

17 Röntgenstrukturdaten

17.1 Röntgenstrukturdaten von 348

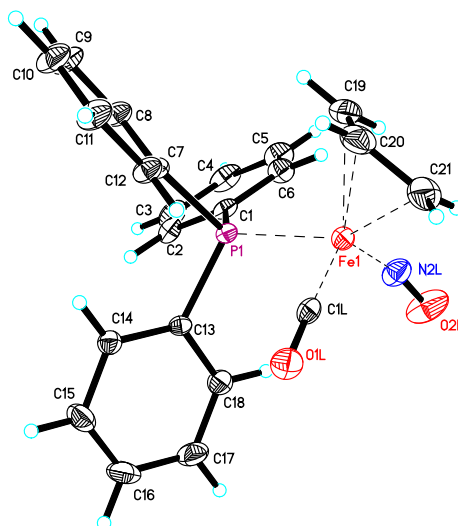


Abb. 17.1 Übersichtzeichnung der Kristallstruktur von 348

Tabelle 17.1 Kristalldaten und Strukturverfeinerung

Empirische Formel	C ₂₂ H ₂₀ Fe N O ₂ P	
Formelgewicht	417.21 g/mol	
Temperatur	100(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem	triklin, P-1	
Gitterkonstante	a = 9.3223(4) Å	α = 78.622(2)°
	b = 10.4251(4) Å	β = 85.153(2)°
	c = 10.5870(5) Å	γ = 79.305(2)°
Volumen	989.94(7) Å ³	
Z	2	
Dichte (errechnet)	1.400 Mg·m ⁻³	
Absorptionskoeffizient	0.859 mm ⁻¹	
F(000)	432	
Kristallgröße	0.42 x 0.22 x 0.20 mm ³	
Theta-Bereich für Datensammlung	1.96 bis 30.67°	
Bereich für Indizes	-13 ≤ h ≤ 13, -9 ≤ k ≤ 14, -14 ≤ l ≤ 15	
Gesammelte/unabhängige Reflexe	20757 / 6093 [R(int) = 0.0268]	
Vervollständigung für theta = 30.67	99.4 %	
Max. und min. Transmission	0.8470 und 0.7144	
Verfeinerungsmethode	Full-matrix least-squares on F ²	
Daten/Einschränkung/Parameter	6093 / 0 / 244	
Goodness-of-fit on F ²	1.040	
Abschließende R Indizes [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0389, wR2 = 0.0869	
R Indizes (alle Daten)	R1 = 0.0617, wR2 = 0.0927	
Restelektronendichte	0.560 und -0.525 eÅ ⁻³	

Tabelle 17.2 Lageparameter ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$), $U(\text{eq})$ ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors

	x	y	z	U(eq)
Fe(1)	2723(1)	3544(1)	3330(1)	17(1)
P(1)	3487(1)	2024(1)	2108(1)	13(1)
C(1L)	3004(2)	4786(2)	1990(2)	17(1)
O(1L)	3123(2)	5608(1)	1105(1)	26(1)
N(2L)	985(2)	3441(2)	3728(2)	26(1)
O(2L)	-297(2)	3475(2)	3805(2)	45(1)
C(1)	2755(2)	482(2)	2552(2)	16(1)
C(2)	2684(2)	-291(2)	1633(2)	20(1)
C(3)	2088(2)	-1450(2)	1981(2)	27(1)
C(4)	1583(2)	-1841(2)	3233(2)	29(1)
C(5)	1655(2)	-1083(2)	4153(2)	28(1)
C(6)	2236(2)	82(2)	3812(2)	22(1)
C(7)	5462(2)	1531(2)	1976(2)	16(1)
C(8)	6164(2)	214(2)	2187(2)	21(1)
C(9)	7679(2)	-85(2)	2143(2)	28(1)
C(10)	8505(2)	916(2)	1885(2)	30(1)
C(11)	7810(2)	2231(2)	1664(2)	27(1)
C(12)	6305(2)	2538(2)	1711(2)	20(1)
C(13)	2943(2)	2629(2)	452(2)	14(1)
C(14)	3918(2)	2772(2)	-609(2)	19(1)
C(15)	3406(2)	3348(2)	-1823(2)	27(1)
C(16)	1926(2)	3759(2)	-1978(2)	31(1)
C(17)	945(2)	3616(2)	-924(2)	30(1)
C(18)	1454(2)	3060(2)	282(2)	23(1)
C(19)	4142(2)	2368(2)	4805(2)	32(1)
C(20)	4452(2)	3630(2)	4420(2)	33(1)
C(21)	3330(3)	4725(2)	4526(2)	35(1)

Tabelle 17.3 Bindungslängen [\AA] und Bindungswinkel [$^\circ$]

Fe(1)-N(2L)	1.6571(17)	C(1)-C(2)	1.393(2)
Fe(1)-C(1L)	1.7598(17)	C(2)-C(3)	1.394(2)
Fe(1)-C(20)	2.084(2)	C(2)-H(2)	0.9500
Fe(1)-C(21)	2.1062(18)	C(3)-C(4)	1.378(3)
Fe(1)-C(19)	2.164(2)	C(3)-H(3)	0.9500
Fe(1)-P(1)	2.2183(5)	C(4)-C(5)	1.383(3)
P(1)-C(7)	1.8192(17)	C(4)-H(4)	0.9500
P(1)-C(1)	1.8234(15)	C(5)-C(6)	1.391(2)
P(1)-C(13)	1.8236(17)	C(5)-H(5)	0.9500
C(1L)-O(1L)	1.151(2)	C(6)-H(6)	0.9500
N(2L)-O(2L)	1.185(2)	C(7)-C(8)	1.390(2)
C(1)-C(6)	1.390(2)	C(7)-C(12)	1.396(2)

C(8)-C(9)	1.388(2)	C(7)-P(1)-Fe(1)	114.32(5)
C(8)-H(8)	0.9500	C(1)-P(1)-Fe(1)	116.53(6)
C(9)-C(10)	1.382(3)	C(13)-P(1)-Fe(1)	111.44(5)
C(9)-H(9)	0.9500	O(1L)-C(1L)-Fe(1)	176.98(16)
C(10)-C(11)	1.386(3)	O(2L)-N(2L)-Fe(1)	168.89(16)
C(10)-H(10)	0.9500	C(6)-C(1)-C(2)	119.37(15)
C(11)-C(12)	1.379(2)	C(6)-C(1)-P(1)	120.02(12)
C(11)-H(11)	0.9500	C(2)-C(1)-P(1)	120.59(13)
C(12)-H(12)	0.9500	C(1)-C(2)-C(3)	119.91(18)
C(13)-C(14)	1.386(2)	C(1)-C(2)-H(2)	120.0
C(13)-C(18)	1.392(2)	C(3)-C(2)-H(2)	120.0
C(14)-C(15)	1.391(3)	C(4)-C(3)-C(2)	120.24(18)
C(14)-H(14)	0.9500	C(4)-C(3)-H(3)	119.9
C(15)-C(16)	1.380(3)	C(2)-C(3)-H(3)	119.9
C(15)-H(15)	0.9500	C(3)-C(4)-C(5)	120.23(16)
C(16)-C(17)	1.384(3)	C(3)-C(4)-H(4)	119.9
C(16)-H(16)	0.9500	C(5)-C(4)-H(4)	119.9
C(17)-C(18)	1.378(3)	C(4)-C(5)-C(6)	119.91(18)
C(17)-H(17)	0.9500	C(4)-C(5)-H(5)	120.0
C(18)-H(18)	0.9500	C(6)-C(5)-H(5)	120.0
C(19)-C(20)	1.375(3)	C(1)-C(6)-C(5)	120.34(17)
C(19)-H(19A)	0.9500	C(1)-C(6)-H(6)	119.8
C(19)-H(19B)	0.9500	C(5)-C(6)-H(6)	119.8
C(20)-C(21)	1.413(3)	C(8)-C(7)-C(12)	118.98(16)
C(20)-H(20)	0.9500	C(8)-C(7)-P(1)	123.31(13)
C(21)-H(21A)	0.9500	C(12)-C(7)-P(1)	117.62(13)
C(21)-H(21B)	0.9500	C(9)-C(8)-C(7)	120.07(16)
		C(9)-C(8)-H(8)	120.0
N(2L)-Fe(1)-C(1L)	114.62(8)	C(7)-C(8)-H(8)	120.0
N(2L)-Fe(1)-C(20)	131.96(9)	C(10)-C(9)-C(8)	120.58(17)
C(1L)-Fe(1)-C(20)	99.47(8)	C(10)-C(9)-H(9)	119.7
N(2L)-Fe(1)-C(21)	106.18(9)	C(8)-C(9)-H(9)	119.7
C(1L)-Fe(1)-C(21)	88.71(8)	C(9)-C(10)-C(11)	119.52(18)
C(20)-Fe(1)-C(21)	39.39(8)	C(9)-C(10)-H(10)	120.2
N(2L)-Fe(1)-C(19)	111.46(8)	C(11)-C(10)-H(10)	120.2
C(1L)-Fe(1)-C(19)	132.65(8)	C(12)-C(11)-C(10)	120.30(17)
C(20)-Fe(1)-C(19)	37.71(8)	C(12)-C(11)-H(11)	119.9
C(21)-Fe(1)-C(19)	68.37(8)	C(10)-C(11)-H(11)	119.9
N(2L)-Fe(1)-P(1)	105.29(6)	C(11)-C(12)-C(7)	120.55(16)
C(1L)-Fe(1)-P(1)	89.11(5)	C(11)-C(12)-H(12)	119.7
C(20)-Fe(1)-P(1)	108.16(6)	C(7)-C(12)-H(12)	119.7
C(21)-Fe(1)-P(1)	146.25(7)	C(14)-C(13)-C(18)	119.20(16)
C(19)-Fe(1)-P(1)	88.98(5)	C(14)-C(13)-P(1)	124.10(13)
C(7)-P(1)-C(1)	105.79(7)	C(18)-C(13)-P(1)	116.51(13)
C(7)-P(1)-C(13)	104.93(8)	C(13)-C(14)-C(15)	120.00(17)
C(1)-P(1)-C(13)	102.58(7)	C(13)-C(14)-H(14)	120.0

C(15)-C(14)-H(14)	120.0	C(20)-C(19)-H(19B)	120.0
C(16)-C(15)-C(14)	120.12(18)	Fe(1)-C(19)-H(19B)	128.3
C(16)-C(15)-H(15)	119.9	H(19A)-C(19)-H(19B)	120.0
C(14)-C(15)-H(15)	119.9	C(19)-C(20)-C(21)	118.8(2)
C(15)-C(16)-C(17)	120.22(19)	C(19)-C(20)-Fe(1)	74.30(12)
C(15)-C(16)-H(16)	119.9	C(21)-C(20)-Fe(1)	71.14(12)
C(17)-C(16)-H(16)	119.9	C(19)-C(20)-H(20)	120.6
C(18)-C(17)-C(16)	119.64(18)	C(21)-C(20)-H(20)	120.6
C(18)-C(17)-H(17)	120.2	Fe(1)-C(20)-H(20)	125.7
C(16)-C(17)-H(17)	120.2	C(20)-C(21)-Fe(1)	69.47(11)
C(17)-C(18)-C(13)	120.81(18)	C(20)-C(21)-H(21A)	120.0
C(17)-C(18)-H(18)	119.6	Fe(1)-C(21)-H(21A)	76.0
C(13)-C(18)-H(18)	119.6	C(20)-C(21)-H(21B)	120.0
C(20)-C(19)-Fe(1)	67.99(11)	Fe(1)-C(21)-H(21B)	126.3
C(20)-C(19)-H(19A)	120.0	H(21A)-C(21)-H(21B)	120.0
Fe(1)-C(19)-H(19A)	75.8		

Tabelle 17.4 Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$). Der Exponent des anisotropen Temperaturfaktors ist definiert als: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Fe(1)	18(1)	15(1)	17(1)	-3(1)	-1(1)	-1(1)
P(1)	11(1)	12(1)	15(1)	0(1)	0(1)	-3(1)
C(1L)	17(1)	14(1)	22(1)	-6(1)	-1(1)	-2(1)
O(1L)	31(1)	17(1)	29(1)	1(1)	2(1)	-6(1)
N(2L)	23(1)	21(1)	30(1)	3(1)	4(1)	-1(1)
O(2L)	20(1)	39(1)	62(1)	15(1)	8(1)	-4(1)
C(1)	11(1)	12(1)	24(1)	1(1)	-1(1)	-2(1)
C(2)	16(1)	16(1)	28(1)	-4(1)	2(1)	-2(1)
C(3)	22(1)	15(1)	44(1)	-8(1)	-1(1)	-3(1)
C(4)	20(1)	14(1)	49(1)	2(1)	0(1)	-6(1)
C(5)	26(1)	23(1)	32(1)	7(1)	5(1)	-8(1)
C(6)	23(1)	19(1)	23(1)	2(1)	1(1)	-6(1)
C(7)	12(1)	19(1)	15(1)	-1(1)	-1(1)	-2(1)
C(8)	17(1)	18(1)	27(1)	1(1)	-1(1)	-3(1)
C(9)	16(1)	22(1)	40(1)	1(1)	-2(1)	3(1)
C(10)	14(1)	32(1)	40(1)	0(1)	-2(1)	-1(1)
C(11)	15(1)	28(1)	37(1)	1(1)	-2(1)	-7(1)
C(12)	14(1)	19(1)	26(1)	0(1)	-1(1)	-3(1)
C(13)	15(1)	12(1)	16(1)	-1(1)	-3(1)	-2(1)
C(14)	17(1)	20(1)	19(1)	-2(1)	0(1)	-3(1)
C(15)	33(1)	31(1)	17(1)	1(1)	1(1)	-7(1)
C(16)	38(1)	28(1)	22(1)	3(1)	-11(1)	-1(1)
C(17)	21(1)	33(1)	33(1)	-4(1)	-11(1)	4(1)
C(18)	17(1)	29(1)	22(1)	-3(1)	-1(1)	-2(1)
C(19)	34(1)	34(1)	26(1)	-6(1)	-13(1)	2(1)
C(20)	37(1)	37(1)	27(1)	-8(1)	-13(1)	-6(1)

C(21)	46(1)	29(1)	32(1)	-14(1)	-12(1)	-2(1)
-------	-------	-------	-------	--------	--------	-------

Tabelle 17.5 Lageparameter der Wasserstoffatome ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \times 10^3$)

	x	y	z	U(eq)
H(2)	3041	-29	771	24
H(3)	2031	-1972	1352	32
H(4)	1182	-2634	3466	34
H(5)	1310	-1357	5016	34
H(6)	2278	606	4443	27
H(8)	5605	-482	2362	25
H(9)	8152	-987	2292	33
H(10)	9542	706	1859	36
H(11)	8373	2923	1480	32
H(12)	5838	3441	1561	24
H(14)	4935	2478	-506	23
H(15)	4076	3459	-2547	33
H(16)	1580	4141	-2811	37
H(17)	-73	3900	-1031	36
H(18)	781	2970	1006	27
H(19A)	3188	2244	5136	38
H(19B)	4883	1620	4741	38
H(20)	5402	3764	4088	39
H(21A)	2383	4582	4859	42
H(21B)	3524	5604	4264	42

Tabelle 17.6 Torsionswinkel [$^\circ$]

N(2L)-Fe(1)-P(1)-C(7)	-160.52(8)	C(1L)-Fe(1)-N(2L)-O(2L)	21.4(8)
C(1L)-Fe(1)-P(1)-C(7)	84.16(8)	C(20)-Fe(1)-N(2L)-O(2L)	152.3(8)
C(20)-Fe(1)-P(1)-C(7)	-15.51(9)	C(21)-Fe(1)-N(2L)-O(2L)	117.5(8)
C(21)-Fe(1)-P(1)-C(7)	-2.18(13)	C(19)-Fe(1)-N(2L)-O(2L)	-169.8(8)
C(19)-Fe(1)-P(1)-C(7)	-48.53(8)	P(1)-Fe(1)-N(2L)-O(2L)	-74.8(8)
N(2L)-Fe(1)-P(1)-C(1)	-36.51(9)	C(7)-P(1)-C(1)-C(6)	104.47(15)
C(1L)-Fe(1)-P(1)-C(1)	-151.83(8)	C(13)-P(1)-C(1)-C(6)	-145.81(14)
C(20)-Fe(1)-P(1)-C(1)	108.49(9)	Fe(1)-P(1)-C(1)-C(6)	-23.81(16)
C(21)-Fe(1)-P(1)-C(1)	121.83(13)	C(7)-P(1)-C(1)-C(2)	-76.76(15)
C(19)-Fe(1)-P(1)-C(1)	75.48(9)	C(13)-P(1)-C(1)-C(2)	32.95(16)
N(2L)-Fe(1)-P(1)-C(13)	80.72(8)	Fe(1)-P(1)-C(1)-C(2)	154.96(12)
C(1L)-Fe(1)-P(1)-C(13)	-34.60(8)	C(6)-C(1)-C(2)-C(3)	0.4(3)
C(20)-Fe(1)-P(1)-C(13)	-134.27(9)	P(1)-C(1)-C(2)-C(3)	-178.42(13)
C(21)-Fe(1)-P(1)-C(13)	-120.94(13)	C(1)-C(2)-C(3)-C(4)	-0.6(3)
C(19)-Fe(1)-P(1)-C(13)	-167.28(8)	C(2)-C(3)-C(4)-C(5)	0.3(3)
N(2L)-Fe(1)-C(1L)-O(1L)	-8(3)	C(3)-C(4)-C(5)-C(6)	0.3(3)
C(20)-Fe(1)-C(1L)-O(1L)	-153(3)	C(2)-C(1)-C(6)-C(5)	0.2(3)
C(21)-Fe(1)-C(1L)-O(1L)	-115(3)	P(1)-C(1)-C(6)-C(5)	179.00(14)
C(19)-Fe(1)-C(1L)-O(1L)	-174(3)	C(4)-C(5)-C(6)-C(1)	-0.5(3)
P(1)-Fe(1)-C(1L)-O(1L)	98(3)	C(1)-P(1)-C(7)-C(8)	0.18(17)

C(13)-P(1)-C(7)-C(8)	-107.86(15)	C(15)-C(16)-C(17)-C(18)	-0.1(3)
Fe(1)-P(1)-C(7)-C(8)	129.76(14)	C(16)-C(17)-C(18)-C(13)	-0.6(3)
C(1)-P(1)-C(7)-C(12)	-176.58(14)	C(14)-C(13)-C(18)-C(17)	0.4(2)
C(13)-P(1)-C(7)-C(12)	75.38(15)	P(1)-C(13)-C(18)-C(17)	175.64(14)
Fe(1)-P(1)-C(7)-C(12)	-46.99(15)	N(2L)-Fe(1)-C(19)-C(20)	-131.77(14)
C(12)-C(7)-C(8)-C(9)	0.5(3)	C(1L)-Fe(1)-C(19)-C(20)	34.34(17)
P(1)-C(7)-C(8)-C(9)	-176.20(14)	C(21)-Fe(1)-C(19)-C(20)	-32.19(14)
C(7)-C(8)-C(9)-C(10)	-0.3(3)	P(1)-Fe(1)-C(19)-C(20)	122.18(13)
C(8)-C(9)-C(10)-C(11)	-0.2(3)	Fe(1)-C(19)-C(20)-C(21)	57.45(16)
C(9)-C(10)-C(11)-C(12)	0.5(3)	N(2L)-Fe(1)-C(20)-C(19)	68.99(16)
C(10)-C(11)-C(12)-C(7)	-0.2(3)	C(1L)-Fe(1)-C(20)-C(19)	-155.12(13)
C(8)-C(7)-C(12)-C(11)	-0.3(3)	C(21)-Fe(1)-C(20)-C(19)	128.7(2)
P(1)-C(7)-C(12)-C(11)	176.62(14)	P(1)-Fe(1)-C(20)-C(19)	-62.94(13)
C(7)-P(1)-C(13)-C(14)	-5.75(15)	N(2L)-Fe(1)-C(20)-C(21)	-59.71(17)
C(1)-P(1)-C(13)-C(14)	-116.12(14)	C(1L)-Fe(1)-C(20)-C(21)	76.17(14)
Fe(1)-P(1)-C(13)-C(14)	118.48(12)	C(19)-Fe(1)-C(20)-C(21)	-128.7(2)
C(7)-P(1)-C(13)-C(18)	179.30(12)	P(1)-Fe(1)-C(20)-C(21)	168.35(12)
C(1)-P(1)-C(13)-C(18)	68.93(14)	C(19)-C(20)-C(21)-Fe(1)	-59.04(16)
Fe(1)-P(1)-C(13)-C(18)	-56.47(13)	N(2L)-Fe(1)-C(21)-C(20)	138.04(13)
C(18)-C(13)-C(14)-C(15)	0.3(2)	C(1L)-Fe(1)-C(21)-C(20)	-106.66(14)
P(1)-C(13)-C(14)-C(15)	-174.48(13)	C(19)-Fe(1)-C(21)-C(20)	30.90(13)
C(13)-C(14)-C(15)-C(16)	-1.0(3)	P(1)-Fe(1)-C(21)-C(20)	-20.2(2)
C(14)-C(15)-C(16)-C(17)	0.8(3)		

17.2 Röntgenstrukturdaten von 349

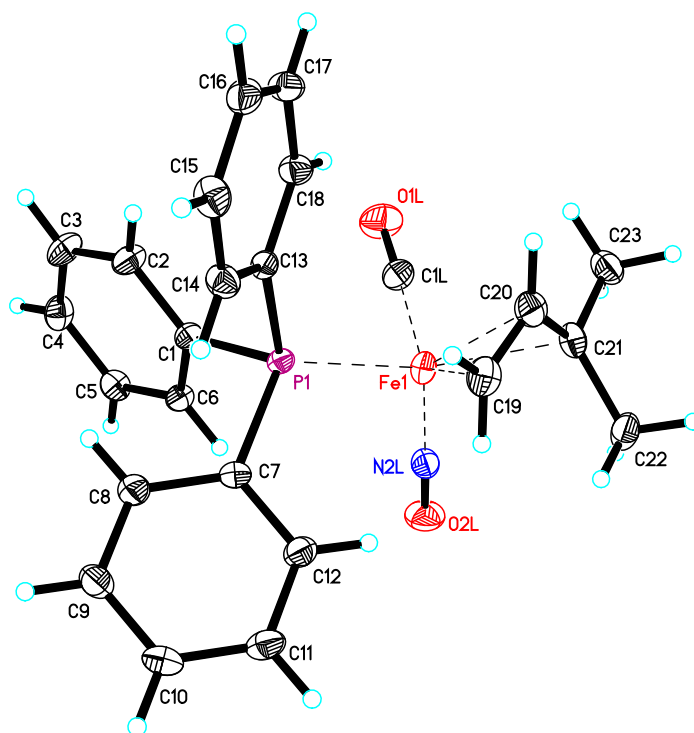


Abb. 17.2 Übersichtszeichnung der Kristallstruktur von 349

Tabelle 17.7 Kristalldaten und Strukturverfeinerung

Empirische Formel	C ₂₄ H ₂₄ Fe N O ₂ P
Formelgewicht	445.26 g/mol
Temperatur	100(2) K
Wellenlänge	0.71073 Å
Kristallsystem	triklin, P-1
Gitterkonstante	a = 7.8264(3) Å α = 80.937(2)° b = 9.5410(3) Å β = 85.676(2)° c = 15.9095(5) Å γ = 65.9400(10)°
Volumen	1071.15(6) Å ³
Z	2
Dichte (errechnet)	1.381 Mg·m ⁻³
Absorptionskoeffizient	0.798 mm ⁻¹
F(000)	464
Kristallgröße	0.25 x 0.21 x 0.10 mm ³
Theta-Bereich für Datensammlung	2.36 bis 28.47°
Bereich für Indizes	-10 ≤ h ≤ 10, -12 ≤ k ≤ 12, -21 ≤ l ≤ 21
Gesammelte/unabhängige Reflexe	37530 / 5406 [R(int) = 0.0247]
Vervollständigung für theta = 28.47	99.6 %
Max. und min. Transmission	0.9244 und 0.8254
Verfeinerungsmethode	Full-matrix least-squares on F ²
Daten/Einschränkung/Parameter	5406 / 0 / 264
Goodness-of-fit on F ²	1.054
Abschließende R Indizes [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0335, wR2 = 0.0825
R Indizes (alle Daten)	R1 = 0.0425, wR2 = 0.0858
Restelektronendichte	1.056 und -0.752 eÅ ⁻³

