Fe(3)	249.96(4)
Fe(3)-C(1)	178.25(19)
Fe(3)-C(31)	180.3(2)
Fe(3)-C(32)	180.6(2)
Fe(3)-C(4)	202.6(2)
Fe(3)-C(2)	204.2(2)
Fe(3)-C(3)	218.0(2)
C(11)-O(11)	113.8(3)

C(12)-O(12)	113.7(3)
C(13)-O(13)	113.6(3)
C(21)-O(21)	113.3(3)
C(22)-O(22)	113.4(3)
C(23)-O(23)	113.9(3)
C(31)-O(31)	113.3(3)
C(32)-O(32)	113.9(3)
C(1)-F(1)	134.2(2)
C(2)-F(2)	136.4(2)
C(2)-C(3)	141.2(3)
C(3)-C(4)	141.0(3)
C(3)-C(5)	150.8(3)
C(4)-F(3)	136.5(2)
C(5)-F(4)	139.4(3)
C(5)-H(1)	92(3)
C(5)-H(2)	95(3)
C(2)-Fe(1)-C(1)	97.80(8)
C(2)-Fe(1)-Fe(3)	52.99(6)
C(1)-Fe(1)-Fe(3)	45.16(6)
C(2)-Fe(1)-Fe(2)	85.55(6)
C(1)-Fe(1)-Fe(2)	49.13(6)
Fe(3)-Fe(1)-Fe(2)	58.770(11)
C(4)-Fe(2)-C(1)	97.25(8)
C(4)-Fe(2)-Fe(3)	52.35(6)
C(1)-Fe(2)-Fe(3)	45.04(6)
C(4)-Fe(2)-Fe(1)	86.41(6)
C(1)-Fe(2)-Fe(1)	49.41(6)
Fe(3)-Fe(2)-Fe(1)	58.440(11)
C(1)-Fe(3)-C(4)	101.98(9)
C(1)-Fe(3)-C(2)	102.26(9)
C(4)-Fe(3)-C(2)	69.73(9)
C(1)-Fe(3)-C(3)	123.35(9)
C(4)-Fe(3)-C(3)	38.94(8)
C(2)-Fe(3)-C(3)	38.91(8)
C(1)-Fe(3)-Fe(1)	52.58(7)
C(4)-Fe(3)-Fe(1)	88.05(6)
C(2)-Fe(3)-Fe(1)	50.06(6)
C(3)-Fe(3)-Fe(1)	81.05(6)
C(1)-Fe(3)-Fe(2)	52.10(6)
C(4)-Fe(3)-Fe(2)	50.03(6)
C(2)-Fe(3)-Fe(2)	86.60(6)
C(3)-Fe(3)-Fe(2)	80.32(6)
Fe(1)-Fe(3)-Fe(2)	62.790(13)
F(1)-C(1)-Fe(3)	136.24(15)
F(1)-C(1)-Fe(2)	126.16(14)
Fe(3)-C(1)-Fe(2)	82.86(8)
F(1)-C(1)-Fe(1)	128.99(14)
Fe(3)-C(1)-Fe(1)	82.26(8)
Fe(2)-C(1)-Fe(1)	81.46(8)
F(2)-C(2)-C(3)	113.60(17)
F(2)-C(2)-Fe(1)	117.81(14)
C(3)-C(2)-Fe(1)	128.28(16)
F(2)-C(2)-Fe(3)	128.53(14)
C(3)-C(2)-Fe(3)	75.86(12)
Fe(1)-C(2)-Fe(3)	76.95(7)
C(4)-C(3)-C(2)	110.99(18)
C(4)-C(3)-C(5)	123.9(2)
C(2)-C(3)-C(5)	124.4(2)
C(4)-C(3)-Fe(3)	64.61(11)
C(2)-C(3)-Fe(3)	65.23(11)
C(5)-C(3)-Fe(3)	130.69(15)
F(3)-C(4)-C(3)	114.19(17)

F(3)-C(4)-Fe(2)	118.05(15)
C(3)-C(4)-Fe(2)	127.10(15)
F(3)-C(4)-Fe(3)	128.93(15)
C(3)-C(4)-Fe(3)	76.45(12)
Fe(2)-C(4)-Fe(3)	77.62(7)
F(4)-C(5)-C(3)	110.46(18)
F(4)-C(5)-H(1)	106.9(16)
C(3)-C(5)-H(1)	109.1(16)
F(4)-C(5)-H(2)	105.1(17)
C(3)-C(5)-H(2)	107.9(17)
H(1)-C(5)-H(2)	117(2)