Tabelle 17.8 Lageparameter (*10⁴) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren (Å²*10³), U(eq) ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij}-Tensors

	x	y	z	U(eq)
Fe(1)	9985(1)	2585(1)	3120(1)	17(1)
C(1L)	9074(2)	3851(2)	2178(1)	21(1)
O(1L)	8540(2)	4746(2)	1576(1)	34(1)
N(2L)	11028(2)	3329(2)	3684(1)	20(1)
O(2L)	11610(2)	4129(2)	3959(1)	32(1)
P(1)	12233(1)	870(1)	2414(1)	14(1)
C(1)	13296(2)	1735(2)	1535(1)	16(1)
C(2)	13308(3)	1508(2)	691(1)	23(1)
C(3)	14176(3)	2188(2)	60(1)	26(1)
C(4)	15066(3)	3070(2)	269(1)	23(1)
C(5)	15063(2)	3305(2)	1111(1)	21(1)
C(6)	14167(2)	2658(2)	1735(1)	18(1)
C(7)	14306(2)	-444(2)	3027(1)	17(1)
C(8)	15995(2)	-1252(2)	2624(1)	21(1)
C(9)	17564(2)	-2229(2)	3095(1)	23(1)
C(10)	17470(2)	-2411(2)	3980(1)	23(1)
C(11)	15807(3)	-1616(2)	4386(1)	24(1)

C(12)	14231(2)	-628(2)	3914(1)	21(1)
C(13)	11481(2)	-375(2)	1912(1)	16(1)
C(14)	12385(2)	-1988(2)	2029(1)	21(1)
C(15)	11715(3)	-2872(2)	1644(1)	24(1)
C(16)	10149(3)	-2163(2)	1134(1)	23(1)
C(17)	9231(2)	-561(2)	1020(1)	22(1)
C(18)	9878(2)	326(2)	1411(1)	20(1)
C(19)	9479(3)	618(2)	3765(1)	25(1)
C(20)	7837(3)	1862(2)	3483(1)	24(1)
C(21)	7305(2)	3314(2)	3785(1)	21(1)
C(22)	7578(3)	3446(2)	4693(1)	26(1)
C(23)	5646(3)	4670(2)	3374(1)	27(1)

Tabelle 17.9 Bindungslängen [Å] und Bindungswinkel [°]

Fe(1)-N(2L)	1.6609(15)	C(11)-C(12)	1.394(2)
Fe(1)-C(1L)	1.7608(18)	C(11)-H(11)	0.9500
Fe(1)-C(20)	2.0751(17)	C(12)-H(12)	0.9500
Fe(1)-C(19)	2.1605(17)	C(13)-C(14)	1.394(2)
Fe(1)-C(21)	2.1698(17)	C(13)-C(18)	1.398(2)
Fe(1)-P(1)	2.2288(5)	C(14)-C(15)	1.390(2)
C(1L)-O(1L)	1.155(2)	C(14)-H(14)	0.9500
N(2L)-O(2L)	1.183(2)	C(15)-C(16)	1.386(3)
P(1)-C(13)	1.8273(16)	C(15)-H(15)	0.9500
P(1)-C(1)	1.8299(16)	C(16)-C(17)	1.386(3)
P(1)-C(7)	1.8303(16)	C(16)-H(16)	0.9500
C(1)-C(2)	1.392(2)	C(17)-C(18)	1.388(2)
C(1)-C(6)	1.397(2)	C(17)-H(17)	0.9500
C(2)-C(3)	1.393(2)	C(18)-H(18)	0.9500
C(2)-H(2)	0.9500	C(19)-C(20)	1.392(3)
C(3)-C(4)	1.380(3)	C(19)-H(19A)	0.9500
C(3)-H(3)	0.9500	C(19)-H(19B)	0.9500
C(4)-C(5)	1.392(3)	C(20)-C(21)	1.425(2)
C(4)-H(4)	0.9500	C(20)-H(20)	0.9500
C(5)-C(6)	1.383(2)	C(21)-C(22)	1.509(3)
C(5)-H(5)	0.9500	C(21)-C(23)	1.509(2)
C(6)-H(6)	0.9500	C(22)-H(22A)	0.9800
C(7)-C(12)	1.393(2)	C(22)-H(22B)	0.9800
C(7)-C(8)	1.397(2)	C(22)-H(22C)	0.9800
C(8)-C(9)	1.387(2)	C(23)-H(23A)	0.9800
C(8)-H(8)	0.9500	C(23)-H(23B)	0.9800
C(9)-C(10)	1.390(3)	C(23)-H(23C)	0.9800
C(9)-H(9)	0.9500		
C(10)-C(11)	1.382(3)		
C(10)-H(10)	0.9500		

N(2L)-Fe(1)-C(1L)	110.19(8)	C(7)-C(8)-H(8)	119.6
N(2L)-Fe(1)-C(20)	129.05(7)	C(8)-C(9)-C(10)	120.10(17)
C(1L)-Fe(1)-C(20)	100.98(8)	C(8)-C(9)-H(9)	120.0
N(2L)-Fe(1)-C(19)	116.28(7)	C(10)-C(9)-H(9)	120.0
C(1L)-Fe(1)-C(19)	131.96(8)	C(11)-C(10)-C(9)	119.70(16)
C(20)-Fe(1)-C(19)	38.30(7)	C(11)-C(10)-H(10)	120.2
N(2L)-Fe(1)-C(21)	98.09(7)	C(9)-C(10)-H(10)	120.2
C(1L)-Fe(1)-C(21)	94.01(7)	C(10)-C(11)-C(12)	120.31(16)
C(20)-Fe(1)-C(21)	39.15(7)	C(10)-C(11)-H(11)	119.8
C(19)-Fe(1)-C(21)	68.64(7)	C(12)-C(11)-H(11)	119.8
N(2L)-Fe(1)-P(1)	106.83(5)	C(7)-C(12)-C(11)	120.49(16)
C(1L)-Fe(1)-P(1)	92.51(6)	C(7)-C(12)-H(12)	119.8
C(20)-Fe(1)-P(1)	111.05(5)	C(11)-C(12)-H(12)	119.8
C(19)-Fe(1)-P(1)	85.53(5)	C(14)-C(13)-C(18)	118.63(15)
C(21)-Fe(1)-P(1)	150.20(5)	C(14)-C(13)-P(1)	123.26(12)
O(1L)-C(1L)-Fe(1)	175.02(16)	C(18)-C(13)-P(1)	118.07(12)
O(2L)-N(2L)-Fe(1)	165.96(14)	C(15)-C(14)-C(13)	120.43(16)
C(13)-P(1)-C(1)	103.54(7)	C(15)-C(14)-H(14)	119.8
C(13)-P(1)-C(7)	105.54(7)	C(13)-C(14)-H(14)	119.8
C(1)-P(1)-C(7)	100.95(7)	C(16)-C(15)-C(14)	120.51(16)
C(13)-P(1)-Fe(1)	114.75(5)	C(16)-C(15)-H(15)	119.7
C(1)-P(1)-Fe(1)	114.34(5)	C(14)-C(15)-H(15)	119.7
C(7)-P(1)-Fe(1)	116.05(5)	C(15)-C(16)-C(17)	119.46(16)
C(2)-C(1)-C(6)	118.68(15)	C(15)-C(16)-H(16)	120.3
C(2)-C(1)-P(1)	124.04(13)	C(17)-C(16)-H(16)	120.3
C(6)-C(1)-P(1)	117.27(12)	C(16)-C(17)-C(18)	120.30(16)
C(1)-C(2)-C(3)	120.47(16)	C(16)-C(17)-H(17)	119.9
C(1)-C(2)-H(2)	119.8	C(18)-C(17)-H(17)	119.9
C(3)-C(2)-H(2)	119.8	C(17)-C(18)-C(13)	120.66(16)
C(4)-C(3)-C(2)	120.27(16)	C(17)-C(18)-H(18)	119.7
C(4)-C(3)-H(3)	119.9	C(13)-C(18)-H(18)	119.7
C(2)-C(3)-H(3)	119.9	C(20)-C(19)-Fe(1)	67.53(10)
C(3)-C(4)-C(5)	119.77(16)	C(20)-C(19)-H(19A)	120.0
C(3)-C(4)-H(4)	120.1	Fe(1)-C(19)-H(19A)	78.1
C(5)-C(4)-H(4)	120.1	C(20)-C(19)-H(19B)	120.0
C(6)-C(5)-C(4)	120.00(16)	Fe(1)-C(19)-H(19B)	126.0
C(6)-C(5)-H(5)	120.0	H(19A)-C(19)-H(19B)	120.0
C(4)-C(5)-H(5)	120.0	C(19)-C(20)-C(21)	120.16(17)
C(5)-C(6)-C(1)	120.78(15)	C(19)-C(20)-Fe(1)	74.17(10)
C(5)-C(6)-H(6)	119.6	C(21)-C(20)-Fe(1)	74.02(10)
C(1)-C(6)-H(6)	119.6	C(19)-C(20)-H(20)	119.9
C(12)-C(7)-C(8)	118.67(15)	C(21)-C(20)-H(20)	119.9
C(12)-C(7)-P(1)	120.07(13)	Fe(1)-C(20)-H(20)	123.3
C(8)-C(7)-P(1)	121.25(12)	C(20)-C(21)-C(22)	122.83(16)
C(9)-C(8)-C(7)	120.73(16)	C(20)-C(21)-C(23)	117.54(16)
C(9)-C(8)-H(8)	119.6	C(22)-C(21)-C(23)	112.84(15)

C(20)-C(21)-Fe(1)	66.83(10)	H(22B)-C(22)-H(22C)	109.5
C(22)-C(21)-Fe(1)	109.43(12)	C(21)-C(23)-H(23A)	109.5
C(23)-C(21)-Fe(1)	119.25(12)	C(21)-C(23)-H(23B)	109.5
C(21)-C(22)-H(22A)	109.5	H(23A)-C(23)-H(23B)	109.5
C(21)-C(22)-H(22B)	109.5	C(21)-C(23)-H(23C)	109.5
H(22A)-C(22)-H(22B)	109.5	H(23A)-C(23)-H(23C)	109.5
C(21)-C(22)-H(22C)	109.5	H(23B)-C(23)-H(23C)	109.5
H(22A)-C(22)-H(22C)	109.5		

Tabelle 17.10 Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$). Der Exponent des anisotropen Temperaturfaktors ist definiert als: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Fe(1)	19(1)	15(1)	17(1)	-3(1)	4(1)	-7(1)
C(1L)	24(1)	20(1)	20(1)	-4(1)	0(1)	-9(1)
O(1L)	40(1)	31(1)	26(1)	8(1)	-9(1)	-14(1)
N(2L)	18(1)	21(1)	19(1)	-2(1)	1(1)	-6(1)
O(2L)	33(1)	41(1)	31(1)	-7(1)	-7(1)	-22(1)
P(1)	15(1)	15(1)	12(1)	-1(1)	-1(1)	-6(1)
C(1)	18(1)	17(1)	13(1)	-1(1)	0(1)	-7(1)
C(2)	29(1)	27(1)	16(1)	-4(1)	0(1)	-16(1)
C(3)	37(1)	30(1)	14(1)	-2(1)	2(1)	-16(1)
C(4)	25(1)	20(1)	21(1)	1(1)	4(1)	-9(1)
C(5)	20(1)	19(1)	24(1)	-2(1)	0(1)	-10(1)
C(6)	20(1)	19(1)	16(1)	-3(1)	-1(1)	-8(1)
C(7)	18(1)	16(1)	15(1)	-1(1)	-3(1)	-7(1)
C(8)	20(1)	24(1)	18(1)	-1(1)	-1(1)	-9(1)
C(9)	17(1)	25(1)	25(1)	-1(1)	-2(1)	-7(1)
C(10)	21(1)	22(1)	25(1)	2(1)	-9(1)	-8(1)
C(11)	29(1)	24(1)	17(1)	0(1)	-6(1)	-8(1)
C(12)	23(1)	22(1)	16(1)	-3(1)	-2(1)	-6(1)
C(13)	16(1)	18(1)	14(1)	-3(1)	1(1)	-7(1)
C(14)	18(1)	18(1)	23(1)	-3(1)	-1(1)	-6(1)
C(15)	23(1)	18(1)	30(1)	-6(1)	2(1)	-7(1)
C(16)	25(1)	27(1)	24(1)	-10(1)	3(1)	-15(1)
C(17)	21(1)	27(1)	20(1)	-3(1)	-4(1)	-11(1)
C(18)	20(1)	19(1)	19(1)	-2(1)	-3(1)	-7(1)
C(19)	28(1)	22(1)	25(1)	-2(1)	4(1)	-12(1)
C(20)	24(1)	26(1)	24(1)	-2(1)	2(1)	-15(1)
C(21)	18(1)	21(1)	25(1)	-3(1)	4(1)	-9(1)
C(22)	26(1)	28(1)	20(1)	-4(1)	6(1)	-9(1)
C(23)	18(1)	28(1)	34(1)	-9(1)	0(1)	-7(1)

Tabelle 17.11 Lageparameter der Wasserstoffatome ($\cdot 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$)

	x	y	z	U(eq)
H(2)	12720	885	544	27
H(3)	14156	2043	-515	31
H(4)	15678	3515	-161	28
H(5)	15676	3910	1257	25
H(6)	14143	2843	2306	22
H(8)	16071	-1130	2020	25
H(9)	18704	-2774	2814	28
H(10)	18544	-3079	4303	28
H(11)	15737	-1744	4990	29
H(12)	13098	-77	4198	25
H(14)	13467	-2485	2373	25
H(15)	12335	-3970	1733	29
H(16)	9707	-2771	864	28
H(17)	8154	-69	672	27
H(18)	9226	1422	1338	24
H(19A)	10248	735	4159	29
H(19B)	9831	-349	3563	29
H(20)	7069	1744	3089	28
H(22A)	6451	3516	5030	39
H(22B)	7807	4378	4708	39
H(22C)	8652	2530	4933	39
H(23A)	5549	4536	2783	40
H(23B)	5812	5631	3382	40
H(23C)	4501	4721	3689	40

Tabelle 17.12 Torsionswinkel [°]

N(2L)-Fe(1)-C(1L)-O(1L)	7(2)	N(2L)-Fe(1)-P(1)-C(1)	-72.00(8)
C(20)-Fe(1)-C(1L)-O(1L)	145.7(19)	C(1L)-Fe(1)-P(1)-C(1)	39.97(8)
C(19)-Fe(1)-C(1L)-O(1L)	171.5(19)	C(20)-Fe(1)-P(1)-C(1)	142.74(8)
C(21)-Fe(1)-C(1L)-O(1L)	107(2)	C(19)-Fe(1)-P(1)-C(1)	171.88(8)
P(1)-Fe(1)-C(1L)-O(1L)	-102(2)	C(21)-Fe(1)-P(1)-C(1)	142.51(11)
C(1L)-Fe(1)-N(2L)-O(2L)	8.2(6)	N(2L)-Fe(1)-P(1)-C(7)	44.95(8)
C(20)-Fe(1)-N(2L)-O(2L)	-115.9(6)	C(1L)-Fe(1)-P(1)-C(7)	156.92(8)
C(19)-Fe(1)-N(2L)-O(2L)	-159.3(6)	C(20)-Fe(1)-P(1)-C(7)	-100.30(8)
C(21)-Fe(1)-N(2L)-O(2L)	-89.2(6)	C(19)-Fe(1)-P(1)-C(7)	-71.17(8)
P(1)-Fe(1)-N(2L)-O(2L)	107.4(6)	C(21)-Fe(1)-P(1)-C(7)	-100.53(12)
N(2L)-Fe(1)-P(1)-C(13)	168.56(8)	C(13)-P(1)-C(1)-C(2)	4.56(16)
C(1L)-Fe(1)-P(1)-C(13)	-79.46(8)	C(7)-P(1)-C(1)-C(2)	113.66(15)
C(20)-Fe(1)-P(1)-C(13)	23.31(8)	Fe(1)-P(1)-C(1)-C(2)	-121.00(14)
C(19)-Fe(1)-P(1)-C(13)	52.44(8)	C(13)-P(1)-C(1)-C(6)	-174.46(13)
C(21)-Fe(1)-P(1)-C(13)	23.08(12)	C(7)-P(1)-C(1)-C(6)	-65.37(14)
Fe(1)-P(1)-C(1)-C(6)	59.98(14)	C(6)-C(1)-C(2)-C(3)	0.1(3)

P(1)-C(1)-C(2)-C(3)	-178.88(14)	C(14)-C(13)-C(18)-C(17)	-1.7(3)
C(1)-C(2)-C(3)-C(4)	1.2(3)	N(2L)-Fe(1)-C(19)-C(20)	120.56(12)
C(2)-C(3)-C(4)-C(5)	-1.2(3)	C(1L)-Fe(1)-C(19)-C(20)	-43.51(15)
C(3)-C(4)-C(5)-C(6)	-0.1(3)	C(21)-Fe(1)-C(19)-C(20)	31.97(11)
C(4)-C(5)-C(6)-C(1)	1.5(3)	P(1)-Fe(1)-C(19)-C(20)	-132.86(11)
C(2)-C(1)-C(6)-C(5)	-1.5(2)	Fe(1)-C(19)-C(20)-C(21)	-60.27(15)
P(1)-C(1)-C(6)-C(5)	177.58(13)	N(2L)-Fe(1)-C(20)-C(19)	-83.84(13)
C(13)-P(1)-C(7)-C(12)	-111.32(14)	C(1L)-Fe(1)-C(20)-C(19)	148.57(11)
C(1)-P(1)-C(7)-C(12)	141.15(14)	C(21)-Fe(1)-C(20)-C(19)	-128.65(16)
Fe(1)-P(1)-C(7)-C(12)	16.96(15)	P(1)-Fe(1)-C(20)-C(19)	51.54(11)
C(13)-P(1)-C(7)-C(8)	70.10(15)	N(2L)-Fe(1)-C(20)-C(21)	44.81(14)
C(1)-P(1)-C(7)-C(8)	-37.43(15)	C(1L)-Fe(1)-C(20)-C(21)	-82.79(12)
Fe(1)-P(1)-C(7)-C(8)	-161.62(12)	C(19)-Fe(1)-C(20)-C(21)	128.65(16)
C(12)-C(7)-C(8)-C(9)	0.5(3)	P(1)-Fe(1)-C(20)-C(21)	-179.82(9)
P(1)-C(7)-C(8)-C(9)	179.15(13)	C(19)-C(20)-C(21)-C(22)	-38.5(2)
C(7)-C(8)-C(9)-C(10)	-0.2(3)	Fe(1)-C(20)-C(21)-C(22)	-98.89(16)
C(8)-C(9)-C(10)-C(11)	0.1(3)	C(19)-C(20)-C(21)-C(23)	172.46(16)
C(9)-C(10)-C(11)-C(12)	-0.4(3)	Fe(1)-C(20)-C(21)-C(23)	112.11(15)
C(8)-C(7)-C(12)-C(11)	-0.8(3)	C(19)-C(20)-C(21)-Fe(1)	60.35(15)
P(1)-C(7)-C(12)-C(11)	-179.45(14)	N(2L)-Fe(1)-C(21)-C(20)	-146.44(11)
C(10)-C(11)-C(12)-C(7)	0.8(3)	C(1L)-Fe(1)-C(21)-C(20)	102.49(12)
C(1)-P(1)-C(13)-C(14)	106.69(15)	C(19)-Fe(1)-C(21)-C(20)	-31.32(11)
C(7)-P(1)-C(13)-C(14)	1.04(16)	P(1)-Fe(1)-C(21)-C(20)	0.34(17)
Fe(1)-P(1)-C(13)-C(14)	-128.01(13)	N(2L)-Fe(1)-C(21)-C(22)	-28.13(13)
C(1)-P(1)-C(13)-C(18)	-75.69(14)	C(1L)-Fe(1)-C(21)-C(22)	-139.19(13)
C(7)-P(1)-C(13)-C(18)	178.65(13)	C(20)-Fe(1)-C(21)-C(22)	118.31(17)
Fe(1)-P(1)-C(13)-C(18)	49.60(14)	C(19)-Fe(1)-C(21)-C(22)	86.99(13)
C(18)-C(13)-C(14)-C(15)	0.8(3)	P(1)-Fe(1)-C(21)-C(22)	118.65(12)
P(1)-C(13)-C(14)-C(15)	178.41(13)	N(2L)-Fe(1)-C(21)-C(23)	103.88(14)
C(13)-C(14)-C(15)-C(16)	0.6(3)	C(1L)-Fe(1)-C(21)-C(23)	-7.19(15)
C(14)-C(15)-C(16)-C(17)	-1.1(3)	C(20)-Fe(1)-C(21)-C(23)	-109.68(18)
C(15)-C(16)-C(17)-C(18)	0.2(3)	C(19)-Fe(1)-C(21)-C(23)	-141.00(15)
C(16)-C(17)-C(18)-C(13)	1.2(3)	P(1)-Fe(1)-C(21)-C(23)	-109.34(14)
P(1)-C(13)-C(18)-C(17)	-179.44(13)		

17.3 Röntgenstrukturdaten von 350

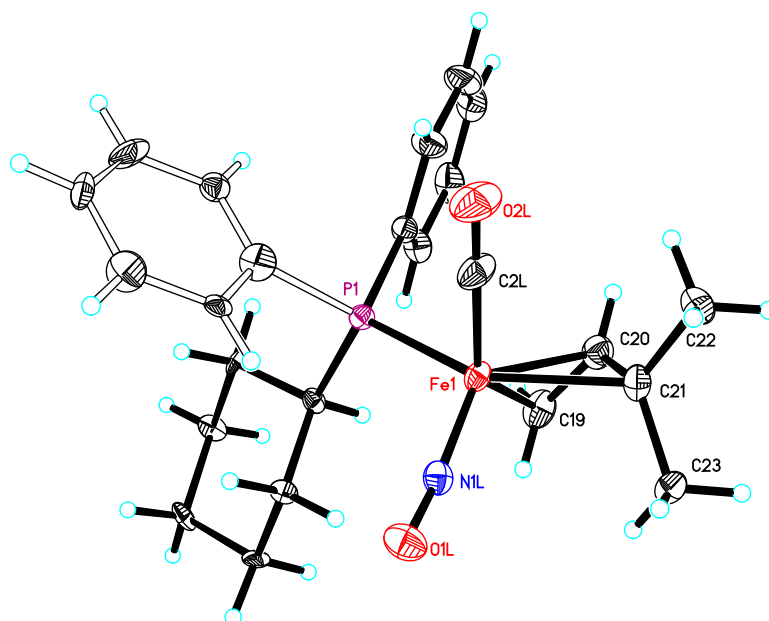


Abb. 17.3 Übersichtszeichnung der Kristallstruktur von 350

Tabelle 17.13 Kristalldaten und Strukturverfeinerung

Empirische Formel	C ₂₄ H ₃₀ Fe N O ₂ P
Formelgewicht	451.31 g/mol
Temperatur	100(2) K
Wellenlänge	0.71073 Å
Kristallsystem	monoklin, P2(1)/n
Gitterkonstante	a = 8.3934(5) Å α = 90° b = 16.6120(10) Å β = 90.214(3)° c = 15.9491(9) Å γ = 90°
Volumen	2223.8(2) Å ³
Z	4
Dichte (errechnet)	1.348 Mg·m ⁻³
Absorptionskoeffizient	0.770 mm ⁻¹
F(000)	952
Kristallgröße	0.40 x 0.38 x 0.24 mm ³
Theta-Bereich für Datensammlung	1.77 bis 30.73°
Bereich für Indizes	-12 ≤ h ≤ 12, -23 ≤ k ≤ 23, -22 ≤ l ≤ 22
Gesammelte/unabhängige Reflexe	47812 / 6866 [R(int) = 0.0186]
Vervollständigung für theta = 28.47	99.5 %
Max. und min. Transmission	0.8368 und 0.7482
Verfeinerungsmethode	Full-matrix least-squares on F ²
Daten/Einschränkung/Parameter	6866 / 50 / 372
Goodness-of-fit on F ²	1.071
Abschließende R Indizes [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0462, wR2 = 0.1034
R Indizes (alle Daten)	R1 = 0.0475, wR2 = 0.1039
Restelektronendichte	1.497 und -0.987 eÅ ⁻³

Tabelle 17.14 Lageparameter ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$), $U(\text{eq})$ ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors

	x	y	z	U(eq)
Fe(1)	6615(1)	1061(1)	6928(1)	15(1)
P(1)	5437(1)	1775(1)	7943(1)	13(1)
N(1L)	5243(2)	676(1)	6287(1)	18(1)
O(1L)	4301(2)	281(1)	5921(1)	27(1)
O(2L)	7660(3)	-183(1)	8088(1)	38(1)
C(2L)	7265(3)	331(1)	7647(1)	25(1)
C(1)	6871(2)	2337(1)	8573(1)	16(1)
C(2)	7068(2)	3169(1)	8510(1)	22(1)
C(3)	8214(3)	3565(1)	8987(2)	29(1)
C(4)	9189(3)	3139(2)	9522(2)	32(1)
C(5)	9029(3)	2315(2)	9581(2)	34(1)
C(6)	7888(3)	1913(1)	9108(1)	25(1)
C(7)	4381(15)	1181(7)	8733(6)	14(3)
C(8)	3868(12)	1569(7)	9546(7)	16(2)
C(9)	3230(13)	992(7)	10198(11)	16(2)
C(10)	1882(9)	474(7)	9826(7)	19(2)
C(11)	2340(20)	71(15)	8999(10)	23(2)
C(12)	3045(13)	659(8)	8370(11)	14(2)
C(13)	4064(11)	2582(5)	7559(6)	13(1)
C(14)	3110(18)	3000(6)	8282(10)	12(2)
C(15)	2152(14)	3719(7)	7908(8)	15(2)
C(16)	982(11)	3404(7)	7229(7)	16(1)
C(17)	1854(17)	2929(8)	6517(12)	14(2)
C(18)	2873(12)	2238(6)	6904(7)	13(1)
C(7A)	4279(18)	1198(9)	8712(8)	28(4)
C(8A)	4221(13)	1436(7)	9537(8)	18(2)
C(9A)	3204(16)	1020(8)	10052(12)	28(3)
C(10A)	2301(9)	398(7)	9783(7)	20(2)
C(11A)	2360(20)	197(15)	8958(10)	28(4)
C(12A)	3379(12)	577(8)	8419(10)	13(2)
C(13A)	3878(12)	2476(6)	7633(6)	17(2)
C(14A)	3303(19)	3063(7)	8162(10)	17(2)
C(15A)	2070(17)	3543(7)	7916(10)	26(3)
C(16A)	1351(12)	3456(9)	7158(8)	27(2)
C(17A)	1926(19)	2883(9)	6634(13)	24(4)
C(18A)	3175(13)	2390(7)	6856(8)	20(2)
C(19)	7467(3)	2207(1)	6506(1)	25(1)
C(20)	8697(2)	1674(1)	6686(1)	23(1)
C(21)	8843(2)	937(1)	6245(1)	21(1)
C(22)	10116(3)	356(2)	6552(2)	29(1)
C(23)	8499(3)	854(2)	5325(1)	26(1)

Tabelle 17.15 Bindungslängen [Å] und Bindungswinkel [°]

Fe(1)-N(1L)	1.6647(17)	C(14)-C(15)	1.557(14)
Fe(1)-C(2L)	1.755(2)	C(14)-H(14A)	0.9900
Fe(1)-C(20)	2.061(2)	C(14)-H(14B)	0.9900
Fe(1)-C(19)	2.144(2)	C(15)-C(16)	1.550(12)
Fe(1)-C(21)	2.1775(19)	C(15)-H(15A)	0.9900
Fe(1)-P(1)	2.2397(5)	C(15)-H(15B)	0.9900
P(1)-C(13A)	1.819(11)	C(16)-C(17)	1.567(13)
P(1)-C(1)	1.8225(18)	C(16)-H(16A)	0.9900
P(1)-C(7)	1.832(11)	C(16)-H(16B)	0.9900
P(1)-C(7A)	1.837(16)	C(17)-C(18)	1.558(16)
P(1)-C(13)	1.869(9)	C(17)-H(17A)	0.9900
N(1L)-O(1L)	1.181(2)	C(17)-H(17B)	0.9900
O(2L)-C(2L)	1.154(3)	C(18)-H(18A)	0.9900
C(1)-C(2)	1.395(3)	C(18)-H(18B)	0.9900
C(1)-C(6)	1.395(3)	C(7A)-C(12A)	1.360(14)
C(2)-C(3)	1.389(3)	C(7A)-C(8A)	1.376(7)
C(2)-H(2)	0.9500	C(8A)-C(9A)	1.373(14)
C(3)-C(4)	1.376(4)	C(8A)-H(8A1)	0.9500
C(3)-H(3)	0.9500	C(9A)-C(10A)	1.350(13)
C(4)-C(5)	1.379(4)	C(9A)-H(9A1)	0.9500
C(4)-H(4)	0.9500	C(10A)-C(11A)	1.358(14)
C(5)-C(6)	1.389(3)	C(10A)-H(10C)	0.9500
C(5)-H(5)	0.9500	C(11A)-C(12A)	1.369(15)
C(6)-H(6)	0.9500	C(11A)-H(11C)	0.9500
C(7)-C(8)	1.512(8)	C(12A)-H(12C)	0.9500
C(7)-C(12)	1.528(13)	C(13A)-C(14A)	1.378(7)
C(7)-H(7)	10.000	C(13A)-C(18A)	1.378(12)
C(8)-C(9)	1.513(15)	C(14A)-C(15A)	1.364(14)
C(8)-H(8A)	0.9900	C(14A)-H(14C)	0.9500
C(8)-H(8B)	0.9900	C(15A)-C(16A)	1.357(13)
C(9)-C(10)	1.540(12)	C(15A)-H(15C)	0.9500
C(9)-H(9A)	0.9900	C(16A)-C(17A)	1.356(14)
C(9)-H(9B)	0.9900	C(16A)-H(16C)	0.9500
C(10)-C(11)	1.529(15)	C(17A)-C(18A)	1.376(14)
C(10)-H(10A)	0.9900	C(17A)-H(17C)	0.9500
C(10)-H(10B)	0.9900	C(18A)-H(18C)	0.9500
C(11)-C(12)	1.523(18)	C(19)-C(20)	1.389(3)
C(11)-H(11A)	0.9900	C(19)-H(19A)	0.9500
C(11)-H(11B)	0.9900	C(19)-H(19B)	0.9500
C(12)-H(12A)	0.9900	C(20)-C(21)	1.418(3)
C(12)-H(12B)	0.9900	C(20)-H(20)	0.9500
C(13)-C(18)	1.552(11)	C(21)-C(23)	1.502(3)
C(13)-C(14)	1.568(10)	C(21)-C(22)	1.520(3)
C(13)-H(13)	10.000	C(22)-H(22A)	0.9800
C(22)-H(22B)	0.9800	C(23)-H(23A)	0.9800
C(22)-H(22C)	0.9800	C(23)-H(23B)	0.9800

C(23)-H(23C)	0.9800	C(4)-C(5)-H(5)	119.7
		C(6)-C(5)-H(5)	119.7
N(1L)-Fe(1)-C(2L)	110.40(10)	C(5)-C(6)-C(1)	120.5(2)
N(1L)-Fe(1)-C(20)	131.30(8)	C(5)-C(6)-H(6)	119.7
C(2L)-Fe(1)-C(20)	101.69(10)	C(1)-C(6)-H(6)	119.7
N(1L)-Fe(1)-C(19)	112.26(9)	C(8)-C(7)-C(12)	110.8(11)
C(2L)-Fe(1)-C(19)	135.74(10)	C(8)-C(7)-P(1)	120.0(8)
C(20)-Fe(1)-C(19)	38.52(8)	C(12)-C(7)-P(1)	113.7(9)
N(1L)-Fe(1)-C(21)	104.48(8)	C(8)-C(7)-H(7)	103.3
C(2L)-Fe(1)-C(21)	89.78(9)	C(12)-C(7)-H(7)	103.3
C(20)-Fe(1)-C(21)	38.96(8)	P(1)-C(7)-H(7)	103.3
C(19)-Fe(1)-C(21)	68.80(8)	C(7)-C(8)-C(9)	115.0(10)
N(1L)-Fe(1)-P(1)	109.92(6)	C(7)-C(8)-H(8A)	108.5
C(2L)-Fe(1)-P(1)	91.76(7)	C(9)-C(8)-H(8A)	108.5
C(20)-Fe(1)-P(1)	104.51(6)	C(7)-C(8)-H(8B)	108.5
C(19)-Fe(1)-P(1)	84.58(6)	C(9)-C(8)-H(8B)	108.5
C(21)-Fe(1)-P(1)	142.55(6)	H(8A)-C(8)-H(8B)	107.5
C(13A)-P(1)-C(1)	107.1(3)	C(8)-C(9)-C(10)	110.5(12)
C(13A)-P(1)-C(7)	100.5(5)	C(8)-C(9)-H(9A)	109.6
C(1)-P(1)-C(7)	102.6(3)	C(10)-C(9)-H(9A)	109.6
C(13A)-P(1)-C(7A)	97.7(5)	C(8)-C(9)-H(9B)	109.6
C(1)-P(1)-C(7A)	104.4(4)	C(10)-C(9)-H(9B)	109.6
C(7)-P(1)-C(7A)	3.0(9)	H(9A)-C(9)-H(9B)	108.1
C(13A)-P(1)-C(13)	8.0(5)	C(11)-C(10)-C(9)	113.0(11)
C(1)-P(1)-C(13)	102.6(3)	C(11)-C(10)-H(10A)	109.0
C(7)-P(1)-C(13)	108.2(5)	C(9)-C(10)-H(10A)	109.0
C(7A)-P(1)-C(13)	105.4(5)	C(11)-C(10)-H(10B)	109.0
C(13A)-P(1)-Fe(1)	117.5(3)	C(9)-C(10)-H(10B)	109.0
C(1)-P(1)-Fe(1)	112.19(6)	H(10A)-C(10)-H(10B)	107.8
C(7)-P(1)-Fe(1)	115.3(3)	C(12)-C(11)-C(10)	112.7(17)
C(7A)-P(1)-Fe(1)	116.2(4)	C(12)-C(11)-H(11A)	109.0
C(13)-P(1)-Fe(1)	114.6(3)	C(10)-C(11)-H(11A)	109.0
O(1L)-N(1L)-Fe(1)	167.94(16)	C(12)-C(11)-H(11B)	109.0
O(2L)-C(2L)-Fe(1)	176.0(2)	C(10)-C(11)-H(11B)	109.0
C(2)-C(1)-C(6)	118.18(18)	H(11A)-C(11)-H(11B)	107.8
C(2)-C(1)-P(1)	123.06(15)	C(11)-C(12)-C(7)	113.6(13)
C(6)-C(1)-P(1)	118.64(15)	C(11)-C(12)-H(12A)	108.8
C(3)-C(2)-C(1)	120.7(2)	C(7)-C(12)-H(12A)	108.8
C(3)-C(2)-H(2)	119.6	C(11)-C(12)-H(12B)	108.8
C(1)-C(2)-H(2)	119.6	C(7)-C(12)-H(12B)	108.8
C(4)-C(3)-C(2)	120.4(2)	H(12A)-C(12)-H(12B)	107.7
C(4)-C(3)-H(3)	119.8	C(18)-C(13)-C(14)	109.2(10)
C(2)-C(3)-H(3)	119.8	C(18)-C(13)-P(1)	110.5(6)
C(3)-C(4)-C(5)	119.7(2)	C(14)-C(13)-P(1)	113.1(8)
C(3)-C(4)-H(4)	120.2	C(18)-C(13)-H(13)	107.9
C(5)-C(4)-H(4)	120.2	C(14)-C(13)-H(13)	107.9
C(4)-C(5)-C(6)	120.5(2)	P(1)-C(13)-H(13)	107.9

C(15)-C(14)-C(13)	108.8(11)	C(11A)-C(12A)-H(12C)	120.6
C(15)-C(14)-H(14A)	109.9	C(14A)-C(13A)-C(18A)	118.3(13)
C(13)-C(14)-H(14A)	109.9	C(14A)-C(13A)-P(1)	122.7(10)
C(15)-C(14)-H(14B)	109.9	C(18A)-C(13A)-P(1)	118.9(9)
C(13)-C(14)-H(14B)	109.9	C(15A)-C(14A)-C(13A)	120.3(16)
H(14A)-C(14)-H(14B)	108.3	C(15A)-C(14A)-H(14C)	119.9
C(16)-C(15)-C(14)	109.5(10)	C(13A)-C(14A)-H(14C)	119.9
C(16)-C(15)-H(15A)	109.8	C(16A)-C(15A)-C(14A)	121.9(15)
C(14)-C(15)-H(15A)	109.8	C(16A)-C(15A)-H(15C)	119.0
C(16)-C(15)-H(15B)	109.8	C(14A)-C(15A)-H(15C)	119.0
C(14)-C(15)-H(15B)	109.8	C(17A)-C(16A)-C(15A)	117.7(15)
H(15A)-C(15)-H(15B)	108.2	C(17A)-C(16A)-H(16C)	121.1
C(15)-C(16)-C(17)	112.3(10)	C(15A)-C(16A)-H(16C)	121.1
C(15)-C(16)-H(16A)	109.1	C(16A)-C(17A)-C(18A)	122.2(17)
C(17)-C(16)-H(16A)	109.1	C(16A)-C(17A)-H(17C)	118.9
C(15)-C(16)-H(16B)	109.1	C(18A)-C(17A)-H(17C)	118.9
C(17)-C(16)-H(16B)	109.1	C(17A)-C(18A)-C(13A)	119.5(14)
H(16A)-C(16)-H(16B)	107.9	C(17A)-C(18A)-H(18C)	120.2
C(18)-C(17)-C(16)	109.9(13)	C(13A)-C(18A)-H(18C)	120.2
C(18)-C(17)-H(17A)	109.7	C(20)-C(19)-Fe(1)	67.51(12)
C(16)-C(17)-H(17A)	109.7	C(20)-C(19)-H(19A)	120.0
C(18)-C(17)-H(17B)	109.7	Fe(1)-C(19)-H(19A)	78.6
C(16)-C(17)-H(17B)	109.7	C(20)-C(19)-H(19B)	120.0
H(17A)-C(17)-H(17B)	108.2	Fe(1)-C(19)-H(19B)	125.5
C(13)-C(18)-C(17)	110.3(9)	H(19A)-C(19)-H(19B)	120.0
C(13)-C(18)-H(18A)	109.6	C(19)-C(20)-C(21)	120.9(2)
C(17)-C(18)-H(18A)	109.6	C(19)-C(20)-Fe(1)	73.97(12)
C(13)-C(18)-H(18B)	109.6	C(21)-C(20)-Fe(1)	74.98(12)
C(17)-C(18)-H(18B)	109.6	C(19)-C(20)-H(20)	119.6
H(18A)-C(18)-H(18B)	108.1	C(21)-C(20)-H(20)	119.6
C(12A)-C(7A)-C(8A)	121.7(15)	Fe(1)-C(20)-H(20)	122.9
C(12A)-C(7A)-P(1)	117.4(10)	C(20)-C(21)-C(23)	123.20(19)
C(8A)-C(7A)-P(1)	120.6(11)	C(20)-C(21)-C(22)	116.83(19)
C(9A)-C(8A)-C(7A)	116.8(15)	C(23)-C(21)-C(22)	112.88(18)
C(9A)-C(8A)-H(8A1)	121.6	C(20)-C(21)-Fe(1)	66.06(11)
C(7A)-C(8A)-H(8A1)	121.6	C(23)-C(21)-Fe(1)	109.60(14)
C(10A)-C(9A)-C(8A)	123.0(15)	C(22)-C(21)-Fe(1)	120.20(15)
C(10A)-C(9A)-H(9A1)	118.5	C(21)-C(22)-H(22A)	109.5
C(8A)-C(9A)-H(9A1)	118.5	C(21)-C(22)-H(22B)	109.5
C(9A)-C(10A)-C(11A)	118.3(15)	H(22A)-C(22)-H(22B)	109.5
C(9A)-C(10A)-H(10C)	120.9	C(21)-C(22)-H(22C)	109.5
C(11A)-C(10A)-H(10C)	120.9	H(22A)-C(22)-H(22C)	109.5
C(10A)-C(11A)-C(12A)	121.3(18)	H(22B)-C(22)-H(22C)	109.5
C(10A)-C(11A)-H(11C)	119.3	C(21)-C(23)-H(23A)	109.5
C(12A)-C(11A)-H(11C)	119.3	C(21)-C(23)-H(23B)	109.5
C(7A)-C(12A)-C(11A)	118.7(16)	H(23A)-C(23)-H(23B)	109.5
C(7A)-C(12A)-H(12C)	120.6	C(21)-C(23)-H(23C)	109.5

H(23A)-C(23)-H(23C) 109.5 H(23B)-C(23)-H(23C) 109.5

Tabelle 17.16 Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$). Der Exponent des anisotropen Temperaturfaktors ist definiert als: $-2\pi^2 [h^2 a^2 U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Fe(1)	18(1)	13(1)	14(1)	0(1)	4(1)	2(1)
P(1)	14(1)	13(1)	13(1)	-2(1)	0(1)	0(1)
N(1L)	17(1)	15(1)	21(1)	0(1)	2(1)	2(1)
O(1L)	26(1)	24(1)	31(1)	0(1)	-7(1)	-4(1)
O(2L)	54(1)	31(1)	28(1)	11(1)	1(1)	11(1)
C(2L)	35(1)	21(1)	17(1)	-1(1)	5(1)	6(1)
C(1)	15(1)	18(1)	16(1)	-3(1)	0(1)	-3(1)
C(2)	19(1)	18(1)	27(1)	-5(1)	2(1)	-3(1)
C(3)	23(1)	26(1)	38(1)	-14(1)	5(1)	-9(1)
C(4)	22(1)	47(1)	28(1)	-14(1)	0(1)	-14(1)
C(5)	22(1)	51(2)	28(1)	4(1)	-10(1)	-9(1)
C(6)	22(1)	27(1)	26(1)	5(1)	-7(1)	-5(1)
C(7)	14(3)	17(4)	12(3)	-10(2)	10(2)	-12(2)
C(8)	22(5)	15(4)	13(2)	-4(2)	1(3)	-2(3)
C(9)	22(3)	17(3)	9(5)	-1(2)	5(2)	-7(2)
C(10)	19(4)	17(3)	23(2)	-2(2)	9(3)	1(3)
C(11)	22(4)	21(6)	25(4)	-4(3)	12(3)	-11(3)
C(12)	10(4)	14(3)	17(3)	1(2)	-5(3)	2(3)
C(13)	11(3)	12(3)	16(3)	-3(2)	0(2)	3(2)
C(14)	14(3)	14(3)	8(4)	-1(2)	7(2)	1(2)
C(15)	16(2)	7(4)	21(2)	-4(2)	-3(2)	7(2)
C(16)	7(4)	16(3)	25(3)	-4(2)	-2(2)	3(2)
C(17)	15(3)	16(3)	10(4)	1(3)	-5(2)	8(2)
C(18)	15(3)	8(3)	15(2)	-2(2)	-3(2)	-2(2)
C(7A)	28(4)	28(4)	28(4)	0(1)	1(1)	0(1)
C(8A)	18(4)	18(4)	19(2)	0(2)	-1(2)	2(2)
C(9A)	40(4)	35(5)	9(6)	-3(3)	2(3)	5(3)
C(10A)	17(4)	20(3)	23(3)	7(2)	10(3)	4(3)
C(11A)	31(5)	24(7)	29(5)	-5(3)	-2(4)	-12(3)
C(12A)	11(4)	14(3)	13(3)	0(2)	-3(3)	6(3)
C(13A)	17(2)	17(2)	17(2)	0(1)	1(1)	0(1)
C(14A)	17(4)	19(3)	13(5)	3(2)	7(2)	-4(2)
C(15A)	31(4)	12(5)	37(4)	-6(3)	11(3)	4(3)
C(16A)	14(5)	24(3)	43(4)	9(2)	1(3)	4(3)
C(17A)	25(4)	31(5)	17(6)	10(3)	-7(3)	-5(3)
C(18A)	25(5)	14(4)	21(3)	0(2)	0(3)	-1(3)
C(19)	31(1)	19(1)	27(1)	2(1)	7(1)	-2(1)
C(20)	22(1)	24(1)	23(1)	0(1)	2(1)	-4(1)
C(21)	17(1)	22(1)	23(1)	-3(1)	5(1)	-1(1)
C(22)	19(1)	37(1)	29(1)	-2(1)	-2(1)	6(1)
C(23)	25(1)	38(1)	16(1)	2(1)	3(1)	6(1)

Tabelle 17.17 Lageparameter der Wasserstoffatome ($\cdot 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$)

	x	y	z	U(eq)
H(2)	6411	3468	8137	26
H(3)	8325	4132	8943	35
H(4)	9968	3412	9849	39
H(5)	9706	2020	9948	41
H(6)	7799	1344	9148	30
H(7)	5195	777	8916	17
H(8A)	3033	1973	9419	20
H(8B)	4791	1859	9788	20
H(9A)	2822	1300	10684	19
H(9B)	4102	639	10399	19
H(10A)	1586	53	10236	23
H(10B)	935	818	9731	23
H(11A)	3126	-360	9115	27
H(11B)	1382	-183	8750	27
H(12A)	2186	1015	8159	16
H(12B)	3466	352	7887	16
H(13)	4723	3003	7275	16
H(14A)	2373	2610	8543	14
H(14B)	3855	3197	8719	14
H(15A)	1551	3993	8358	18
H(15B)	2894	4113	7656	18
H(16A)	403	3865	6980	19
H(16B)	187	3047	7496	19
H(17A)	1060	2701	6124	17
H(17B)	2551	3300	6200	17
H(18A)	2165	1841	7177	15
H(18B)	3467	1959	6455	15
H(8A1)	4854	1868	9742	22
H(9A1)	3133	1176	10623	33
H(10C)	1642	108	10160	24
H(11C)	1680	-215	8751	34
H(12C)	3456	410	7850	15
H(14C)	3768	3133	8701	20
H(15C)	1703	3951	8285	32
H(16C)	474	3785	6999	32
H(17C)	1451	2821	6096	29
H(18C)	3550	1993	6476	24
H(19A)	6710	2080	6082	30
H(19B)	7384	2699	6806	30
H(20)	9450	1806	7110	27
H(22A)	11115	461	6255	43
H(22B)	9772	-198	6442	43
H(22C)	10281	430	7156	43
H(23A)	7728	1266	5153	40
H(23B)	8056	319	5212	40

H(23C) 9488 923 5008 40

Tabelle 17.18 Torsionswinkel [°]