Tab. 134. Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **22**. Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂
Fe(1)	18(1)	14(1)	16(1)	-1(1)	5(1)	2(1)
Fe(2)	16(1)	15(1)	18(1)	1(1)	8(1)	1(1)
Fe(3)	16(1)	13(1)	18(1)	0(1)	7(1)	0(1)
C(11)	26(1)	21(1)	21(1)	-4(1)	4(1)	2(1)
C(12)	26(1)	20(1)	26(1)	-1(1)	6(1)	2(1)
C(13)	29(1)	19(1)	21(1)	-1(1)	8(1)	7(1)
C(21)	21(1)	21(1)	26(1)	0(1)	10(1)	-1(1)
C(22)	22(1)	22(1)	27(1)	7(1)	7(1)	3(1)
C(23)	27(1)	18(1)	24(1)	2(1)	11(1)	1(1)
C(31)	24(1)	17(1)	28(1)	-1(1)	8(1)	0(1)
C(32)	22(1)	16(1)	27(1)	0(1)	9(1)	3(1)
C(1)	16(1)	16(1)	18(1)	0(1)	7(1)	1(1)
C(2)	18(1)	16(1)	19(1)	2(1)	4(1)	1(1)
C(3)	15(1)	16(1)	26(1)	1(1)	6(1)	3(1)
C(4)	21(1)	18(1)	23(1)	-2(1)	14(1)	2(1)
C(5)	26(1)	19(1)	31(1)	2(1)	10(1)	7(1)
F(1)	15(1)	23(1)	25(1)	2(1)	7(1)	4(1)
F(2)	29(1)	23(1)	20(1)	6(1)	6(1)	7(1)
F(3)	36(1)	26(1)	28(1)	-1(1)	21(1)	10(1)
F(4)	44(1)	16(1)	41(1)	0(1)	14(1)	1(1)
O(11)	41(1)	25(1)	34(1)	-7(1)	6(1)	12(1)
O(12)	28(1)	35(1)	42(1)	-2(1)	2(1)	-6(1)
O(13)	49(1)	30(1)	26(1)	3(1)	21(1)	7(1)
O(21)	35(1)	23(1)	38(1)	8(1)	12(1)	8(1)
O(22)	21(1)	37(1)	56(1)	17(1)	12(1)	-2(1)
O(23)	46(1)	30(1)	22(1)	-2(1)	12(1)	-2(1)
O(31)	40(1)	27(1)	34(1)	-7(1)	1(1)	-4(1)
O(32)	34(1)	24(1)	38(1)	6(1)	20(1)	0(1)

Tab. 135. Wasserstoffkoordinaten ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{pm}^2 \times 10^{-1}$) für **22**.

	x	y	z	U(eq)
H(1)	4320(19)	940(30)	1210(20)	17(6)
H(2)	4390(20)	980(30)	110(20)	27(7)

Tab. 136. Torsionswinkel [°] für **22**.

C(11)-Fe(1)-Fe(2)-C(4)	-176.97(10)
C(12)-Fe(1)-Fe(2)-C(4)	88.48(9)
C(13)-Fe(1)-Fe(2)-C(4)	-70.2(2)
C(2)-Fe(1)-Fe(2)-C(4)	1.60(9)
C(1)-Fe(1)-Fe(2)-C(4)	-102.72(10)
Fe(3)-Fe(1)-Fe(2)-C(4)	-47.18(6)
C(2)-Fe(1)-Fe(2)-C(1)	104.33(9)
Fe(3)-Fe(1)-Fe(2)-C(1)	55.54(7)
C(2)-Fe(1)-Fe(2)-Fe(3)	48.78(6)
C(1)-Fe(1)-Fe(2)-Fe(3)	-55.54(7)
C(2)-Fe(1)-Fe(3)-C(1)	-171.64(11)
Fe(2)-Fe(1)-Fe(3)-C(1)	-61.55(8)
C(2)-Fe(1)-Fe(3)-C(4)	-64.93(10)
C(1)-Fe(1)-Fe(3)-C(4)	106.71(10)
Fe(2)-Fe(1)-Fe(3)-C(4)	45.16(6)
C(1)-Fe(1)-Fe(3)-C(2)	171.64(11)
Fe(2)-Fe(1)-Fe(3)-C(2)	110.09(8)
C(2)-Fe(1)-Fe(3)-C(3)	-26.42(10)
C(1)-Fe(1)-Fe(3)-C(3)	145.22(10)
Fe(2)-Fe(1)-Fe(3)-C(3)	83.67(6)
C(2)-Fe(1)-Fe(3)-Fe(2)	-110.09(8)
C(1)-Fe(1)-Fe(3)-Fe(2)	61.55(8)
C(4)-Fe(2)-Fe(3)-C(1)	174.65(12)
Fe(1)-Fe(2)-Fe(3)-C(1)	62.25(9)
C(1)-Fe(2)-Fe(3)-C(4)	-174.65(12)
Fe(1)-Fe(2)-Fe(3)-C(4)	-112.40(8)
C(4)-Fe(2)-Fe(3)-C(2)	66.23(10)
C(1)-Fe(2)-Fe(3)-C(2)	-108.41(10)
Fe(1)-Fe(2)-Fe(3)-C(2)	-46.17(6)
C(4)-Fe(2)-Fe(3)-C(3)	27.55(10)
C(1)-Fe(2)-Fe(3)-C(3)	-147.09(10)
Fe(1)-Fe(2)-Fe(3)-C(3)	-84.85(6)
C(4)-Fe(2)-Fe(3)-Fe(1)	112.40(8)
C(1)-Fe(2)-Fe(3)-Fe(1)	-62.25(9)
C(4)-Fe(3)-C(1)-F(1)	141.0(2)
C(2)-Fe(3)-C(1)-F(1)	-147.4(2)
C(3)-Fe(3)-C(1)-F(1)	176.68(18)
Fe(1)-Fe(3)-C(1)-F(1)	-140.9(2)
Fe(2)-Fe(3)-C(1)-F(1)	136.8(3)
C(4)-Fe(3)-C(1)-Fe(2)	4.19(9)
C(2)-Fe(3)-C(1)-Fe(2)	75.75(8)
C(3)-Fe(3)-C(1)-Fe(2)	39.88(12)
Fe(1)-Fe(3)-C(1)-Fe(2)	82.30(7)
C(4)-Fe(3)-C(1)-Fe(1)	-78.11(8)
C(2)-Fe(3)-C(1)-Fe(1)	-6.55(9)
C(3)-Fe(3)-C(1)-Fe(1)	-42.42(11)