N(1L)-Fe(1)-P(1)-C(13A)	-46.5(3)	C(7)-P(1)-C(1)-C(2)	-129.7(4)
C(2L)-Fe(1)-P(1)-C(13A)	-159.0(3)	C(7A)-P(1)-C(1)-C(2)	-127.3(5)
C(20)-Fe(1)-P(1)-C(13A)	98.5(3)	C(13)-P(1)-C(1)-C(2)	-17.6(3)
C(19)-Fe(1)-P(1)-C(13A)	65.2(3)	Fe(1)-P(1)-C(1)-C(2)	105.96(16)
C(21)-Fe(1)-P(1)-C(13A)	109.1(3)	C(13A)-P(1)-C(1)-C(6)	159.6(3)
N(1L)-Fe(1)-P(1)-C(1)	-171.35(9)	C(7)-P(1)-C(1)-C(6)	54.3(4)
C(2L)-Fe(1)-P(1)-C(1)	76.18(10)	C(7A)-P(1)-C(1)-C(6)	56.7(5)
C(20)-Fe(1)-P(1)-C(1)	-26.37(9)	C(13)-P(1)-C(1)-C(6)	166.5(3)
C(19)-Fe(1)-P(1)-C(1)	-59.61(9)	Fe(1)-P(1)-C(1)-C(6)	-70.00(17)
C(21)-Fe(1)-P(1)-C(1)	-15.76(12)	C(6)-C(1)-C(2)-C(3)	-2.0(3)
N(1L)-Fe(1)-P(1)-C(7)	71.8(5)	P(1)-C(1)-C(2)-C(3)	-177.94(16)
C(2L)-Fe(1)-P(1)-C(7)	-40.7(5)	C(1)-C(2)-C(3)-C(4)	0.8(3)
C(20)-Fe(1)-P(1)-C(7)	-143.3(5)	C(2)-C(3)-C(4)-C(5)	0.3(3)
C(19)-Fe(1)-P(1)-C(7)	-176.5(5)	C(3)-C(4)-C(5)-C(6)	-0.3(4)
C(21)-Fe(1)-P(1)-C(7)	-132.7(5)	C(4)-C(5)-C(6)-C(1)	-0.8(4)
N(1L)-Fe(1)-P(1)-C(7A)	68.6(5)	C(2)-C(1)-C(6)-C(5)	1.9(3)
C(2L)-Fe(1)-P(1)-C(7A)	-43.9(5)	P(1)-C(1)-C(6)-C(5)	178.10(18)
C(20)-Fe(1)-P(1)-C(7A)	-146.4(5)	C(13A)-P(1)-C(7)-C(8)	-66.6(10)
C(19)-Fe(1)-P(1)-C(7A)	-179.7(5)	C(1)-P(1)-C(7)-C(8)	43.8(10)
C(21)-Fe(1)-P(1)-C(7A)	-135.8(5)	C(7A)-P(1)-C(7)-C(8)	-85(13)
N(1L)-Fe(1)-P(1)-C(13)	-54.9(3)	C(13)-P(1)-C(7)-C(8)	-64.2(10)
C(2L)-Fe(1)-P(1)-C(13)	-167.3(3)	Fe(1)-P(1)-C(7)-C(8)	166.0(7)
C(20)-Fe(1)-P(1)-C(13)	90.1(3)	C(13A)-P(1)-C(7)-C(12)	67.9(9)
C(19)-Fe(1)-P(1)-C(13)	56.9(3)	C(1)-P(1)-C(7)-C(12)	178.3(7)
C(21)-Fe(1)-P(1)-C(13)	100.7(3)	C(7A)-P(1)-C(7)-C(12)	49(12)
C(2L)-Fe(1)-N(1L)-O(1L)	3.3(8)	C(13)-P(1)-C(7)-C(12)	70.3(8)
C(20)-Fe(1)-N(1L)-O(1L)	131.3(7)	Fe(1)-P(1)-C(7)-C(12)	-59.5(9)
C(19)-Fe(1)-N(1L)-O(1L)	171.3(7)	C(12)-C(7)-C(8)-C(9)	53.1(11)
C(21)-Fe(1)-N(1L)-O(1L)	98.6(7)	P(1)-C(7)-C(8)-C(9)	-171.3(10)
P(1)-Fe(1)-N(1L)-O(1L)	-96.4(7)	C(7)-C(8)-C(9)-C(10)	-53.5(10)
N(1L)-Fe(1)-C(2L)-O(2L)	21(3)	C(8)-C(9)-C(10)-C(11)	51.0(14)
C(20)-Fe(1)-C(2L)-O(2L)	-122(3)	C(9)-C(10)-C(11)-C(12)	-50.3(16)
C(19)-Fe(1)-C(2L)-O(2L)	-143(3)	C(10)-C(11)-C(12)-C(7)	50.0(16)
C(21)-Fe(1)-C(2L)-O(2L)	-84(3)	C(8)-C(7)-C(12)-C(11)	-50.4(14)
P(1)-Fe(1)-C(2L)-O(2L)	133(3)	P(1)-C(7)-C(12)-C(11)	171.0(10)
C(13A)-P(1)-C(1)-C(2)	-24.4(3)	C(13A)-P(1)-C(13)-C(18)	-62(4)
C(1)-P(1)-C(13)-C(18)	172.3(6)	P(1)-C(13A)-C(14A)-C(15A)	-176.2(7)
C(7)-P(1)-C(13)-C(18)	-79.8(7)	C(13A)-C(14A)-C(15A)-C(16A)	1.1(10)
C(7A)-P(1)-C(13)-C(18)	-78.7(7)	C(14A)-C(15A)-C(16A)-C(17A)	-1.7(16)
Fe(1)-P(1)-C(13)-C(18)	50.4(7)	C(15A)-C(16A)-C(17A)-C(18A)	1(2)
C(13A)-P(1)-C(13)-C(14)	60(4)	C(16A)-C(17A)-C(18A)-C(13A)	0(2)
C(1)-P(1)-C(13)-C(14)	-64.9(7)	C(14A)-C(13A)-C(18A)-C(17A)	-0.4(14)
C(7)-P(1)-C(13)-C(14)	43.0(8)	P(1)-C(13A)-C(18A)-C(17A)	175.9(10)

C(7A)-P(1)-C(13)-C(14)	44.1(8)	N(1L)-Fe(1)-C(19)-C(20)	-129.11(13)
Fe(1)-P(1)-C(13)-C(14)	173.2(6)	C(2L)-Fe(1)-C(19)-C(20)	34.59(19)
C(18)-C(13)-C(14)-C(15)	-62.6(9)	C(21)-Fe(1)-C(19)-C(20)	-31.59(12)
P(1)-C(13)-C(14)-C(15)	173.9(7)	P(1)-Fe(1)-C(19)-C(20)	121.55(12)
C(13)-C(14)-C(15)-C(16)	60.0(9)	Fe(1)-C(19)-C(20)-C(21)	60.92(17)
C(14)-C(15)-C(16)-C(17)	-56.8(13)	N(1L)-Fe(1)-C(20)-C(19)	72.90(16)
C(15)-C(16)-C(17)-C(18)	54.7(13)	C(2L)-Fe(1)-C(20)-C(19)	-156.13(13)
C(14)-C(13)-C(18)-C(17)	60.9(11)	C(21)-Fe(1)-C(20)-C(19)	129.05(19)
P(1)-C(13)-C(18)-C(17)	-174.0(8)	P(1)-Fe(1)-C(20)-C(19)	-61.20(13)
C(16)-C(17)-C(18)-C(13)	-56.3(12)	N(1L)-Fe(1)-C(20)-C(21)	-56.15(16)
C(13A)-P(1)-C(7A)-C(12A)	85.6(10)	C(2L)-Fe(1)-C(20)-C(21)	74.82(14)
C(1)-P(1)-C(7A)-C(12A)	-164.4(9)	C(19)-Fe(1)-C(20)-C(21)	-129.05(19)
C(7)-P(1)-C(7A)-C(12A)	-113(13)	P(1)-Fe(1)-C(20)-C(21)	169.75(11)
C(13)-P(1)-C(7A)-C(12A)	87.9(10)	C(19)-C(20)-C(21)-C(23)	38.1(3)
Fe(1)-P(1)-C(7A)-C(12A)	-40.3(11)	Fe(1)-C(20)-C(21)-C(23)	98.51(19)
C(13A)-P(1)-C(7A)-C(8A)	-88.7(10)	C(19)-C(20)-C(21)-C(22)	-173.52(19)
C(1)-P(1)-C(7A)-C(8A)	21.3(10)	Fe(1)-C(20)-C(21)-C(22)	-113.09(18)
C(7)-P(1)-C(7A)-C(8A)	73(12)	C(19)-C(20)-C(21)-Fe(1)	-60.42(18)
C(13)-P(1)-C(7A)-C(8A)	-86.4(10)	N(1L)-Fe(1)-C(21)-C(20)	139.88(13)
Fe(1)-P(1)-C(7A)-C(8A)	145.5(8)	C(2L)-Fe(1)-C(21)-C(20)	-109.07(14)
C(12A)-C(7A)-C(8A)-C(9A)	-0.3(10)	C(19)-Fe(1)-C(21)-C(20)	31.25(13)
P(1)-C(7A)-C(8A)-C(9A)	173.7(11)	P(1)-Fe(1)-C(21)-C(20)	-16.46(17)
C(7A)-C(8A)-C(9A)-C(10A)	0.7(11)	N(1L)-Fe(1)-C(21)-C(23)	21.33(16)
C(8A)-C(9A)-C(10A)-C(11A)	-2.6(19)	C(2L)-Fe(1)-C(21)-C(23)	132.38(16)
C(9A)-C(10A)-C(11A)-C(12A)	4(2)	C(20)-Fe(1)-C(21)-C(23)	-118.5(2)
C(8A)-C(7A)-C(12A)-C(11A)	1.8(19)	C(19)-Fe(1)-C(21)-C(23)	-87.30(16)
P(1)-C(7A)-C(12A)-C(11A)	-172.4(12)	P(1)-Fe(1)-C(21)-C(23)	-135.01(13)
C(10A)-C(11A)-C(12A)-C(7A)	-4(2)	N(1L)-Fe(1)-C(21)-C(22)	-111.88(17)
C(1)-P(1)-C(13A)-C(14A)	-38.7(7)	C(2L)-Fe(1)-C(21)-C(22)	-0.83(18)
C(7)-P(1)-C(13A)-C(14A)	68.0(7)	C(20)-Fe(1)-C(21)-C(22)	108.2(2)
C(7A)-P(1)-C(13A)-C(14A)	69.0(8)	C(19)-Fe(1)-C(21)-C(22)	139.49(19)
C(13)-P(1)-C(13A)-C(14A)	-95(4)	P(1)-Fe(1)-C(21)-C(22)	91.78(18)
Fe(1)-P(1)-C(13A)-C(14A)	-166.1(6)		
C(1)-P(1)-C(13A)-C(18A)	145.1(6)		
C(7)-P(1)-C(13A)-C(18A)	-108.1(7)		
C(7A)-P(1)-C(13A)-C(18A)	-107.1(8)		
C(13)-P(1)-C(13A)-C(18A)	89(4)		
Fe(1)-P(1)-C(13A)-C(18A)	17.8(8)		
C(18A)-C(13A)-C(14A)-C(15A)	-0.1(8)		

17.4 Röntgenstrukturdaten von 351

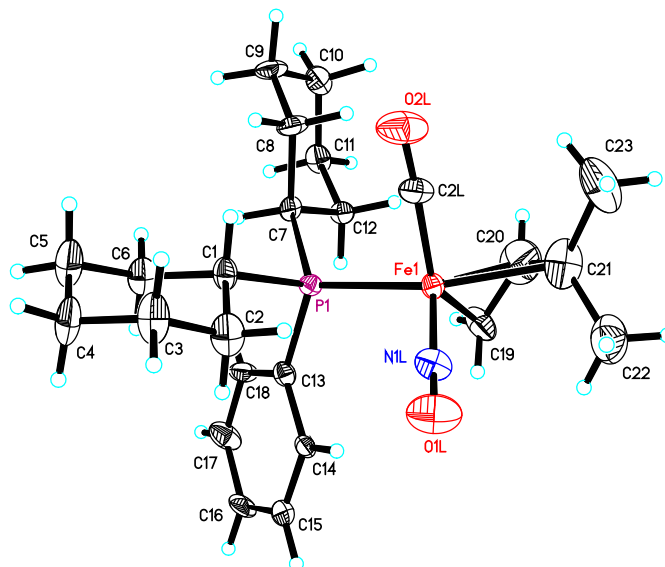


Abb. 17.4 Übersichtszzeichnung der Kristallstruktur von 351

Tabelle 17.19 Kristalldaten und Strukturverfeinerung

Empirische Formel	C ₂₄ H ₃₆ Fe N O ₂ P	
Formelgewicht	457.36 g/mol	
Temperatur	100(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem	triklin, P-1	
Gitterkonstante	a = 8.6418(16) Å	α = 110.412(9)°
	b = 10.5067(17) Å	β = 91.358(9)°
	c = 14.868(4) Å	γ = 112.347(6)°
Volumen	1151.0(4) Å ³	
Z	2	
Dichte (errechnet)	1.320 Mg*m ⁻³	
Absorptionskoeffizient	0.744 mm ⁻¹	
F(000)	488	
Kristallgröße	0.07 x 0.04 x 0.03 mm ³	
Theta-Bereich für Datensammlung	1.49 bis 25.03°	
Bereich für Indizes	-10 ≤ h ≤ 9, -12 ≤ k ≤ 9, -14 ≤ l ≤ 17	
Gesammelte/unabhängige Reflexe	10811 / 4022 [R(int) = 0.1034]	
Vervollständigung für theta = 25.03	99.0 %	
Max. und min. Transmission	0.7452 und 0.6444	
Verfeinerungsmethode	Full-matrix least-squares on F ²	
Daten/Einschränkung/Parameter	4022 / 0 / 264	
Goodness-of-fit on F ²	1.033	
Abschließende R Indizes [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0686, wR2 = 0.1195	
R Indizes (alle Daten)	R1 = 0.1522, wR2 = 0.1361	
Restelektronendichte	0.787 und -0.495 eÅ ⁻³	

Tabelle 17.20 Lageparameter ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$), $U(\text{eq})$ ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors

	x	y	z	U(eq)
Fe(1)	111(1)	4612(1)	2945(1)	16(1)
P(1)	2366(2)	5774(1)	2363(1)	14(1)
N(1L)	103(6)	5912(5)	3984(4)	28(1)
O(1L)	172(6)	6714(5)	4788(3)	51(1)
C(2L)	1063(8)	3538(6)	3174(4)	28(2)
O(2L)	1759(6)	2917(5)	3415(3)	46(1)
C(1)	4383(6)	6664(6)	3249(4)	22(1)
C(2)	4277(8)	7624(7)	4242(4)	35(2)
C(3)	5910(7)	8219(7)	4977(4)	37(2)
C(4)	7443(7)	9073(7)	4626(5)	38(2)
C(5)	7571(8)	8183(7)	3651(5)	42(2)
C(6)	5955(7)	7529(6)	2906(4)	28(2)
C(7)	2868(7)	4640(5)	1240(4)	17(1)
C(8)	3316(7)	3433(6)	1383(4)	24(2)
C(9)	3853(7)	2599(6)	471(4)	26(2)
C(10)	2520(7)	1947(6)	-438(4)	27(2)
C(11)	2033(7)	3128(6)	-560(4)	24(1)
C(12)	1466(6)	3915(5)	347(4)	17(1)
C(13)	2322(6)	7337(5)	2094(4)	17(1)
C(14)	1685(6)	8264(5)	2713(4)	15(1)
C(15)	1724(6)	9519(5)	2582(4)	21(1)
C(16)	2368(7)	9843(6)	1800(4)	25(2)
C(17)	2967(7)	8899(6)	1168(4)	29(2)
C(18)	2977(7)	7687(6)	1319(4)	22(1)
C(19)	-1596(7)	4364(6)	1764(5)	34(2)
C(20)	-1981(9)	3065(8)	1893(5)	54(2)
C(21)	-2393(8)	2910(8)	2806(5)	43(2)
C(22)	-3413(9)	3648(7)	3416(6)	56(2)
C(23)	-2599(9)	1499(7)	2888(5)	62(2)

Tabelle 17.21 Bindungslängen [\AA] und Bindungswinkel [$^\circ$]

Fe(1)-N(1L)	1.670(5)	C(1)-C(2)	1.498(7)
Fe(1)-C(2L)	1.739(6)	C(1)-C(6)	1.533(7)
Fe(1)-C(20)	2.053(7)	C(1)-H(1)	10.000
Fe(1)-C(19)	2.143(6)	C(2)-C(3)	1.536(8)
Fe(1)-C(21)	2.168(7)	C(2)-H(2A)	0.9900
Fe(1)-P(1)	2.2467(15)	C(2)-H(2B)	0.9900
P(1)-C(13)	1.833(5)	C(3)-C(4)	1.512(7)
P(1)-C(7)	1.853(5)	C(3)-H(3A)	0.9900
P(1)-C(1)	1.855(6)	C(3)-H(3B)	0.9900
N(1L)-O(1L)	1.182(5)	C(4)-C(5)	1.460(8)
C(2L)-O(2L)	1.170(6)	C(4)-H(4A)	0.9900

C(4)-H(4B)	0.9900	C(23)-H(23C)	0.9800
C(5)-C(6)	1.522(8)		
C(5)-H(5A)	0.9900	N(1L)-Fe(1)-C(2L)	110.9(3)
C(5)-H(5B)	0.9900	N(1L)-Fe(1)-C(20)	125.7(3)
C(6)-H(6A)	0.9900	C(2L)-Fe(1)-C(20)	103.5(3)
C(6)-H(6B)	0.9900	N(1L)-Fe(1)-C(19)	110.7(2)
C(7)-C(12)	1.526(7)	C(2L)-Fe(1)-C(19)	136.0(3)
C(7)-C(8)	1.537(7)	C(20)-Fe(1)-C(19)	37.8(2)
C(7)-H(7)	10.000	N(1L)-Fe(1)-C(21)	97.7(2)
C(8)-C(9)	1.526(7)	C(2L)-Fe(1)-C(21)	90.8(3)
C(8)-H(8A)	0.9900	C(20)-Fe(1)-C(21)	40.3(2)
C(8)-H(8B)	0.9900	C(19)-Fe(1)-C(21)	69.9(2)
C(9)-C(10)	1.517(8)	N(1L)-Fe(1)-P(1)	105.60(16)
C(9)-H(9A)	0.9900	C(2L)-Fe(1)-P(1)	91.47(18)
C(9)-H(9B)	0.9900	C(20)-Fe(1)-P(1)	114.3(2)
C(10)-C(11)	1.517(7)	C(19)-Fe(1)-P(1)	90.88(16)
C(10)-H(10A)	0.9900	C(21)-Fe(1)-P(1)	154.00(17)
C(10)-H(10B)	0.9900	C(13)-P(1)-C(7)	103.7(2)
C(11)-C(12)	1.519(7)	C(13)-P(1)-C(1)	102.6(2)
C(11)-H(11A)	0.9900	C(7)-P(1)-C(1)	103.0(2)
C(11)-H(11B)	0.9900	C(13)-P(1)-Fe(1)	115.33(17)
C(12)-H(12A)	0.9900	C(7)-P(1)-Fe(1)	117.98(16)
C(12)-H(12B)	0.9900	C(1)-P(1)-Fe(1)	112.44(17)
C(13)-C(14)	1.380(6)	O(1L)-N(1L)-Fe(1)	169.8(4)
C(13)-C(18)	1.397(7)	O(2L)-C(2L)-Fe(1)	173.7(6)
C(14)-C(15)	1.388(6)	C(2)-C(1)-C(6)	110.1(4)
C(14)-H(14)	0.9500	C(2)-C(1)-P(1)	113.1(4)
C(15)-C(16)	1.392(7)	C(6)-C(1)-P(1)	114.7(4)
C(15)-H(15)	0.9500	C(2)-C(1)-H(1)	106.1
C(16)-C(17)	1.377(7)	C(6)-C(1)-H(1)	106.1
C(16)-H(16)	0.9500	P(1)-C(1)-H(1)	106.1
C(17)-C(18)	1.372(7)	C(1)-C(2)-C(3)	111.5(5)
C(17)-H(17)	0.9500	C(1)-C(2)-H(2A)	109.3
C(18)-H(18)	0.9500	C(3)-C(2)-H(2A)	109.3
C(19)-C(20)	1.360(8)	C(1)-C(2)-H(2B)	109.3
C(19)-H(19A)	0.9500	C(3)-C(2)-H(2B)	109.3
C(19)-H(19B)	0.9500	H(2A)-C(2)-H(2B)	108.0
C(20)-C(21)	1.458(9)	C(4)-C(3)-C(2)	110.6(5)
C(20)-H(20)	0.9500	C(4)-C(3)-H(3A)	109.5
C(21)-C(23)	1.474(8)	C(2)-C(3)-H(3A)	109.5
C(21)-C(22)	1.505(9)	C(4)-C(3)-H(3B)	109.5
C(22)-H(22A)	0.9800	C(2)-C(3)-H(3B)	109.5
C(22)-H(22B)	0.9800	H(3A)-C(3)-H(3B)	108.1
C(22)-H(22C)	0.9800	C(5)-C(4)-C(3)	112.1(5)
C(23)-H(23A)	0.9800	C(5)-C(4)-H(4A)	109.2
C(23)-H(23B)	0.9800	C(3)-C(4)-H(4A)	109.2

C(5)-C(4)-H(4B)	109.2	C(11)-C(12)-H(12A)	109.5
C(3)-C(4)-H(4B)	109.2	C(7)-C(12)-H(12A)	109.5
H(4A)-C(4)-H(4B)	107.9	C(11)-C(12)-H(12B)	109.5
C(4)-C(5)-C(6)	113.1(5)	C(7)-C(12)-H(12B)	109.5
C(4)-C(5)-H(5A)	109.0	H(12A)-C(12)-H(12B)	108.1
C(6)-C(5)-H(5A)	109.0	C(14)-C(13)-C(18)	117.9(5)
C(4)-C(5)-H(5B)	109.0	C(14)-C(13)-P(1)	118.7(4)
C(6)-C(5)-H(5B)	109.0	C(18)-C(13)-P(1)	123.4(4)
H(5A)-C(5)-H(5B)	107.8	C(13)-C(14)-C(15)	121.1(5)
C(5)-C(6)-C(1)	112.0(5)	C(13)-C(14)-H(14)	119.4
C(5)-C(6)-H(6A)	109.2	C(15)-C(14)-H(14)	119.4
C(1)-C(6)-H(6A)	109.2	C(14)-C(15)-C(16)	120.2(5)
C(5)-C(6)-H(6B)	109.2	C(14)-C(15)-H(15)	119.9
C(1)-C(6)-H(6B)	109.2	C(16)-C(15)-H(15)	119.9
H(6A)-C(6)-H(6B)	107.9	C(17)-C(16)-C(15)	118.8(5)
C(12)-C(7)-C(8)	109.2(4)	C(17)-C(16)-H(16)	120.6
C(12)-C(7)-P(1)	113.9(3)	C(15)-C(16)-H(16)	120.6
C(8)-C(7)-P(1)	112.2(4)	C(18)-C(17)-C(16)	120.8(5)
C(12)-C(7)-H(7)	107.1	C(18)-C(17)-H(17)	119.6
C(8)-C(7)-H(7)	107.1	C(16)-C(17)-H(17)	119.6
P(1)-C(7)-H(7)	107.1	C(17)-C(18)-C(13)	121.2(5)
C(9)-C(8)-C(7)	110.8(4)	C(17)-C(18)-H(18)	119.4
C(9)-C(8)-H(8A)	109.5	C(13)-C(18)-H(18)	119.4
C(7)-C(8)-H(8A)	109.5	C(20)-C(19)-Fe(1)	67.5(4)
C(9)-C(8)-H(8B)	109.5	C(20)-C(19)-H(19A)	120.0
C(7)-C(8)-H(8B)	109.5	Fe(1)-C(19)-H(19A)	77.4
H(8A)-C(8)-H(8B)	108.1	C(20)-C(19)-H(19B)	120.0
C(10)-C(9)-C(8)	112.2(5)	Fe(1)-C(19)-H(19B)	126.8
C(10)-C(9)-H(9A)	109.2	H(19A)-C(19)-H(19B)	120.0
C(8)-C(9)-H(9A)	109.2	C(19)-C(20)-C(21)	122.4(7)
C(10)-C(9)-H(9B)	109.2	C(19)-C(20)-Fe(1)	74.7(4)
C(8)-C(9)-H(9B)	109.2	C(21)-C(20)-Fe(1)	74.1(4)
H(9A)-C(9)-H(9B)	107.9	C(19)-C(20)-H(20)	118.8
C(11)-C(10)-C(9)	111.3(4)	C(21)-C(20)-H(20)	118.8
C(11)-C(10)-H(10A)	109.4	Fe(1)-C(20)-H(20)	124.0
C(9)-C(10)-H(10A)	109.4	C(20)-C(21)-C(23)	116.9(6)
C(11)-C(10)-H(10B)	109.4	C(20)-C(21)-C(22)	122.8(6)
C(9)-C(10)-H(10B)	109.4	C(23)-C(21)-C(22)	113.5(6)
H(10A)-C(10)-H(10B)	108.0	C(20)-C(21)-Fe(1)	65.6(4)
C(10)-C(11)-C(12)	111.1(4)	C(23)-C(21)-Fe(1)	120.9(5)
C(10)-C(11)-H(11A)	109.4	C(22)-C(21)-Fe(1)	108.5(5)
C(12)-C(11)-H(11A)	109.4	C(21)-C(22)-H(22A)	109.5
C(10)-C(11)-H(11B)	109.4	C(21)-C(22)-H(22B)	109.5
C(12)-C(11)-H(11B)	109.4	H(22A)-C(22)-H(22B)	109.5
H(11A)-C(11)-H(11B)	108.0	C(21)-C(22)-H(22C)	109.5
C(11)-C(12)-C(7)	110.8(4)	H(22A)-C(22)-H(22C)	109.5

H(22B)-C(22)-H(22C)	109.5	C(21)-C(23)-H(23C)	109.5
C(21)-C(23)-H(23A)	109.5	H(23A)-C(23)-H(23C)	109.5
C(21)-C(23)-H(23B)	109.5	H(23B)-C(23)-H(23C)	109.5
H(23A)-C(23)-H(23B)	109.5		

Tabelle 17.22 Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$). Der Exponent des anisotropen Temperaturfaktors ist definiert als: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Fe(1)	17(1)	17(1)	15(1)	7(1)	4(1)	6(1)
P(1)	16(1)	14(1)	13(1)	5(1)	4(1)	7(1)
N(1L)	38(3)	26(3)	20(3)	10(3)	4(3)	14(2)
O(1L)	76(4)	46(3)	20(3)	-5(2)	8(3)	31(3)
C(2L)	43(4)	27(3)	31(4)	20(3)	28(3)	22(3)
O(2L)	76(4)	48(3)	42(3)	30(3)	28(3)	42(3)
C(1)	17(3)	24(3)	16(3)	5(3)	0(3)	3(3)
C(2)	32(4)	41(4)	24(4)	9(3)	6(3)	8(3)
C(3)	26(4)	52(4)	22(4)	16(3)	1(3)	3(3)
C(4)	16(4)	51(4)	32(4)	11(3)	1(3)	3(3)
C(5)	21(4)	52(4)	39(5)	13(4)	6(3)	4(3)
C(6)	25(4)	36(4)	16(4)	7(3)	7(3)	8(3)
C(7)	18(3)	22(3)	18(3)	14(3)	13(3)	9(3)
C(8)	31(4)	27(3)	31(4)	17(3)	14(3)	22(3)
C(9)	37(4)	26(3)	31(4)	16(3)	21(3)	25(3)
C(10)	30(4)	22(3)	25(4)	6(3)	14(3)	8(3)
C(11)	25(4)	23(3)	16(3)	2(3)	4(3)	6(3)
C(12)	18(3)	17(3)	13(3)	2(2)	-2(3)	7(3)
C(13)	17(3)	15(3)	13(3)	4(3)	0(3)	4(3)
C(14)	14(3)	11(3)	18(3)	6(2)	0(3)	3(2)
C(15)	17(3)	18(3)	22(3)	5(3)	1(3)	5(3)
C(16)	28(4)	12(3)	37(4)	13(3)	2(3)	7(3)
C(17)	43(4)	19(3)	23(4)	10(3)	12(3)	9(3)
C(18)	29(4)	16(3)	23(4)	5(3)	8(3)	12(3)
C(19)	34(4)	22(3)	39(4)	16(3)	-2(3)	3(3)
C(20)	43(5)	53(5)	44(5)	2(4)	-8(4)	13(4)
C(21)	41(4)	67(5)	23(4)	28(4)	4(3)	16(4)
C(22)	41(5)	62(5)	77(6)	46(5)	13(4)	16(4)
C(23)	63(6)	41(4)	51(5)	13(4)	3(4)	-6(4)

Tabelle 17.23 Lageparameter der Wasserstoffatome ($\cdot 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$)

	x	y	z	U(eq)
H(1)	4584	5831	3330	26
H(2A)	3296	7036	4472	42
H(2B)	4084	8475	4202	42
H(3A)	5821	8883	5618	44
H(3B)	6051	7374	5063	44

H(4A)	7364	9985	4620	46
H(4B)	8486	9384	5087	46
H(5A)	7834	7359	3682	50
H(5B)	8527	8817	3430	50
H(6A)	6075	6852	2281	34
H(6B)	5796	8346	2788	34
H(7)	3900	5330	1091	21
H(8A)	4255	3902	1947	29
H(8B)	2317	2718	1524	29
H(9A)	4935	3292	380	31
H(9B)	4055	1783	564	31
H(10A)	2970	1509	-1017	33
H(10B)	1496	1138	-393	33
H(11A)	1100	2655	-1128	29
H(11B)	3021	3869	-690	29
H(12A)	435	3185	455	21
H(12B)	1172	4688	252	21
H(14)	1213	8039	3238	19
H(15)	1309	10160	3027	25
H(16)	2394	10699	1705	30
H(17)	3377	9091	620	35
H(18)	3439	7074	889	27
H(19A)	-1588	5214	2280	40
H(19B)	-1334	4422	1159	40
H(20)	-1982	2227	1369	65
H(22A)	-3290	4535	3292	84
H(22B)	-2997	3941	4108	84
H(22C)	-4614	2947	3245	84
H(23A)	-3769	754	2604	93
H(23B)	-2357	1667	3577	93
H(23C)	-1808	1137	2537	93

Tabelle 17.24 Torsionswinkel [°]

N(1L)-Fe(1)-P(1)-C(13)	-60.6(3)	C(19)-Fe(1)-P(1)-C(1)	168.3(2)
C(2L)-Fe(1)-P(1)-C(13)	-172.8(3)	C(21)-Fe(1)-P(1)-C(1)	-150.5(5)
C(20)-Fe(1)-P(1)-C(13)	81.8(3)	C(2L)-Fe(1)-N(1L)-O(1L)	-11(3)
C(19)-Fe(1)-P(1)-C(13)	51.2(3)	C(20)-Fe(1)-N(1L)-O(1L)	114(3)
C(21)-Fe(1)-P(1)-C(13)	92.4(5)	C(19)-Fe(1)-N(1L)-O(1L)	154(2)
N(1L)-Fe(1)-P(1)-C(7)	176.2(3)	C(21)-Fe(1)-N(1L)-O(1L)	83(3)
C(2L)-Fe(1)-P(1)-C(7)	64.0(3)	P(1)-Fe(1)-N(1L)-O(1L)	-109(3)
C(20)-Fe(1)-P(1)-C(7)	-41.4(3)	N(1L)-Fe(1)-C(2L)-O(2L)	-14(4)
C(19)-Fe(1)-P(1)-C(7)	-72.0(3)	C(20)-Fe(1)-C(2L)-O(2L)	-151(4)
C(21)-Fe(1)-P(1)-C(7)	-30.8(5)	C(19)-Fe(1)-C(2L)-O(2L)	-173(4)
N(1L)-Fe(1)-P(1)-C(1)	56.5(3)	C(21)-Fe(1)-C(2L)-O(2L)	-112(4)
C(2L)-Fe(1)-P(1)-C(1)	-55.7(3)	P(1)-Fe(1)-C(2L)-O(2L)	94(4)
C(20)-Fe(1)-P(1)-C(1)	-161.1(3)	C(13)-P(1)-C(1)-C(2)	74.2(4)

C(7)-P(1)-C(1)-C(2)	-178.3(4)	N(1L)-Fe(1)-C(20)-C(19)	77.3(5)
Fe(1)-P(1)-C(1)-C(2)	-50.3(4)	C(2L)-Fe(1)-C(20)-C(19)	-154.1(4)
C(13)-P(1)-C(1)-C(6)	-53.1(4)	C(21)-Fe(1)-C(20)-C(19)	131.0(6)
C(7)-P(1)-C(1)-C(6)	54.3(4)	P(1)-Fe(1)-C(20)-C(19)	-56.2(4)
Fe(1)-P(1)-C(1)-C(6)	-177.6(3)	N(1L)-Fe(1)-C(20)-C(21)	-53.7(5)
C(6)-C(1)-C(2)-C(3)	-55.7(6)	C(2L)-Fe(1)-C(20)-C(21)	74.9(4)
P(1)-C(1)-C(2)-C(3)	174.6(4)	C(19)-Fe(1)-C(20)-C(21)	-131.0(6)
C(1)-C(2)-C(3)-C(4)	56.8(7)	P(1)-Fe(1)-C(20)-C(21)	172.8(3)
C(2)-C(3)-C(4)-C(5)	-55.0(7)	C(19)-C(20)-C(21)-C(23)	-173.3(6)
C(3)-C(4)-C(5)-C(6)	53.5(8)	Fe(1)-C(20)-C(21)-C(23)	-113.8(6)
C(4)-C(5)-C(6)-C(1)	-52.7(7)	C(19)-C(20)-C(21)-C(22)	37.4(10)
C(2)-C(1)-C(6)-C(5)	53.1(7)	Fe(1)-C(20)-C(21)-C(22)	97.0(6)
P(1)-C(1)-C(6)-C(5)	-178.0(4)	C(19)-C(20)-C(21)-Fe(1)	-59.6(6)
C(13)-P(1)-C(7)-C(12)	-66.8(4)	N(1L)-Fe(1)-C(21)-C(20)	138.7(4)
C(1)-P(1)-C(7)-C(12)	-173.4(3)	C(2L)-Fe(1)-C(21)-C(20)	-110.1(4)
Fe(1)-P(1)-C(7)-C(12)	62.1(4)	C(19)-Fe(1)-C(21)-C(20)	29.5(4)
C(13)-P(1)-C(7)-C(8)	168.6(4)	P(1)-Fe(1)-C(21)-C(20)	-15.1(7)
C(1)-P(1)-C(7)-C(8)	62.0(4)	N(1L)-Fe(1)-C(21)-C(23)	-113.4(5)
Fe(1)-P(1)-C(7)-C(8)	-62.5(4)	C(2L)-Fe(1)-C(21)-C(23)	-2.2(5)
C(12)-C(7)-C(8)-C(9)	57.1(6)	C(20)-Fe(1)-C(21)-C(23)	107.9(7)
P(1)-C(7)-C(8)-C(9)	-175.7(4)	C(19)-Fe(1)-C(21)-C(23)	137.4(6)
C(7)-C(8)-C(9)-C(10)	-54.9(6)	P(1)-Fe(1)-C(21)-C(23)	92.8(6)
C(8)-C(9)-C(10)-C(11)	53.3(6)	N(1L)-Fe(1)-C(21)-C(22)	20.3(5)
C(9)-C(10)-C(11)-C(12)	-54.6(6)	C(2L)-Fe(1)-C(21)-C(22)	131.5(5)
C(10)-C(11)-C(12)-C(7)	58.3(6)	C(20)-Fe(1)-C(21)-C(22)	-118.4(6)
C(8)-C(7)-C(12)-C(11)	-59.1(5)	C(19)-Fe(1)-C(21)-C(22)	-89.0(5)
P(1)-C(7)-C(12)-C(11)	174.7(3)	P(1)-Fe(1)-C(21)-C(22)	-133.6(4)
C(7)-P(1)-C(13)-C(14)	168.6(4)		
C(1)-P(1)-C(13)-C(14)	-84.4(4)		
Fe(1)-P(1)-C(13)-C(14)	38.2(5)		
C(7)-P(1)-C(13)-C(18)	-14.6(5)		
C(1)-P(1)-C(13)-C(18)	92.3(5)		
Fe(1)-P(1)-C(13)-C(18)	-145.1(4)		
C(18)-C(13)-C(14)-C(15)	-1.2(8)		
P(1)-C(13)-C(14)-C(15)	175.7(4)		
C(13)-C(14)-C(15)-C(16)	1.8(8)		
C(14)-C(15)-C(16)-C(17)	-0.2(8)		
C(15)-C(16)-C(17)-C(18)	-1.9(9)		
C(16)-C(17)-C(18)-C(13)	2.6(9)		
C(14)-C(13)-C(18)-C(17)	-1.0(8)		
P(1)-C(13)-C(18)-C(17)	-177.7(4)		
N(1L)-Fe(1)-C(19)-C(20)	-122.2(4)		
C(2L)-Fe(1)-C(19)-C(20)	37.7(5)		
C(21)-Fe(1)-C(19)-C(20)	-31.3(4)		
P(1)-Fe(1)-C(19)-C(20)	130.8(4)		
Fe(1)-C(19)-C(20)-C(21)	59.3(6)		

17.5 Röntgenstrukturdaten von 352

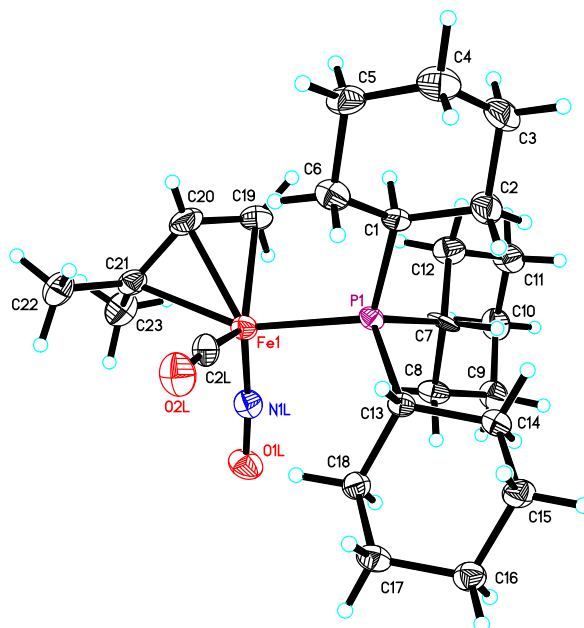


Abb. 17.5 Übersichtszzeichnung der Kristallstruktur von 352

Tabelle 17.25 Kristalldaten und Strukturverfeinerung

Empirische Formel	C ₂₄ H ₄₂ Fe N O ₂ P
Formelgewicht	463.41 g/mol
Temperatur	100(2) K
Wellenlänge	1.54178 Å
Kristallsystem	monoklin, P2(1)/n
Gitterkonstante	a = 10.4504(15) Å α = 90° b = 19.683(3) Å β = 93.980(11)° c = 11.8692(19) Å γ = 90°
Volumen	2435.6(7) Å ³
Z	4
Dichte (errechnet)	1.264 Mg*m ⁻³
Absorptionskoeffizient	5.723 mm ⁻¹
F(000)	1000
Kristallgröße	0.24 x 0.22 x 0.15 mm ³
Theta-Bereich für Datensammlung	4.36 bis 66.76°
Bereich für Indizes	-10 ≤ h ≤ 12, -22 ≤ k ≤ 19, -13 ≤ l ≤ 13
Gesammelte/unabhängige Reflexe	14191 / 4143 [R(int) = 0.0846]
Vervollständigung für theta = 66.76	95.7 %
Max. und min. Transmission	0.7528 und 0.5189
Verfeinerungsmethode	Full-matrix least-squares on F ²
Daten/Einschränkung/Parameter	4143 / 0 / 264
Goodness-of-fit on F ²	1.095
Abschließende R Indizes [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0641, wR2 = 0.1474
R Indizes (alle Daten)	R1 = 0.0998, wR2 = 0.1602
Restelektronendichte	0.993 und -0.627 eÅ ⁻³

Tabelle 17.26 Lageparameter ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$), U(eq) ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors

	x	y	z	U(eq)
Fe(1)	1643(1)	1506(1)	2929(1)	21(1)
P(1)	1345(1)	1797(1)	4734(1)	16(1)
O(1L)	121(3)	2464(2)	1648(3)	33(1)
N(1L)	641(4)	2020(2)	2197(3)	25(1)
C(2L)	3231(5)	1808(3)	3056(4)	25(1)
O(2L)	4237(4)	2062(2)	3078(3)	36(1)
C(1)	2119(5)	1201(2)	5792(4)	20(1)
C(2)	2033(5)	1382(3)	7031(4)	30(1)
C(3)	2554(5)	796(3)	7781(4)	36(1)
C(4)	3930(5)	624(3)	7555(4)	36(1)
C(5)	4037(5)	465(3)	6330(4)	30(1)
C(6)	3502(5)	1044(3)	5569(4)	26(1)
C(7)	-352(4)	1822(2)	5093(4)	24(1)
C(8)	-1197(5)	2282(2)	4316(4)	23(1)
C(9)	-2567(5)	2343(3)	4694(4)	27(1)
C(10)	-3165(5)	1647(3)	4840(4)	30(1)
C(11)	-2329(5)	1208(3)	5637(4)	31(1)
C(12)	-968(5)	1141(3)	5257(4)	28(1)
C(13)	2021(5)	2660(2)	5094(4)	17(1)
C(14)	1491(5)	3008(2)	6118(4)	22(1)
C(15)	2214(5)	3666(2)	6410(4)	24(1)
C(16)	2144(5)	4158(2)	5413(4)	25(1)
C(17)	2623(5)	3820(2)	4380(4)	25(1)
C(18)	1906(5)	3153(2)	4090(4)	21(1)
C(19)	920(6)	499(2)	3226(5)	33(1)
C(20)	2021(6)	482(2)	2650(5)	33(1)
C(21)	2070(5)	814(2)	1587(4)	23(1)
C(22)	3362(5)	847(3)	1112(4)	30(1)
C(23)	979(5)	810(3)	706(4)	34(1)

Tabelle 17.27 Bindungslängen [\AA] und Bindungswinkel [$^\circ$]

Fe(1)-N(1L)	1.659(4)	C(1)-C(6)	1.520(7)
Fe(1)-C(2L)	1.760(6)	C(1)-C(2)	1.522(6)
Fe(1)-C(20)	2.084(5)	C(1)-H(1)	10.000
Fe(1)-C(19)	2.159(5)	C(2)-C(3)	1.534(7)
Fe(1)-C(21)	2.165(5)	C(2)-H(2A)	0.9900
Fe(1)-P(1)	2.2592(14)	C(2)-H(2B)	0.9900
P(1)-C(7)	1.854(5)	C(3)-C(4)	1.520(8)
P(1)-C(1)	1.861(4)	C(3)-H(3A)	0.9900
P(1)-C(13)	1.878(4)	C(3)-H(3B)	0.9900
O(1L)-N(1L)	1.198(5)	C(4)-C(5)	1.498(7)
C(2L)-O(2L)	1.163(6)	C(4)-H(4A)	0.9900

C(4)-H(4B)	0.9900	C(21)-C(22)	1.501(7)
C(5)-C(6)	1.535(6)	C(22)-H(22A)	0.9800
C(5)-H(5A)	0.9900	C(22)-H(22B)	0.9800
C(5)-H(5B)	0.9900	C(22)-H(22C)	0.9800
C(6)-H(6A)	0.9900	C(23)-H(23A)	0.9800
C(6)-H(6B)	0.9900	C(23)-H(23B)	0.9800
C(7)-C(12)	1.505(7)	C(23)-H(23C)	0.9800
C(7)-C(8)	1.529(6)		
C(7)-H(7)	10.000	N(1L)-Fe(1)-C(2L)	113.3(2)
C(8)-C(9)	1.535(7)	N(1L)-Fe(1)-C(20)	128.8(2)
C(8)-H(8A)	0.9900	C(2L)-Fe(1)-C(20)	98.8(2)
C(8)-H(8B)	0.9900	N(1L)-Fe(1)-C(19)	115.5(2)
C(9)-C(10)	1.521(7)	C(2L)-Fe(1)-C(19)	129.5(2)
C(9)-H(9A)	0.9900	C(20)-Fe(1)-C(19)	37.9(2)
C(9)-H(9B)	0.9900	N(1L)-Fe(1)-C(21)	98.79(19)
C(10)-C(11)	1.513(7)	C(2L)-Fe(1)-C(21)	92.0(2)
C(10)-H(10A)	0.9900	C(20)-Fe(1)-C(21)	39.12(19)
C(10)-H(10B)	0.9900	C(19)-Fe(1)-C(21)	68.59(19)
C(11)-C(12)	1.527(7)	N(1L)-Fe(1)-P(1)	102.62(14)
C(11)-H(11A)	0.9900	C(2L)-Fe(1)-P(1)	91.40(15)
C(11)-H(11B)	0.9900	C(20)-Fe(1)-P(1)	115.84(16)
C(12)-H(12A)	0.9900	C(19)-Fe(1)-P(1)	90.30(15)
C(12)-H(12B)	0.9900	C(21)-Fe(1)-P(1)	154.93(13)
C(13)-C(14)	1.532(6)	C(7)-P(1)-C(1)	103.9(2)
C(13)-C(18)	1.535(6)	C(7)-P(1)-C(13)	105.9(2)
C(13)-H(13)	10.000	C(1)-P(1)-C(13)	106.1(2)
C(14)-C(15)	1.527(6)	C(7)-P(1)-Fe(1)	114.98(17)
C(14)-H(14A)	0.9900	C(1)-P(1)-Fe(1)	113.46(15)
C(14)-H(14B)	0.9900	C(13)-P(1)-Fe(1)	111.75(15)
C(15)-C(16)	1.528(6)	O(1L)-N(1L)-Fe(1)	167.6(4)
C(15)-H(15A)	0.9900	O(2L)-C(2L)-Fe(1)	173.3(4)
C(15)-H(15B)	0.9900	C(6)-C(1)-C(2)	109.6(4)
C(16)-C(17)	1.511(7)	C(6)-C(1)-P(1)	112.7(3)
C(16)-H(16A)	0.9900	C(2)-C(1)-P(1)	116.9(3)
C(16)-H(16B)	0.9900	C(6)-C(1)-H(1)	105.5
C(17)-C(18)	1.538(6)	C(2)-C(1)-H(1)	105.5
C(17)-H(17A)	0.9900	P(1)-C(1)-H(1)	105.5
C(17)-H(17B)	0.9900	C(1)-C(2)-C(3)	110.0(4)
C(18)-H(18A)	0.9900	C(1)-C(2)-H(2A)	109.7
C(18)-H(18B)	0.9900	C(3)-C(2)-H(2A)	109.7
C(19)-C(20)	1.378(8)	C(1)-C(2)-H(2B)	109.7
C(19)-H(19A)	0.9500	C(3)-C(2)-H(2B)	109.7
C(19)-H(19B)	0.9500	H(2A)-C(2)-H(2B)	108.2
C(20)-C(21)	1.425(7)	C(4)-C(3)-C(2)	111.5(5)
C(20)-H(20)	0.9500	C(4)-C(3)-H(3A)	109.3
C(21)-C(23)	1.492(7)	C(2)-C(3)-H(3A)	109.3