Fe(2)-Fe(3)-C(1)-Fe(1)	-82.30(7)
C(4)-Fe(2)-C(1)-F(1)	-148.37(17)
Fe(3)-Fe(2)-C(1)-F(1)	-144.1(2)
Fe(1)-Fe(2)-C(1)-F(1)	132.71(19)
C(4)-Fe(2)-C(1)-Fe(3)	-4.27(9)
Fe(1)-Fe(2)-C(1)-Fe(3)	-83.20(7)
C(4)-Fe(2)-C(1)-Fe(1)	78.93(8)
Fe(3)-Fe(2)-C(1)-Fe(1)	83.20(7)
C(2)-Fe(1)-C(1)-F(1)	152.59(17)
Fe(3)-Fe(1)-C(1)-F(1)	145.9(2)
Fe(2)-Fe(1)-C(1)-F(1)	-130.3(2)
C(2)-Fe(1)-C(1)-Fe(3)	6.73(9)
Fe(2)-Fe(1)-C(1)-Fe(3)	83.89(7)
C(2)-Fe(1)-C(1)-Fe(2)	-77.16(8)
Fe(3)-Fe(1)-C(1)-Fe(2)	-83.89(7)
C(1)-Fe(1)-C(2)-F(2)	-132.90(15)
Fe(3)-Fe(1)-C(2)-F(2)	-126.92(17)
Fe(2)-Fe(1)-C(2)-F(2)	179.42(15)
C(1)-Fe(1)-C(2)-C(3)	53.9(2)
Fe(3)-Fe(1)-C(2)-C(3)	59.84(18)
Fe(2)-Fe(1)-C(2)-C(3)	6.18(19)
C(1)-Fe(1)-C(2)-Fe(3)	-5.97(8)
Fe(2)-Fe(1)-C(2)-Fe(3)	-53.66(4)
C(1)-Fe(3)-C(2)-F(2)	122.11(18)
C(4)-Fe(3)-C(2)-F(2)	-139.49(19)
C(3)-Fe(3)-C(2)-F(2)	-109.1(2)
Fe(1)-Fe(3)-C(2)-F(2)	115.3(2)
Fe(2)-Fe(3)-C(2)-F(2)	172.12(17)
C(1)-Fe(3)-C(2)-C(3)	-128.80(13)
C(4)-Fe(3)-C(2)-C(3)	-30.39(12)
F(2)-C(2)-C(3)-C(4)	173.17(17)
Fe(1)-C(2)-C(3)-C(4)	-13.4(3)
Fe(3)-C(2)-C(3)-C(4)	46.94(16)
F(2)-C(2)-C(3)-C(5)	2.6(3)
Fe(1)-C(2)-C(3)-C(5)	176.04(17)
Fe(3)-C(2)-C(3)-C(5)	-123.7(2)
F(2)-C(2)-C(3)-Fe(3)	126.23(17)
Fe(1)-C(2)-C(3)-Fe(3)	-60.30(15)
C(1)-Fe(3)-C(3)-C(4)	-65.22(15)
C(2)-Fe(3)-C(3)-C(4)	-130.96(18)
Fe(1)-Fe(3)-C(3)-C(4)	-98.06(12)
Fe(2)-Fe(3)-C(3)-C(4)	-34.34(11)
C(1)-Fe(3)-C(3)-C(2)	65.75(15)
C(4)-Fe(3)-C(3)-C(2)	130.96(18)
Fe(1)-Fe(3)-C(3)-C(2)	32.90(11)
Fe(2)-Fe(3)-C(3)-C(2)	96.63(11)
C(1)-Fe(3)-C(3)-C(5)	-179.11(19)
C(4)-Fe(3)-C(3)-C(5)	-113.9(3)
C(2)-Fe(3)-C(3)-C(5)	115.1(3)
Fe(1)-Fe(3)-C(3)-C(5)	148.0(2)
Fe(2)-Fe(3)-C(3)-C(5)	-148.2(2)
C(2)-C(3)-C(4)-F(3)	-174.15(17)
C(5)-C(3)-C(4)-F(3)	-3.5(3)
Fe(3)-C(3)-C(4)-F(3)	-126.89(18)
C(2)-C(3)-C(4)-Fe(2)	15.4(3)
C(5)-C(3)-C(4)-Fe(2)	-173.90(17)
Fe(3)-C(3)-C(4)-Fe(2)	62.68(15)
C(2)-C(3)-C(4)-Fe(3)	-47.26(16)
C(5)-C(3)-C(4)-Fe(3)	123.4(2)
C(1)-Fe(2)-C(4)-F(3)	131.55(16)
Fe(3)-Fe(2)-C(4)-F(3)	127.73(19)
Fe(1)-Fe(2)-C(4)-F(3)	179.86(16)

C(1)-Fe(2)-C(4)-C(3)	-58.3(2)
Fe(3)-Fe(2)-C(4)-C(3)	-62.17(17)
Fe(1)-Fe(2)-C(4)-C(3)	-10.04(18)
C(1)-Fe(2)-C(4)-Fe(3)	3.82(8)
Fe(1)-Fe(2)-C(4)-Fe(3)	52.13(5)
C(1)-Fe(3)-C(4)-F(3)	-120.52(19)
C(2)-Fe(3)-C(4)-F(3)	140.7(2)
C(3)-Fe(3)-C(4)-F(3)	110.3(2)
Fe(1)-Fe(3)-C(4)-F(3)	-171.56(18)
Fe(2)-Fe(3)-C(4)-F(3)	-116.2(2)
C(1)-Fe(3)-C(4)-C(3)	129.17(13)
C(2)-Fe(3)-C(4)-C(3)	30.37(12)
Fe(1)-Fe(3)-C(4)-C(3)	78.13(11)
Fe(2)-Fe(3)-C(4)-C(3)	133.49(15)
C(1)-Fe(3)-C(4)-Fe(2)	-4.32(9)
C(2)-Fe(3)-C(4)-Fe(2)	-103.12(8)
C(3)-Fe(3)-C(4)-Fe(2)	-133.49(15)
Fe(1)-Fe(3)-C(4)-Fe(2)	-55.36(5)
C(4)-C(3)-C(5)-F(4)	-77.3(3)
C(2)-C(3)-C(5)-F(4)	92.1(3)
Fe(3)-C(3)-C(5)-F(4)	6.7(3)