C(4)-C(3)-H(3B)	109.3	C(10)-C(11)-H(11A)	109.2
C(2)-C(3)-H(3B)	109.3	C(12)-C(11)-H(11A)	109.2
H(3A)-C(3)-H(3B)	108.0	C(10)-C(11)-H(11B)	109.2
C(5)-C(4)-C(3)	110.6(4)	C(12)-C(11)-H(11B)	109.2
C(5)-C(4)-H(4A)	109.5	H(11A)-C(11)-H(11B)	107.9
C(3)-C(4)-H(4A)	109.5	C(7)-C(12)-C(11)	112.1(4)
C(5)-C(4)-H(4B)	109.5	C(7)-C(12)-H(12A)	109.2
C(3)-C(4)-H(4B)	109.5	C(11)-C(12)-H(12A)	109.2
H(4A)-C(4)-H(4B)	108.1	C(7)-C(12)-H(12B)	109.2
C(4)-C(5)-C(6)	111.5(4)	C(11)-C(12)-H(12B)	109.2
C(4)-C(5)-H(5A)	109.3	H(12A)-C(12)-H(12B)	107.9
C(6)-C(5)-H(5A)	109.3	C(14)-C(13)-C(18)	108.7(4)
C(4)-C(5)-H(5B)	109.3	C(14)-C(13)-P(1)	115.7(3)
C(6)-C(5)-H(5B)	109.3	C(18)-C(13)-P(1)	112.8(3)
H(5A)-C(5)-H(5B)	108.0	C(14)-C(13)-H(13)	106.3
C(1)-C(6)-C(5)	111.2(4)	C(18)-C(13)-H(13)	106.3
C(1)-C(6)-H(6A)	109.4	P(1)-C(13)-H(13)	106.3
C(5)-C(6)-H(6A)	109.4	C(15)-C(14)-C(13)	111.0(4)
C(1)-C(6)-H(6B)	109.4	C(15)-C(14)-H(14A)	109.4
C(5)-C(6)-H(6B)	109.4	C(13)-C(14)-H(14A)	109.4
H(6A)-C(6)-H(6B)	108.0	C(15)-C(14)-H(14B)	109.4
C(12)-C(7)-C(8)	111.8(4)	C(13)-C(14)-H(14B)	109.4
C(12)-C(7)-P(1)	115.4(3)	H(14A)-C(14)-H(14B)	108.0
C(8)-C(7)-P(1)	113.5(3)	C(14)-C(15)-C(16)	111.5(4)
C(12)-C(7)-H(7)	105.0	C(14)-C(15)-H(15A)	109.3
C(8)-C(7)-H(7)	105.0	C(16)-C(15)-H(15A)	109.3
P(1)-C(7)-H(7)	105.0	C(14)-C(15)-H(15B)	109.3
C(7)-C(8)-C(9)	112.4(4)	C(16)-C(15)-H(15B)	109.3
C(7)-C(8)-H(8A)	109.1	H(15A)-C(15)-H(15B)	108.0
C(9)-C(8)-H(8A)	109.1	C(17)-C(16)-C(15)	110.4(4)
C(7)-C(8)-H(8B)	109.1	C(17)-C(16)-H(16A)	109.6
C(9)-C(8)-H(8B)	109.1	C(15)-C(16)-H(16A)	109.6
H(8A)-C(8)-H(8B)	107.9	C(17)-C(16)-H(16B)	109.6
C(10)-C(9)-C(8)	111.2(4)	C(15)-C(16)-H(16B)	109.6
C(10)-C(9)-H(9A)	109.4	H(16A)-C(16)-H(16B)	108.1
C(8)-C(9)-H(9A)	109.4	C(16)-C(17)-C(18)	112.0(4)
C(10)-C(9)-H(9B)	109.4	C(16)-C(17)-H(17A)	109.2
C(8)-C(9)-H(9B)	109.4	C(18)-C(17)-H(17A)	109.2
H(9A)-C(9)-H(9B)	108.0	C(16)-C(17)-H(17B)	109.2
C(11)-C(10)-C(9)	111.2(4)	C(18)-C(17)-H(17B)	109.2
C(11)-C(10)-H(10A)	109.4	H(17A)-C(17)-H(17B)	107.9
C(9)-C(10)-H(10A)	109.4	C(13)-C(18)-C(17)	110.8(4)
C(11)-C(10)-H(10B)	109.4	C(13)-C(18)-H(18A)	109.5
C(9)-C(10)-H(10B)	109.4	C(17)-C(18)-H(18A)	109.5
H(10A)-C(10)-H(10B)	108.0	C(13)-C(18)-H(18B)	109.5
C(10)-C(11)-C(12)	112.0(4)	C(17)-C(18)-H(18B)	109.5

H(18A)-C(18)-H(18B)	108.1	C(20)-C(21)-Fe(1)	67.4(3)
C(20)-C(19)-Fe(1)	68.1(3)	C(23)-C(21)-Fe(1)	109.4(3)
C(20)-C(19)-H(19A)	120.0	C(22)-C(21)-Fe(1)	119.1(3)
Fe(1)-C(19)-H(19A)	76.9	C(21)-C(22)-H(22A)	109.5
C(20)-C(19)-H(19B)	120.0	C(21)-C(22)-H(22B)	109.5
Fe(1)-C(19)-H(19B)	126.8	H(22A)-C(22)-H(22B)	109.5
H(19A)-C(19)-H(19B)	120.0	C(21)-C(22)-H(22C)	109.5
C(19)-C(20)-C(21)	120.7(5)	H(22A)-C(22)-H(22C)	109.5
C(19)-C(20)-Fe(1)	74.0(3)	H(22B)-C(22)-H(22C)	109.5
C(21)-C(20)-Fe(1)	73.5(3)	C(21)-C(23)-H(23A)	109.5
C(19)-C(20)-H(20)	119.6	C(21)-C(23)-H(23B)	109.5
C(21)-C(20)-H(20)	119.6	H(23A)-C(23)-H(23B)	109.5
Fe(1)-C(20)-H(20)	124.4	C(21)-C(23)-H(23C)	109.5
C(20)-C(21)-C(23)	123.0(5)	H(23A)-C(23)-H(23C)	109.5
C(20)-C(21)-C(22)	116.2(5)	H(23B)-C(23)-H(23C)	109.5
C(23)-C(21)-C(22)	113.6(4)		

Tabelle 17.28 Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$). Der Exponent des anisotropen Temperaturfaktors ist definiert als: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Fe(1)	23(1)	18(1)	21(1)	0(1)	3(1)	-2(1)
P(1)	16(1)	16(1)	16(1)	2(1)	1(1)	-4(1)
O(1L)	30(2)	38(2)	31(2)	12(2)	-2(2)	6(2)
N(1L)	24(3)	26(2)	24(2)	-1(2)	1(2)	-4(2)
C(2L)	30(3)	28(3)	18(2)	-3(2)	2(2)	0(3)
O(2L)	25(2)	46(2)	39(2)	-4(2)	4(2)	-9(2)
C(1)	22(3)	15(2)	21(2)	3(2)	1(2)	-2(2)
C(2)	32(3)	35(3)	23(3)	4(2)	0(2)	8(2)
C(3)	43(4)	40(3)	23(3)	11(2)	-1(2)	7(3)
C(4)	32(4)	40(3)	35(3)	8(2)	-10(2)	7(3)
C(5)	24(3)	27(3)	39(3)	7(2)	-2(2)	8(2)
C(6)	20(3)	30(3)	30(3)	7(2)	0(2)	0(2)
C(7)	15(3)	25(3)	32(3)	22(2)	10(2)	5(2)
C(8)	18(3)	22(2)	30(3)	7(2)	-3(2)	-3(2)
C(9)	19(3)	31(3)	31(3)	3(2)	5(2)	0(2)
C(10)	20(3)	36(3)	33(3)	0(2)	5(2)	-5(2)
C(11)	26(3)	30(3)	39(3)	5(2)	9(2)	-9(2)
C(12)	22(3)	23(3)	39(3)	3(2)	4(2)	-7(2)
C(13)	15(3)	16(2)	18(2)	2(2)	-1(2)	0(2)
C(14)	24(3)	21(2)	22(2)	4(2)	2(2)	-1(2)
C(15)	31(3)	18(2)	22(2)	-2(2)	-4(2)	-5(2)
C(16)	24(3)	21(2)	29(3)	1(2)	3(2)	-1(2)
C(17)	27(3)	21(2)	25(3)	4(2)	-1(2)	-6(2)
C(18)	23(3)	20(2)	20(2)	0(2)	0(2)	0(2)
C(19)	45(4)	16(2)	38(3)	2(2)	9(3)	-3(2)
C(20)	40(4)	16(2)	43(3)	-4(2)	7(3)	1(2)

C(21)	25(3)	15(2)	29(3)	-4(2)	2(2)	-2(2)
C(22)	29(3)	28(3)	34(3)	-9(2)	2(2)	0(2)
C(23)	30(3)	35(3)	37(3)	-9(2)	-3(2)	1(3)

Tabelle 17.29 Lageparameter der Wasserstoffatome ($\cdot 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$)

	x	y	z	U(eq)
H(1)	1646	762	5680	23
H(2A)	1128	1473	7180	36
H(2B)	2537	1799	7211	36
H(3A)	2513	923	8584	43
H(3B)	2008	389	7637	43
H(4A)	4493	1014	7774	43
H(4B)	4221	228	8019	43
H(5A)	3559	42	6137	36
H(5B)	4949	388	6191	36
H(6A)	4033	1456	5710	32
H(6B)	3551	913	4768	32
H(7)	-332	2046	5851	28
H(8A)	-1232	2097	3538	28
H(8B)	-807	2740	4301	28
H(9A)	-2550	2594	5418	32
H(9B)	-3099	2605	4124	32
H(10A)	-4019	1701	5141	36
H(10B)	-3284	1420	4096	36
H(11A)	-2717	751	5678	38
H(11B)	-2293	1410	6403	38
H(12A)	-439	880	5830	33
H(12B)	-993	885	4538	33
H(13)	2960	2594	5285	20
H(14A)	570	3109	5953	27
H(14B)	1572	2697	6775	27
H(15A)	3123	3559	6629	29
H(15B)	1841	3884	7064	29
H(16A)	1246	4308	5249	30
H(16B)	2672	4564	5608	30
H(17A)	3551	3723	4515	29
H(17B)	2511	4134	3730	29
H(18A)	990	3252	3889	25
H(18B)	2269	2939	3427	25
H(19A)	184	734	2915	40
H(19B)	898	276	3934	40
H(20)	2754	246	2965	39
H(22A)	4032	862	1732	45
H(22B)	3414	1256	647	45
H(22C)	3485	444	646	45
H(23A)	1081	430	188	52

H(23B)	971	1238	284	52
H(23C)	170	760	1069	52

Tabelle 17.30 Torsionswinkel [°]

N(1L)-Fe(1)-P(1)-C(7)	50.1(2)	C(12)-C(7)-C(8)-C(9)	52.3(6)
C(2L)-Fe(1)-P(1)-C(7)	164.4(2)	P(1)-C(7)-C(8)-C(9)	-175.0(3)
C(20)-Fe(1)-P(1)-C(7)	-95.2(2)	C(7)-C(8)-C(9)-C(10)	-53.3(5)
C(19)-Fe(1)-P(1)-C(7)	-66.2(2)	C(8)-C(9)-C(10)-C(11)	54.7(6)
C(21)-Fe(1)-P(1)-C(7)	-97.9(4)	C(9)-C(10)-C(11)-C(12)	-55.5(6)
N(1L)-Fe(1)-P(1)-C(1)	169.4(2)	C(8)-C(7)-C(12)-C(11)	-52.6(6)
C(2L)-Fe(1)-P(1)-C(1)	-76.3(2)	P(1)-C(7)-C(12)-C(11)	175.7(3)
C(20)-Fe(1)-P(1)-C(1)	24.2(2)	C(10)-C(11)-C(12)-C(7)	54.7(6)
C(19)-Fe(1)-P(1)-C(1)	53.2(2)	C(7)-P(1)-C(13)-C(14)	34.1(4)
C(21)-Fe(1)-P(1)-C(1)	21.4(4)	C(1)-P(1)-C(13)-C(14)	-75.9(4)
N(1L)-Fe(1)-P(1)-C(13)	-70.6(2)	Fe(1)-P(1)-C(13)-C(14)	160.0(3)
C(2L)-Fe(1)-P(1)-C(13)	43.6(2)	C(7)-P(1)-C(13)-C(18)	-92.0(4)
C(20)-Fe(1)-P(1)-C(13)	144.1(2)	C(1)-P(1)-C(13)-C(18)	158.0(3)
C(19)-Fe(1)-P(1)-C(13)	173.1(2)	Fe(1)-P(1)-C(13)-C(18)	33.9(4)
C(21)-Fe(1)-P(1)-C(13)	141.3(4)	C(18)-C(13)-C(14)-C(15)	-58.3(5)
C(2L)-Fe(1)-N(1L)-O(1L)	1.2(18)	P(1)-C(13)-C(14)-C(15)	173.6(3)
C(20)-Fe(1)-N(1L)-O(1L)	-122.9(17)	C(13)-C(14)-C(15)-C(16)	57.8(5)
C(19)-Fe(1)-N(1L)-O(1L)	-165.2(16)	C(14)-C(15)-C(16)-C(17)	-55.1(6)
C(21)-Fe(1)-N(1L)-O(1L)	-94.8(17)	C(15)-C(16)-C(17)-C(18)	54.8(5)
P(1)-Fe(1)-N(1L)-O(1L)	98.3(17)	C(14)-C(13)-C(18)-C(17)	57.5(5)
N(1L)-Fe(1)-C(2L)-O(2L)	0(4)	P(1)-C(13)-C(18)-C(17)	-172.7(3)
C(20)-Fe(1)-C(2L)-O(2L)	139(4)	C(16)-C(17)-C(18)-C(13)	-57.1(5)
C(19)-Fe(1)-C(2L)-O(2L)	164(4)	N(1L)-Fe(1)-C(19)-C(20)	121.1(3)
C(21)-Fe(1)-C(2L)-O(2L)	100(4)	C(2L)-Fe(1)-C(19)-C(20)	-42.6(4)
P(1)-Fe(1)-C(2L)-O(2L)	-105(4)	C(21)-Fe(1)-C(19)-C(20)	31.4(3)
C(7)-P(1)-C(1)-C(6)	173.6(3)	P(1)-Fe(1)-C(19)-C(20)	-134.7(3)
C(13)-P(1)-C(1)-C(6)	-75.0(4)	Fe(1)-C(19)-C(20)-C(21)	-59.1(4)
Fe(1)-P(1)-C(1)-C(6)	48.1(4)	N(1L)-Fe(1)-C(20)-C(19)	-82.3(4)
C(7)-P(1)-C(1)-C(2)	-58.0(4)	C(2L)-Fe(1)-C(20)-C(19)	148.0(3)
C(13)-P(1)-C(1)-C(2)	53.4(4)	C(21)-Fe(1)-C(20)-C(19)	-129.7(5)
Fe(1)-P(1)-C(1)-C(2)	176.5(3)	P(1)-Fe(1)-C(20)-C(19)	52.2(4)
C(6)-C(1)-C(2)-C(3)	-57.8(6)	N(1L)-Fe(1)-C(20)-C(21)	47.4(4)
P(1)-C(1)-C(2)-C(3)	172.4(4)	C(2L)-Fe(1)-C(20)-C(21)	-82.3(3)
C(1)-C(2)-C(3)-C(4)	57.6(6)	C(19)-Fe(1)-C(20)-C(21)	129.7(5)
C(2)-C(3)-C(4)-C(5)	-56.0(6)	P(1)-Fe(1)-C(20)-C(21)	-178.1(2)
C(3)-C(4)-C(5)-C(6)	54.9(6)	C(19)-C(20)-C(21)-C(23)	-39.8(7)
C(2)-C(1)-C(6)-C(5)	57.4(5)	Fe(1)-C(20)-C(21)-C(23)	-99.1(5)
P(1)-C(1)-C(6)-C(5)	-170.5(3)	C(19)-C(20)-C(21)-C(22)	171.7(4)
C(4)-C(5)-C(6)-C(1)	-56.5(6)	Fe(1)-C(20)-C(21)-C(22)	112.4(4)
C(1)-P(1)-C(7)-C(12)	-48.5(4)	C(19)-C(20)-C(21)-Fe(1)	59.3(4)
C(13)-P(1)-C(7)-C(12)	-160.0(4)	N(1L)-Fe(1)-C(21)-C(20)	-144.5(3)
Fe(1)-P(1)-C(7)-C(12)	76.1(4)	C(2L)-Fe(1)-C(21)-C(20)	101.5(3)

C(1)-P(1)-C(7)-C(8)	-179.4(4)	C(19)-Fe(1)-C(21)-C(20)	-30.5(3)
C(13)-P(1)-C(7)-C(8)	69.1(4)	P(1)-Fe(1)-C(21)-C(20)	4.0(5)
Fe(1)-P(1)-C(7)-C(8)	-54.8(4)	N(1L)-Fe(1)-C(21)-C(23)	-25.9(4)
C(2L)-Fe(1)-C(21)-C(23)	-139.8(4)	C(2L)-Fe(1)-C(21)-C(22)	-6.9(4)
C(20)-Fe(1)-C(21)-C(23)	118.6(5)	C(20)-Fe(1)-C(21)-C(22)	-108.4(5)
C(19)-Fe(1)-C(21)-C(23)	88.2(4)	C(19)-Fe(1)-C(21)-C(22)	-138.9(4)
P(1)-Fe(1)-C(21)-C(23)	122.6(4)	P(1)-Fe(1)-C(21)-C(22)	-104.4(4)
N(1L)-Fe(1)-C(21)-C(22)	107.1(4)		

17.6 Röntgenstrukturdaten von 353

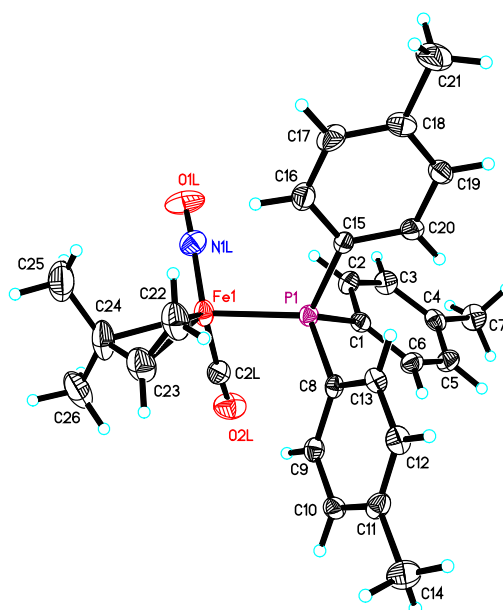


Abb. 17.6 Übersichtzeichnung der Kristallstruktur von 353

Tabelle 17.31 Kristalldaten und Strukturverfeinerung

Empirische Formel	C ₂₇ H ₃₀ Fe N O ₂ P
Formelgewicht	487.34 g/mol
Temperatur	100(2) K
Wellenlänge	0.71073 Å
Kristallsystem	monoklin, C ₂ /c
Gitterkonstante	a = 36.741(6) Å α = 90° b = 7.6826(12) Å β = 109.950(14)° c = 18.969(2) Å γ = 90°
Volumen	5033.1(13) Å ³
Z	8
Dichte (errechnet)	1.286 Mg*m ⁻³
Absorptionskoeffizient	0.686 mm ⁻¹
F(000)	2048
Kristallgröße	0.12 x 0.11 x 0.09 mm ³
Theta-Bereich für Datensammlung	2.18 bis 26.55°

Bereich für Indizes	-46<=h<=42, -9<=k<=9, -23<=l<=23
Gesammelte/unabhängige Reflexe	35031 / 5251 [R(int) = 0.0645]
Vervollständigung für theta = 26.55	99.8 %
Max. und min. Transmission	0.7447 and 0.6956
Verfeinerungsmethode	Full-matrix least-squares on F ²
Daten/Einschränkung/Parameter	5251 / 0 / 294
Goodness-of-fit on F ²	1.054
Abschließende R Indizes [I>2σ(I)]	R1 = 0.0479, wR2 = 0.1008
R Indizes (alle Daten)	R1 = 0.0894, wR2 = 0.1097
Restelektronendichte	0.787 und -0.354 eÅ ⁻³

Tabelle 17.32 Lageparameter (*10⁴) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren (Å²*10³), U(eq) ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij}-Tensors

	x	y	z	U(eq)
Fe(1)	1024(1)	125(1)	4692(1)	24(1)
P(1)	1239(1)	1440(1)	5804(1)	18(1)
N(1L)	831(1)	1665(3)	4068(1)	29(1)
O(1L)	760(1)	2712(3)	3579(1)	45(1)
C(2L)	1500(1)	-349(4)	4763(1)	27(1)
O(2L)	1817(1)	-529(3)	4790(1)	41(1)
C(1)	1664(1)	2799(4)	5936(1)	19(1)
C(2)	1656(1)	3949(4)	5369(1)	24(1)
C(3)	1955(1)	5102(4)	5453(2)	26(1)
C(4)	2273(1)	5153(4)	6106(2)	23(1)
C(5)	2284(1)	3967(4)	6666(2)	26(1)
C(6)	1986(1)	2815(4)	6589(1)	23(1)
C(7)	2591(1)	6460(4)	6206(2)	32(1)
C(8)	1392(1)	-20(4)	6609(1)	18(1)
C(9)	1642(1)	-1381(4)	6613(1)	20(1)
C(10)	1775(1)	-2477(4)	7222(1)	21(1)
C(11)	1664(1)	-2241(4)	7849(1)	25(1)
C(12)	1410(1)	-917(4)	7833(1)	24(1)
C(13)	1275(1)	186(4)	7226(1)	21(1)
C(14)	1819(1)	-3433(4)	8516(2)	37(1)
C(15)	915(1)	2969(4)	6021(1)	18(1)
C(16)	518(1)	2884(4)	5662(2)	29(1)
C(17)	274(1)	4026(4)	5842(2)	31(1)
C(18)	416(1)	5303(4)	6378(2)	26(1)
C(19)	810(1)	5401(4)	6731(2)	25(1)
C(20)	1057(1)	4263(4)	6560(2)	23(1)
C(21)	149(1)	6584(5)	6556(2)	42(1)
C(22)	632(1)	-1340(4)	5091(2)	41(1)
C(23)	826(1)	-2382(4)	4751(2)	43(1)
C(24)	793(1)	-2092(5)	3990(2)	45(1)
C(25)	429(1)	-1628(5)	3385(2)	59(1)
C(26)	1061(1)	-3154(5)	3705(2)	58(1)

Tabelle 17.33 Bindungslängen [Å] und Bindungswinkel [°]

Fe(1)-N(1L)	1.653(3)	C(17)-H(17)	0.9500
Fe(1)-C(2L)	1.746(3)	C(18)-C(19)	1.374(4)
Fe(1)-C(23)	2.075(3)	C(18)-C(21)	1.507(4)
Fe(1)-C(24)	2.150(3)	C(19)-C(20)	1.378(4)
Fe(1)-C(22)	2.158(3)	C(19)-H(19)	0.9500
Fe(1)-P(1)	2.2260(8)	C(20)-H(20)	0.9500
P(1)-C(15)	1.817(3)	C(21)-H(21A)	0.9800
P(1)-C(8)	1.822(3)	C(21)-H(21B)	0.9800
P(1)-C(1)	1.823(3)	C(21)-H(21C)	0.9800
N(1L)-O(1L)	1.187(3)	C(22)-C(23)	1.371(5)
C(2L)-O(2L)	1.155(4)	C(22)-H(22A)	0.9500
C(1)-C(2)	1.386(4)	C(22)-H(22B)	0.9500
C(1)-C(6)	1.392(4)	C(23)-C(24)	1.424(4)
C(2)-C(3)	1.375(4)	C(23)-H(23)	0.9500
C(2)-H(2)	0.9500	C(24)-C(25)	1.480(5)
C(3)-C(4)	1.384(4)	C(24)-C(26)	1.514(5)
C(3)-H(3)	0.9500	C(25)-H(25A)	0.9800
C(4)-C(5)	1.389(4)	C(25)-H(25B)	0.9800
C(4)-C(7)	1.503(4)	C(25)-H(25C)	0.9800
C(5)-C(6)	1.376(4)	C(26)-H(26A)	0.9800
C(5)-H(5)	0.9500	C(26)-H(26B)	0.9800
C(6)-H(6)	0.9500	C(26)-H(26C)	0.9800
C(7)-H(7A)	0.9800		
C(7)-H(7B)	0.9800	N(1L)-Fe(1)-C(2L)	112.26(12)
C(7)-H(7C)	0.9800	N(1L)-Fe(1)-C(23)	129.05(13)
C(8)-C(9)	1.388(4)	C(2L)-Fe(1)-C(23)	99.36(15)
C(8)-C(13)	1.389(3)	N(1L)-Fe(1)-C(24)	98.11(13)
C(9)-C(10)	1.377(4)	C(2L)-Fe(1)-C(24)	93.21(15)
C(9)-H(9)	0.9500	C(23)-Fe(1)-C(24)	39.34(12)
C(10)-C(11)	1.395(4)	N(1L)-Fe(1)-C(22)	116.67(13)
C(10)-H(10)	0.9500	C(2L)-Fe(1)-C(22)	129.45(14)
C(11)-C(12)	1.374(4)	C(23)-Fe(1)-C(22)	37.72(13)
C(11)-C(14)	1.508(4)	C(24)-Fe(1)-C(22)	68.54(12)
C(12)-C(13)	1.379(4)	N(1L)-Fe(1)-P(1)	106.25(9)
C(12)-H(12)	0.9500	C(2L)-Fe(1)-P(1)	90.07(9)
C(13)-H(13)	0.9500	C(23)-Fe(1)-P(1)	112.80(9)
C(14)-H(14A)	0.9800	C(24)-Fe(1)-P(1)	152.08(9)
C(14)-H(14B)	0.9800	C(22)-Fe(1)-P(1)	88.13(9)
C(14)-H(14C)	0.9800	C(15)-P(1)-C(8)	104.34(12)
C(15)-C(16)	1.382(4)	C(15)-P(1)-C(1)	101.27(13)
C(15)-C(20)	1.393(4)	C(8)-P(1)-C(1)	103.34(12)
C(16)-C(17)	1.380(4)	C(15)-P(1)-Fe(1)	117.49(9)
C(16)-H(16)	0.9500	C(8)-P(1)-Fe(1)	115.01(9)
C(17)-C(18)	1.380(4)	C(1)-P(1)-Fe(1)	113.54(8)

O(1L)-N(1L)-Fe(1)	166.0(2)	H(14A)-C(14)-H(14B)	109.5
O(2L)-C(2L)-Fe(1)	174.5(3)	C(11)-C(14)-H(14C)	109.5
C(2)-C(1)-C(6)	118.0(3)	H(14A)-C(14)-H(14C)	109.5
C(2)-C(1)-P(1)	118.0(2)	H(14B)-C(14)-H(14C)	109.5
C(6)-C(1)-P(1)	123.9(2)	C(16)-C(15)-C(20)	117.7(3)
C(3)-C(2)-C(1)	121.1(3)	C(16)-C(15)-P(1)	121.3(2)
C(3)-C(2)-H(2)	119.4	C(20)-C(15)-P(1)	121.1(2)
C(1)-C(2)-H(2)	119.4	C(17)-C(16)-C(15)	120.9(3)
C(2)-C(3)-C(4)	121.3(3)	C(17)-C(16)-H(16)	119.6
C(2)-C(3)-H(3)	119.4	C(15)-C(16)-H(16)	119.6
C(4)-C(3)-H(3)	119.4	C(16)-C(17)-C(18)	121.4(3)
C(3)-C(4)-C(5)	117.4(3)	C(16)-C(17)-H(17)	119.3
C(3)-C(4)-C(7)	121.0(3)	C(18)-C(17)-H(17)	119.3
C(5)-C(4)-C(7)	121.5(3)	C(19)-C(18)-C(17)	117.9(3)
C(6)-C(5)-C(4)	121.7(3)	C(19)-C(18)-C(21)	120.9(3)
C(6)-C(5)-H(5)	119.1	C(17)-C(18)-C(21)	121.2(3)
C(4)-C(5)-H(5)	119.1	C(18)-C(19)-C(20)	121.4(3)
C(5)-C(6)-C(1)	120.4(3)	C(18)-C(19)-H(19)	119.3
C(5)-C(6)-H(6)	119.8	C(20)-C(19)-H(19)	119.3
C(1)-C(6)-H(6)	119.8	C(19)-C(20)-C(15)	120.8(3)
C(4)-C(7)-H(7A)	109.5	C(19)-C(20)-H(20)	119.6
C(4)-C(7)-H(7B)	109.5	C(15)-C(20)-H(20)	119.6
H(7A)-C(7)-H(7B)	109.5	C(18)-C(21)-H(21A)	109.5
C(4)-C(7)-H(7C)	109.5	C(18)-C(21)-H(21B)	109.5
H(7A)-C(7)-H(7C)	109.5	H(21A)-C(21)-H(21B)	109.5
H(7B)-C(7)-H(7C)	109.5	C(18)-C(21)-H(21C)	109.5
C(9)-C(8)-C(13)	118.4(2)	H(21A)-C(21)-H(21C)	109.5
C(9)-C(8)-P(1)	118.96(18)	H(21B)-C(21)-H(21C)	109.5
C(13)-C(8)-P(1)	122.6(2)	C(23)-C(22)-Fe(1)	67.83(19)
C(10)-C(9)-C(8)	120.8(2)	C(23)-C(22)-H(22A)	120.0
C(10)-C(9)-H(9)	119.6	Fe(1)-C(22)-H(22A)	77.2
C(8)-C(9)-H(9)	119.6	C(23)-C(22)-H(22B)	120.0
C(9)-C(10)-C(11)	120.8(3)	Fe(1)-C(22)-H(22B)	126.8
C(9)-C(10)-H(10)	119.6	H(22A)-C(22)-H(22B)	120.0
C(11)-C(10)-H(10)	119.6	C(22)-C(23)-C(24)	120.5(3)
C(12)-C(11)-C(10)	118.1(2)	C(22)-C(23)-Fe(1)	74.5(2)
C(12)-C(11)-C(14)	121.9(2)	C(24)-C(23)-Fe(1)	73.18(19)
C(10)-C(11)-C(14)	120.0(3)	C(22)-C(23)-H(23)	119.8
C(11)-C(12)-C(13)	121.5(2)	C(24)-C(23)-H(23)	119.8
C(11)-C(12)-H(12)	119.2	Fe(1)-C(23)-H(23)	124.2
C(13)-C(12)-H(12)	119.2	C(23)-C(24)-C(25)	124.4(4)
C(12)-C(13)-C(8)	120.4(3)	C(23)-C(24)-C(26)	115.9(3)
C(12)-C(13)-H(13)	119.8	C(25)-C(24)-C(26)	112.3(3)
C(8)-C(13)-H(13)	119.8	C(23)-C(24)-Fe(1)	67.48(18)
C(11)-C(14)-H(14A)	109.5	C(25)-C(24)-Fe(1)	110.6(3)
C(11)-C(14)-H(14B)	109.5	C(26)-C(24)-Fe(1)	118.8(3)

C(24)-C(25)-H(25A)	109.5	C(24)-C(26)-H(26A)	109.5
C(24)-C(25)-H(25B)	109.5	C(24)-C(26)-H(26B)	109.5
H(25A)-C(25)-H(25B)	109.5	H(26A)-C(26)-H(26B)	109.5
C(24)-C(25)-H(25C)	109.5	C(24)-C(26)-H(26C)	109.5
H(25A)-C(25)-H(25C)	109.5	H(26A)-C(26)-H(26C)	109.5
H(25B)-C(25)-H(25C)	109.5	H(26B)-C(26)-H(26C)	109.5

Tabelle 17.34 Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$). Der Exponent des anisotropen Temperaturfaktors ist definiert als: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Fe(1)	32(1)	23(1)	16(1)	-2(1)	8(1)	-5(1)
P(1)	20(1)	18(1)	15(1)	-1(1)	6(1)	0(1)
N(1L)	25(2)	35(2)	29(1)	2(1)	10(1)	1(1)
O(1L)	36(2)	48(2)	52(2)	28(1)	16(1)	13(1)
C(2L)	38(2)	28(2)	15(1)	2(1)	9(1)	4(2)
O(2L)	44(2)	46(2)	39(1)	6(1)	21(1)	13(1)
C(1)	20(2)	19(2)	20(1)	-2(1)	8(1)	2(1)
C(2)	25(2)	27(2)	19(1)	1(1)	6(1)	-1(1)
C(3)	30(2)	25(2)	24(1)	3(1)	12(1)	-3(1)
C(4)	20(2)	23(2)	29(1)	-6(1)	13(1)	0(1)
C(5)	19(2)	30(2)	26(1)	-1(1)	4(1)	2(1)
C(6)	23(2)	24(2)	20(1)	3(1)	6(1)	3(1)
C(7)	24(2)	37(2)	38(2)	-3(1)	13(1)	-5(2)
C(8)	19(2)	18(1)	16(1)	-2(1)	5(1)	-5(1)
C(9)	20(2)	24(2)	18(1)	-3(1)	7(1)	-2(1)
C(10)	21(2)	17(2)	24(1)	0(1)	6(1)	-1(1)
C(11)	26(2)	25(2)	20(1)	4(1)	4(1)	-6(1)
C(12)	29(2)	24(2)	21(1)	0(1)	14(1)	-5(1)
C(13)	23(2)	19(2)	22(1)	-3(1)	10(1)	-2(1)
C(14)	46(2)	33(2)	31(2)	12(1)	14(2)	1(2)
C(15)	18(2)	20(2)	16(1)	0(1)	4(1)	-1(1)
C(16)	25(2)	32(2)	26(2)	-5(1)	5(1)	-3(1)
C(17)	15(2)	43(2)	34(2)	-1(1)	5(1)	1(2)
C(18)	25(2)	27(2)	32(2)	3(1)	16(1)	4(1)
C(19)	25(2)	22(2)	29(2)	-3(1)	10(1)	2(1)
C(20)	19(2)	21(2)	27(2)	-1(1)	5(1)	2(1)
C(21)	34(2)	44(2)	54(2)	-4(2)	21(2)	12(2)
C(22)	54(2)	31(2)	41(2)	-2(2)	20(2)	-19(2)
C(23)	62(3)	28(2)	38(2)	2(2)	18(2)	-11(2)
C(24)	69(3)	39(2)	25(2)	-8(1)	14(2)	-22(2)
C(25)	72(3)	46(3)	45(2)	-10(2)	3(2)	-18(2)
C(26)	109(4)	27(2)	35(2)	-6(2)	22(2)	-5(2)

Tabelle 17.35 Lageparameter der Wasserstoffatome ($\times 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \times 10^3$)

	x	y	z	U(eq)
H(2)	1442	3942	4914	29
H(3)	1942	5878	5056	31
H(5)	2503	3951	7114	31
H(6)	2001	2025	6983	27
H(7A)	2611	6739	5717	48
H(7B)	2837	5971	6534	48
H(7C)	2533	7521	6433	48
H(9)	1722	-1557	6192	24
H(10)	1944	-3406	7214	25
H(12)	1326	-758	8250	28
H(13)	1099	1093	7230	25
H(14A)	1784	-2889	8956	55
H(14B)	2096	-3645	8617	55
H(14C)	1679	-4541	8410	55
H(16)	413	2029	5286	34
H(17)	2	3932	5593	38
H(19)	914	6272	7100	30
H(20)	1328	4361	6812	28
H(21A)	283	7136	7041	63
H(21B)	-81	5973	6578	63
H(21C)	70	7478	6164	63
H(22A)	474	-417	4818	49
H(22B)	656	-1542	5598	49
H(23)	984	-3303	5025	51
H(25A)	307	-2685	3118	88
H(25B)	485	-827	3033	88
H(25C)	252	-1066	3603	88
H(26A)	1284	-3542	4130	86
H(26B)	1151	-2438	3369	86
H(26C)	922	-4171	3431	86

Tabelle 17.36 Torsionswinkel [°]

N(1L)-Fe(1)-P(1)-C(15)	46.69(13)	C(23)-Fe(1)-P(1)-C(1)	142.30(15)
C(2L)-Fe(1)-P(1)-C(15)	159.94(14)	C(24)-Fe(1)-P(1)-C(1)	139.1(3)
C(23)-Fe(1)-P(1)-C(15)	-99.86(15)	C(22)-Fe(1)-P(1)-C(1)	171.58(14)
C(24)-Fe(1)-P(1)-C(15)	-103.1(3)	C(2L)-Fe(1)-N(1L)-O(1L)	11.5(10)
C(22)-Fe(1)-P(1)-C(15)	-70.59(14)	C(23)-Fe(1)-N(1L)-O(1L)	-112.4(10)
N(1L)-Fe(1)-P(1)-C(8)	170.11(13)	C(24)-Fe(1)-N(1L)-O(1L)	-85.3(10)
C(2L)-Fe(1)-P(1)-C(8)	-76.63(13)	C(22)-Fe(1)-N(1L)-O(1L)	-155.4(10)
C(23)-Fe(1)-P(1)-C(8)	23.56(16)	P(1)-Fe(1)-N(1L)-O(1L)	108.4(10)
C(24)-Fe(1)-P(1)-C(8)	20.3(3)	N(1L)-Fe(1)-C(2L)-O(2L)	26(3)
C(22)-Fe(1)-P(1)-C(8)	52.83(14)	C(23)-Fe(1)-C(2L)-O(2L)	165(3)
N(1L)-Fe(1)-P(1)-C(1)	-71.15(13)	C(24)-Fe(1)-C(2L)-O(2L)	126(3)
C(2L)-Fe(1)-P(1)-C(1)	42.11(14)	C(22)-Fe(1)-C(2L)-O(2L)	-170(3)

P(1)-Fe(1)-C(2L)-O(2L)	-82(3)	C(18)-C(19)-C(20)-C(15)	0.0(4)
C(15)-P(1)-C(1)-C(2)	-78.8(2)	C(16)-C(15)-C(20)-C(19)	0.7(4)
C(8)-P(1)-C(1)-C(2)	173.3(2)	P(1)-C(15)-C(20)-C(19)	-179.0(2)
Fe(1)-P(1)-C(1)-C(2)	48.1(2)	N(1L)-Fe(1)-C(22)-C(23)	120.2(2)
C(15)-P(1)-C(1)-C(6)	97.7(2)	C(2L)-Fe(1)-C(22)-C(23)	-44.0(3)
C(8)-P(1)-C(1)-C(6)	-10.2(3)	C(24)-Fe(1)-C(22)-C(23)	31.8(2)
Fe(1)-P(1)-C(1)-C(6)	-135.4(2)	P(1)-Fe(1)-C(22)-C(23)	-132.5(2)
C(6)-C(1)-C(2)-C(3)	-1.5(4)	Fe(1)-C(22)-C(23)-C(24)	-59.2(3)
P(1)-C(1)-C(2)-C(3)	175.2(2)	N(1L)-Fe(1)-C(23)-C(22)	-84.0(2)
C(1)-C(2)-C(3)-C(4)	0.2(4)	C(2L)-Fe(1)-C(23)-C(22)	147.1(2)
C(2)-C(3)-C(4)-C(5)	1.5(4)	C(24)-Fe(1)-C(23)-C(22)	-129.3(3)
C(2)-C(3)-C(4)-C(7)	-177.7(3)	P(1)-Fe(1)-C(23)-C(22)	53.0(2)
C(3)-C(4)-C(5)-C(6)	-1.8(4)	N(1L)-Fe(1)-C(23)-C(24)	45.3(3)
C(7)-C(4)-C(5)-C(6)	177.3(3)	C(2L)-Fe(1)-C(23)-C(24)	-83.6(2)
C(4)-C(5)-C(6)-C(1)	0.6(4)	C(22)-Fe(1)-C(23)-C(24)	129.3(3)
C(2)-C(1)-C(6)-C(5)	1.1(4)	P(1)-Fe(1)-C(23)-C(24)	-177.6(2)
P(1)-C(1)-C(6)-C(5)	-175.4(2)	C(22)-C(23)-C(24)-C(25)	-40.4(5)
C(15)-P(1)-C(8)-C(9)	179.0(2)	Fe(1)-C(23)-C(24)-C(25)	-100.2(3)
C(1)-P(1)-C(8)-C(9)	-75.4(2)	C(22)-C(23)-C(24)-C(26)	172.0(3)
Fe(1)-P(1)-C(8)-C(9)	48.9(2)	Fe(1)-C(23)-C(24)-C(26)	112.2(3)
C(15)-P(1)-C(8)-C(13)	-1.9(3)	C(22)-C(23)-C(24)-Fe(1)	59.8(3)
C(1)-P(1)-C(8)-C(13)	103.6(2)	N(1L)-Fe(1)-C(24)-C(23)	-146.1(2)
Fe(1)-P(1)-C(8)-C(13)	-132.1(2)	C(2L)-Fe(1)-C(24)-C(23)	100.9(2)
C(13)-C(8)-C(9)-C(10)	-1.3(4)	C(22)-Fe(1)-C(24)-C(23)	-30.6(2)
P(1)-C(8)-C(9)-C(10)	177.8(2)	P(1)-Fe(1)-C(24)-C(23)	4.7(4)
C(8)-C(9)-C(10)-C(11)	-0.4(4)	N(1L)-Fe(1)-C(24)-C(25)	-26.2(3)
C(9)-C(10)-C(11)-C(12)	1.9(4)	C(2L)-Fe(1)-C(24)-C(25)	-139.3(3)
C(9)-C(10)-C(11)-C(14)	-178.8(3)	C(23)-Fe(1)-C(24)-C(25)	119.9(4)
C(10)-C(11)-C(12)-C(13)	-1.8(4)	C(22)-Fe(1)-C(24)-C(25)	89.3(3)
C(14)-C(11)-C(12)-C(13)	178.9(3)	P(1)-Fe(1)-C(24)-C(25)	124.5(2)
C(11)-C(12)-C(13)-C(8)	0.1(4)	N(1L)-Fe(1)-C(24)-C(26)	105.7(3)
C(9)-C(8)-C(13)-C(12)	1.4(4)	C(2L)-Fe(1)-C(24)-C(26)	-7.3(3)
P(1)-C(8)-C(13)-C(12)	-177.7(2)	C(23)-Fe(1)-C(24)-C(26)	-108.2(4)
C(8)-P(1)-C(15)-C(16)	-106.1(2)	C(22)-Fe(1)-C(24)-C(26)	-138.7(3)
C(1)-P(1)-C(15)-C(16)	146.8(2)	P(1)-Fe(1)-C(24)-C(26)	-103.5(3)
Fe(1)-P(1)-C(15)-C(16)	22.6(3)		
C(8)-P(1)-C(15)-C(20)	73.5(2)		
C(1)-P(1)-C(15)-C(20)	-33.5(2)		
Fe(1)-P(1)-C(15)-C(20)	-157.78(19)		
C(20)-C(15)-C(16)-C(17)	-1.1(4)		
P(1)-C(15)-C(16)-C(17)	178.5(2)		
C(15)-C(16)-C(17)-C(18)	0.9(5)		
C(16)-C(17)-C(18)-C(19)	-0.2(4)		
C(16)-C(17)-C(18)-C(21)	178.0(3)		
C(17)-C(18)-C(19)-C(20)	-0.2(4)		
C(21)-C(18)-C(19)-C(20)	-178.4(3)		

17.7 Röntgenstrukturdaten von 354

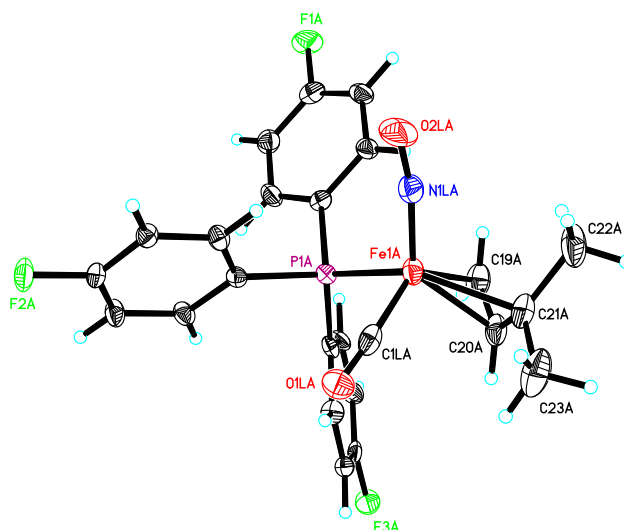


Abb. 17.7 Übersichtszeichnung der Kristallstruktur von 354

Tabelle 17.37 Kristalldaten und Strukturverfeinerung

Empirische Formel	C ₂₄ H ₂₁ F ₃ Fe N O ₂ P
Formelgewicht	499.24 g/mol
Temperatur	100(2) K
Wellenlänge	0.71073 Å
Kristallsystem	monoklin, P2(1)/c
Gitterkonstante	a = 12.6844(11) Å α = 90° b = 28.748(3) Å β = 100.614(6)° c = 12.4324(12) Å γ = 90°
Volumen	4455.9(7) Å ³
Z	8
Dichte (errechnet)	1.488 Mg·m ⁻³
Absorptionskoeffizient	0.795 mm ⁻¹
F(000)	2048
Kristallgröße	0.18 x 0.09 x 0.07 mm ³
Theta-Bereich für Datensammlung	1.42 bis 26.50°
Bereich für Indizes	-13 ≤ h ≤ 15, -35 ≤ k ≤ 36, -15 ≤ l ≤ 15
Gesammelte/unabhängige Reflexe	58055 / 8835 [R(int) = 0.1100]
Vervollständigung für theta = 26.50	95.7 %
Max. und min. Transmission	0.7454 und 0.6496
Verfeinerungsmethode	Full-matrix least-squares on F ²
Daten/Einschränkung/Parameter	8835 / 0 / 581
Goodness-of-fit on F ²	1.032
Abschließende R Indizes [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0643, wR2 = 0.0941
R Indizes (alle Daten)	R1 = 0.1455, wR2 = 0.1073
Restelektronendichte	0.796 und -0.567 eÅ ⁻³

Tabelle 17.38 Lageparameter ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{Å}^2 \cdot 10^3$), $U(\text{eq})$ ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors

	x	y	z	U(eq)
Fe(1A)	3450(1)	1965(1)	3302(1)	22(1)
C(1LA)	4372(3)	1962(1)	4553(4)	24(1)
O(1LA)	4935(2)	1954(1)	5396(2)	30(1)
N(1LA)	2237(3)	2126(1)	3452(3)	27(1)
O(2LA)	1430(2)	2220(1)	3768(3)	45(1)
P(1A)	3435(1)	1196(1)	3259(1)	17(1)
C(1A)	2277(3)	931(1)	2369(3)	17(1)
C(2A)	1502(3)	1221(1)	1774(3)	21(1)
C(3A)	583(3)	1034(2)	1146(3)	24(1)
C(4A)	459(3)	561(2)	1107(3)	25(1)
C(5A)	1215(3)	266(2)	1670(3)	26(1)
C(6A)	2122(3)	452(1)	2303(3)	24(1)
F(1A)	-448(2)	382(1)	510(2)	36(1)
C(7A)	3372(3)	912(1)	4558(3)	16(1)
C(8A)	2756(3)	1120(1)	5242(3)	18(1)
C(9A)	2653(3)	919(1)	6219(3)	18(1)
C(10A)	3185(3)	512(1)	6529(3)	20(1)
C(11A)	3795(3)	292(1)	5879(3)	24(1)
C(12A)	3894(3)	495(1)	4893(3)	21(1)
F(2A)	3099(2)	315(1)	7491(2)	31(1)
C(13A)	4625(3)	944(1)	2848(3)	16(1)
C(14A)	5625(3)	1078(1)	3441(3)	22(1)
C(15A)	6567(3)	953(1)	3094(3)	21(1)
C(16A)	6481(3)	702(1)	2147(3)	19(1)
C(17A)	5531(3)	558(1)	1552(3)	22(1)
C(18A)	4599(3)	684(1)	1914(3)	21(1)
F(3A)	7408(2)	594(1)	1796(2)	29(1)
C(19A)	3700(4)	1915(1)	1620(3)	31(1)
C(20A)	4440(4)	2198(2)	2255(3)	29(1)
C(21A)	4122(3)	2600(2)	2757(3)	30(1)
C(22A)	3215(4)	2899(2)	2185(4)	47(1)
C(23A)	4964(4)	2860(2)	3528(4)	53(2)
Fe(1B)	8706(1)	2192(1)	6493(1)	24(1)
C(1LB)	7770(3)	2054(1)	5316(4)	23(1)
O(1LB)	7191(2)	1959(1)	4506(2)	29(1)
N(1LB)	9823(3)	2426(1)	6231(3)	31(1)
O(2LB)	10523(3)	2612(1)	5873(3)	52(1)
P(1B)	8942(1)	1442(1)	6858(1)	18(1)
C(1B)	7863(3)	1179(1)	7447(3)	18(1)
C(2B)	6828(3)	1197(1)	6845(3)	23(1)
C(3B)	5963(3)	1025(1)	7259(3)	28(1)
C(4B)	6161(3)	834(2)	8280(4)	30(1)
C(5B)	7156(3)	809(2)	8909(4)	33(1)
C(6B)	8016(3)	987(1)	8482(3)	25(1)
F(1B)	5320(2)	656(1)	8688(2)	48(1)

C(7B)	10169(3)	1277(1)	7800(3)	20(1)
C(8B)	10474(3)	811(2)	7948(3)	24(1)
C(9B)	11407(3)	684(2)	8639(3)	31(1)
C(10B)	12048(3)	1034(2)	9152(3)	33(1)
C(11B)	11774(3)	1492(2)	9046(3)	37(1)
C(12B)	10828(3)	1616(2)	8356(3)	28(1)
F(2B)	12978(2)	916(1)	9811(2)	53(1)
C(13B)	9028(3)	1060(1)	5697(3)	16(1)
C(14B)	8619(3)	614(1)	5605(3)	20(1)
C(15B)	8779(3)	322(1)	4757(3)	22(1)
C(16B)	9345(3)	492(2)	4012(3)	24(1)
C(17B)	9766(3)	934(1)	4065(3)	23(1)
C(18B)	9597(3)	1218(1)	4915(3)	21(1)
F(3B)	9507(2)	210(1)	3182(2)	36(1)
C(19B)	8555(4)	2261(2)	8194(4)	41(1)
C(20B)	7694(4)	2444(2)	7493(4)	38(1)
C(21B)	7841(3)	2818(2)	6779(4)	31(1)
C(22B)	8633(4)	3200(2)	7097(4)	52(2)
C(23B)	6881(3)	2972(2)	5959(4)	41(1)

Tabelle 17.39 Bindungslängen [Å] und Bindungswinkel [°]

Fe(1A)-N(1LA)	1.650(3)	C(8A)-C(9A)	1.372(5)
Fe(1A)-C(1LA)	1.766(5)	C(8A)-H(8A)	0.9500
Fe(1A)-C(20A)	2.079(4)	C(9A)-C(10A)	1.371(5)
Fe(1A)-C(21A)	2.175(4)	C(9A)-H(9A)	0.9500
Fe(1A)-C(19A)	2.177(4)	C(10A)-F(2A)	1.346(4)
Fe(1A)-P(1A)	2.2096(12)	C(10A)-C(11A)	1.371(5)
C(1LA)-O(1LA)	1.154(5)	C(11A)-C(12A)	1.385(5)
N(1LA)-O(2LA)	1.193(4)	C(11A)-H(11A)	0.9500
P(1A)-C(7A)	1.825(4)	C(12A)-H(12A)	0.9500
P(1A)-C(13A)	1.831(4)	C(13A)-C(18A)	1.376(5)
P(1A)-C(1A)	1.834(4)	C(13A)-C(14A)	1.398(5)
C(1A)-C(2A)	1.393(5)	C(14A)-C(15A)	1.390(5)
C(1A)-C(6A)	1.393(5)	C(14A)-H(14A)	0.9500
C(2A)-C(3A)	1.386(5)	C(15A)-C(16A)	1.369(5)
C(2A)-H(2A)	0.9500	C(15A)-H(15A)	0.9500
C(3A)-C(4A)	1.367(5)	C(16A)-C(17A)	1.358(5)
C(3A)-H(3A)	0.9500	C(16A)-F(3A)	1.364(4)
C(4A)-F(1A)	1.351(4)	C(17A)-C(18A)	1.389(5)
C(4A)-C(5A)	1.372(5)	C(17A)-H(17A)	0.9500
C(5A)-C(6A)	1.377(5)	C(18A)-H(18A)	0.9500
C(5A)-H(5A)	0.9500	C(19A)-C(20A)	1.375(6)
C(6A)-H(6A)	0.9500	C(19A)-H(19A)	0.9500
C(7A)-C(8A)	1.391(5)	C(19A)-H(19B)	0.9500
C(7A)-C(12A)	1.395(5)	C(20A)-C(21A)	1.408(6)

C(20A)-H(20A)	0.9500	C(15B)-C(16B)	1.363(5)
C(21A)-C(23A)	1.497(6)	C(15B)-H(15B)	0.9500
C(21A)-C(22A)	1.506(6)	C(16B)-F(3B)	1.358(4)
C(22A)-H(22A)	0.9800	C(16B)-C(17B)	1.374(5)
C(22A)-H(22B)	0.9800	C(17B)-C(18B)	1.382(5)
C(22A)-H(22C)	0.9800	C(17B)-H(17B)	0.9500
C(23A)-H(23A)	0.9800	C(18B)-H(18B)	0.9500
C(23A)-H(23B)	0.9800	C(19B)-C(20B)	1.370(6)
C(23A)-H(23C)	0.9800	C(19B)-H(19C)	0.9500
Fe(1B)-N(1LB)	1.654(4)	C(19B)-H(19D)	0.9500
Fe(1B)-C(1LB)	1.751(5)	C(20B)-C(21B)	1.428(6)
Fe(1B)-C(20B)	2.074(4)	C(20B)-H(20B)	0.9500
Fe(1B)-C(19B)	2.167(4)	C(21B)-C(22B)	1.491(6)
Fe(1B)-C(21B)	2.170(4)	C(21B)-C(23B)	1.504(6)
Fe(1B)-P(1B)	2.2140(12)	C(22B)-H(22D)	0.9800
C(1LB)-O(1LB)	1.165(5)	C(22B)-H(22E)	0.9800
N(1LB)-O(2LB)	1.191(4)	C(22B)-H(22F)	0.9800
P(1B)-C(7B)	1.830(4)	C(23B)-H(23D)	0.9800
P(1B)-C(1B)	1.830(4)	C(23B)-H(23E)	0.9800
P(1B)-C(13B)	1.833(4)	C(23B)-H(23F)	0.9800
C(1B)-C(6B)	1.380(5)		
C(1B)-C(2B)	1.388(5)	N(1LA)-Fe(1A)-C(1LA)	112.48(17)
C(2B)-C(3B)	1.386(5)	N(1LA)-Fe(1A)-C(20A)	131.58(17)
C(2B)-H(2B)	0.9500	C(1LA)-Fe(1A)-C(20A)	100.06(18)
C(3B)-C(4B)	1.363(6)	N(1LA)-Fe(1A)-C(21A)	103.12(16)
C(3B)-H(3B)	0.9500	C(1LA)-Fe(1A)-C(21A)	92.51(17)
C(4B)-C(5B)	1.358(6)	C(20A)-Fe(1A)-C(21A)	38.57(15)
C(4B)-F(1B)	1.363(4)	N(1LA)-Fe(1A)-C(19A)	115.52(17)
C(5B)-C(6B)	1.395(5)	C(1LA)-Fe(1A)-C(19A)	130.98(18)
C(5B)-H(5B)	0.9500	C(20A)-Fe(1A)-C(19A)	37.61(15)
C(6B)-H(6B)	0.9500	C(21A)-Fe(1A)-C(19A)	67.76(15)
C(7B)-C(12B)	1.384(5)	N(1LA)-Fe(1A)-P(1A)	106.20(12)
C(7B)-C(8B)	1.397(5)	C(1LA)-Fe(1A)-P(1A)	91.05(13)
C(8B)-C(9B)	1.377(5)	C(20A)-Fe(1A)-P(1A)	108.07(12)
C(8B)-H(8B)	0.9500	C(21A)-Fe(1A)-P(1A)	146.47(12)
C(9B)-C(10B)	1.373(6)	C(19A)-Fe(1A)-P(1A)	85.00(11)
C(9B)-H(9B)	0.9500	O(1LA)-C(1LA)-Fe(1A)	176.7(4)
C(10B)-F(2B)	1.350(5)	O(2LA)-N(1LA)-Fe(1A)	167.2(3)
C(10B)-C(11B)	1.363(6)	C(7A)-P(1A)-C(13A)	104.01(17)
C(11B)-C(12B)	1.386(6)	C(7A)-P(1A)-C(1A)	100.77(17)
C(11B)-H(11B)	0.9500	C(13A)-P(1A)-C(1A)	106.06(17)
C(12B)-H(12B)	0.9500	C(7A)-P(1A)-Fe(1A)	115.37(13)
C(13B)-C(14B)	1.380(5)	C(13A)-P(1A)-Fe(1A)	113.52(13)
C(13B)-C(18B)	1.389(5)	C(1A)-P(1A)-Fe(1A)	115.63(13)
C(14B)-C(15B)	1.390(5)	C(2A)-C(1A)-C(6A)	118.9(3)
C(14B)-H(14B)	0.9500	C(2A)-C(1A)-P(1A)	118.7(3)

C(6A)-C(1A)-P(1A)	122.4(3)	C(16A)-C(17A)-C(18A)	117.8(4)
C(3A)-C(2A)-C(1A)	120.4(4)	C(16A)-C(17A)-H(17A)	121.1
C(3A)-C(2A)-H(2A)	119.8	C(18A)-C(17A)-H(17A)	121.1
C(1A)-C(2A)-H(2A)	119.8	C(13A)-C(18A)-C(17A)	121.7(4)
C(4A)-C(3A)-C(2A)	119.0(4)	C(13A)-C(18A)-H(18A)	119.1
C(4A)-C(3A)-H(3A)	120.5	C(17A)-C(18A)-H(18A)	119.1
C(2A)-C(3A)-H(3A)	120.5	C(20A)-C(19A)-Fe(1A)	67.3(2)
F(1A)-C(4A)-C(3A)	118.7(4)	C(20A)-C(19A)-H(19A)	120.0
F(1A)-C(4A)-C(5A)	119.2(4)	Fe(1A)-C(19A)-H(19A)	78.7
C(3A)-C(4A)-C(5A)	122.1(4)	C(20A)-C(19A)-H(19B)	120.0
C(4A)-C(5A)-C(6A)	118.9(4)	Fe(1A)-C(19A)-H(19B)	125.6
C(4A)-C(5A)-H(5A)	120.5	H(19A)-C(19A)-H(19B)	120.0
C(6A)-C(5A)-H(5A)	120.5	C(19A)-C(20A)-C(21A)	121.3(4)
C(5A)-C(6A)-C(1A)	120.7(4)	C(19A)-C(20A)-Fe(1A)	75.1(2)
C(5A)-C(6A)-H(6A)	119.6	C(21A)-C(20A)-Fe(1A)	74.4(2)
C(1A)-C(6A)-H(6A)	119.6	C(19A)-C(20A)-H(20A)	119.3
C(8A)-C(7A)-C(12A)	118.4(3)	C(21A)-C(20A)-H(20A)	119.3
C(8A)-C(7A)-P(1A)	118.0(3)	Fe(1A)-C(20A)-H(20A)	122.5
C(12A)-C(7A)-P(1A)	123.6(3)	C(20A)-C(21A)-C(23A)	117.8(4)
C(9A)-C(8A)-C(7A)	121.1(4)	C(20A)-C(21A)-C(22A)	121.0(4)
C(9A)-C(8A)-H(8A)	119.5	C(23A)-C(21A)-C(22A)	114.1(4)
C(7A)-C(8A)-H(8A)	119.5	C(20A)-C(21A)-Fe(1A)	67.0(2)
C(10A)-C(9A)-C(8A)	119.1(4)	C(23A)-C(21A)-Fe(1A)	119.7(3)
C(10A)-C(9A)-H(9A)	120.5	C(22A)-C(21A)-Fe(1A)	108.5(3)
C(8A)-C(9A)-H(9A)	120.5	C(21A)-C(22A)-H(22A)	109.5
F(2A)-C(10A)-C(11A)	118.5(3)	C(21A)-C(22A)-H(22B)	109.5
F(2A)-C(10A)-C(9A)	119.5(3)	H(22A)-C(22A)-H(22B)	109.5
C(11A)-C(10A)-C(9A)	121.9(4)	C(21A)-C(22A)-H(22C)	109.5
C(10A)-C(11A)-C(12A)	118.8(4)	H(22A)-C(22A)-H(22C)	109.5
C(10A)-C(11A)-H(11A)	120.6	H(22B)-C(22A)-H(22C)	109.5
C(12A)-C(11A)-H(11A)	120.6	C(21A)-C(23A)-H(23A)	109.5
C(11A)-C(12A)-C(7A)	120.7(4)	C(21A)-C(23A)-H(23B)	109.5
C(11A)-C(12A)-H(12A)	119.7	H(23A)-C(23A)-H(23B)	109.5
C(7A)-C(12A)-H(12A)	119.7	C(21A)-C(23A)-H(23C)	109.5
C(18A)-C(13A)-C(14A)	118.2(3)	H(23A)-C(23A)-H(23C)	109.5
C(18A)-C(13A)-P(1A)	123.9(3)	H(23B)-C(23A)-H(23C)	109.5
C(14A)-C(13A)-P(1A)	117.2(3)	N(1LB)-Fe(1B)-C(1LB)	113.69(17)
C(15A)-C(14A)-C(13A)	120.9(4)	N(1LB)-Fe(1B)-C(20B)	128.51(18)
C(15A)-C(14A)-H(14A)	119.6	C(1LB)-Fe(1B)-C(20B)	100.43(19)
C(13A)-C(14A)-H(14A)	119.6	N(1LB)-Fe(1B)-C(19B)	112.80(18)
C(16A)-C(15A)-C(14A)	117.8(4)	C(1LB)-Fe(1B)-C(19B)	131.87(18)
C(16A)-C(15A)-H(15A)	121.1	C(20B)-Fe(1B)-C(19B)	37.60(17)
C(14A)-C(15A)-H(15A)	121.1	N(1LB)-Fe(1B)-C(21B)	99.92(17)
C(17A)-C(16A)-F(3A)	119.2(4)	C(1LB)-Fe(1B)-C(21B)	92.28(17)
C(17A)-C(16A)-C(15A)	123.5(4)	C(20B)-Fe(1B)-C(21B)	39.25(17)
F(3A)-C(16A)-C(15A)	117.3(3)	C(19B)-Fe(1B)-C(21B)	68.06(17)

N(1LB)-Fe(1B)-P(1B)	110.38(13)	C(7B)-C(12B)-C(11B)	120.1(4)
C(1LB)-Fe(1B)-P(1B)	89.77(13)	C(7B)-C(12B)-H(12B)	119.9
C(20B)-Fe(1B)-P(1B)	106.97(14)	C(11B)-C(12B)-H(12B)	119.9
C(19B)-Fe(1B)-P(1B)	85.47(13)	C(14B)-C(13B)-C(18B)	118.7(4)
C(21B)-Fe(1B)-P(1B)	145.84(12)	C(14B)-C(13B)-P(1B)	123.1(3)
O(1LB)-C(1LB)-Fe(1B)	176.5(4)	C(18B)-C(13B)-P(1B)	118.1(3)
O(2LB)-N(1LB)-Fe(1B)	168.7(3)	C(13B)-C(14B)-C(15B)	121.2(4)
C(7B)-P(1B)-C(1B)	104.34(18)	C(13B)-C(14B)-H(14B)	119.4
C(7B)-P(1B)-C(13B)	100.48(17)	C(15B)-C(14B)-H(14B)	119.4
C(1B)-P(1B)-C(13B)	103.00(17)	C(16B)-C(15B)-C(14B)	118.0(4)
C(7B)-P(1B)-Fe(1B)	116.79(14)	C(16B)-C(15B)-H(15B)	121.0
C(1B)-P(1B)-Fe(1B)	113.72(13)	C(14B)-C(15B)-H(15B)	121.0
C(13B)-P(1B)-Fe(1B)	116.57(13)	F(3B)-C(16B)-C(15B)	118.4(4)
C(6B)-C(1B)-C(2B)	118.3(3)	F(3B)-C(16B)-C(17B)	118.5(4)
C(6B)-C(1B)-P(1B)	123.4(3)	C(15B)-C(16B)-C(17B)	123.1(4)
C(2B)-C(1B)-P(1B)	118.2(3)	C(16B)-C(17B)-C(18B)	118.0(4)
C(3B)-C(2B)-C(1B)	121.4(4)	C(16B)-C(17B)-H(17B)	121.0
C(3B)-C(2B)-H(2B)	119.3	C(18B)-C(17B)-H(17B)	121.0
C(1B)-C(2B)-H(2B)	119.3	C(17B)-C(18B)-C(13B)	121.0(4)
C(4B)-C(3B)-C(2B)	117.9(4)	C(17B)-C(18B)-H(18B)	119.5
C(4B)-C(3B)-H(3B)	121.1	C(13B)-C(18B)-H(18B)	119.5
C(2B)-C(3B)-H(3B)	121.1	C(20B)-C(19B)-Fe(1B)	67.5(3)
C(5B)-C(4B)-F(1B)	118.3(4)	C(20B)-C(19B)-H(19C)	120.0
C(5B)-C(4B)-C(3B)	123.3(4)	Fe(1B)-C(19B)-H(19C)	78.4
F(1B)-C(4B)-C(3B)	118.4(4)	C(20B)-C(19B)-H(19D)	120.0
C(4B)-C(5B)-C(6B)	118.1(4)	Fe(1B)-C(19B)-H(19D)	125.6
C(4B)-C(5B)-H(5B)	120.9	H(19C)-C(19B)-H(19D)	120.0
C(6B)-C(5B)-H(5B)	120.9	C(19B)-C(20B)-C(21B)	120.3(4)
C(1B)-C(6B)-C(5B)	121.0(4)	C(19B)-C(20B)-Fe(1B)	74.9(3)
C(1B)-C(6B)-H(6B)	119.5	C(21B)-C(20B)-Fe(1B)	74.0(2)
C(5B)-C(6B)-H(6B)	119.5	C(19B)-C(20B)-H(20B)	119.8
C(12B)-C(7B)-C(8B)	118.9(4)	C(21B)-C(20B)-H(20B)	119.8
C(12B)-C(7B)-P(1B)	120.1(3)	Fe(1B)-C(20B)-H(20B)	122.6
C(8B)-C(7B)-P(1B)	121.0(3)	C(20B)-C(21B)-C(22B)	123.3(4)
C(9B)-C(8B)-C(7B)	121.4(4)	C(20B)-C(21B)-C(23B)	117.5(4)
C(9B)-C(8B)-H(8B)	119.3	C(22B)-C(21B)-C(23B)	112.6(4)
C(7B)-C(8B)-H(8B)	119.3	C(20B)-C(21B)-Fe(1B)	66.8(2)
C(10B)-C(9B)-C(8B)	117.6(4)	C(22B)-C(21B)-Fe(1B)	108.5(3)
C(10B)-C(9B)-H(9B)	121.2	C(23B)-C(21B)-Fe(1B)	120.2(3)
C(8B)-C(9B)-H(9B)	121.2	C(21B)-C(22B)-H(22D)	109.5
F(2B)-C(10B)-C(11B)	118.7(4)	C(21B)-C(22B)-H(22E)	109.5
F(2B)-C(10B)-C(9B)	118.4(5)	H(22D)-C(22B)-H(22E)	109.5
C(11B)-C(10B)-C(9B)	122.9(4)	C(21B)-C(22B)-H(22F)	109.5
C(10B)-C(11B)-C(12B)	119.0(4)	H(22D)-C(22B)-H(22F)	109.5
C(10B)-C(11B)-H(11B)	120.5	H(22E)-C(22B)-H(22F)	109.5
C(12B)-C(11B)-H(11B)	120.5	C(21B)-C(23B)-H(23D)	109.5

C(21B)-C(23B)-H(23E)	109.5	H(23D)-C(23B)-H(23F)	109.5
H(23D)-C(23B)-H(23E)	109.5	H(23E)-C(23B)-H(23F)	109.5
C(21B)-C(23B)-H(23F)	109.5		

Tabelle 17.40 Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$). Der Exponent des anisotropen Temperaturfaktors ist definiert als: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Fe(1A)	26(1)	17(1)	24(1)	3(1)	7(1)	2(1)
C(1LA)	30(3)	10(2)	35(3)	-1(2)	19(2)	2(2)
O(1LA)	30(2)	34(2)	25(2)	-3(2)	0(2)	0(1)
N(1LA)	29(2)	21(2)	32(2)	4(2)	7(2)	2(2)
O(2LA)	31(2)	56(2)	52(2)	8(2)	16(2)	21(2)
P(1A)	17(1)	17(1)	17(1)	2(1)	2(1)	1(1)
C(1A)	17(2)	22(2)	13(2)	-3(2)	3(2)	-3(2)
C(2A)	18(2)	24(2)	21(2)	2(2)	5(2)	4(2)
C(3A)	19(2)	35(3)	17(2)	4(2)	2(2)	6(2)
C(4A)	20(2)	40(3)	13(2)	-3(2)	2(2)	-7(2)
C(5A)	26(2)	27(3)	24(3)	2(2)	2(2)	-5(2)
C(6A)	24(2)	25(3)	20(3)	5(2)	0(2)	5(2)
F(1A)	23(1)	49(2)	31(2)	-4(1)	-7(1)	-9(1)
C(7A)	17(2)	16(2)	13(2)	-1(2)	-2(2)	-3(2)
C(8A)	23(2)	12(2)	18(2)	-1(2)	2(2)	1(2)
C(9A)	20(2)	13(2)	21(2)	0(2)	5(2)	0(2)
C(10A)	21(2)	24(3)	16(2)	5(2)	6(2)	-1(2)
C(11A)	29(2)	20(2)	24(3)	8(2)	12(2)	9(2)
C(12A)	22(2)	21(3)	20(3)	4(2)	6(2)	8(2)
F(2A)	38(2)	31(2)	29(2)	16(1)	18(1)	7(1)
C(13A)	21(2)	12(2)	15(2)	3(2)	0(2)	3(2)
C(14A)	25(2)	21(2)	20(2)	-2(2)	7(2)	1(2)
C(15A)	17(2)	17(2)	28(3)	7(2)	2(2)	0(2)
C(16A)	23(2)	18(2)	20(3)	9(2)	11(2)	3(2)
C(17A)	25(2)	26(3)	16(2)	-1(2)	2(2)	4(2)
C(18A)	19(2)	23(2)	18(3)	5(2)	-6(2)	1(2)
F(3A)	25(1)	33(2)	31(2)	4(1)	13(1)	7(1)
C(19A)	46(3)	23(3)	28(3)	0(2)	16(2)	0(2)
C(20A)	38(3)	28(3)	26(3)	9(2)	14(2)	2(2)
C(21A)	40(3)	23(3)	29(3)	3(2)	15(2)	-4(2)
C(22A)	65(4)	26(3)	60(4)	17(2)	38(3)	18(2)
C(23A)	75(4)	31(3)	54(4)	2(3)	19(3)	-19(3)
Fe(1B)	33(1)	17(1)	23(1)	-3(1)	11(1)	-3(1)
C(1LB)	35(3)	9(2)	28(3)	2(2)	18(2)	0(2)
O(1LB)	32(2)	27(2)	27(2)	2(2)	2(2)	-3(1)
N(1LB)	33(2)	35(2)	26(2)	-7(2)	8(2)	-1(2)
O(2LB)	44(2)	66(3)	50(2)	-8(2)	21(2)	-23(2)
P(1B)	20(1)	19(1)	17(1)	-2(1)	4(1)	-3(1)
C(1B)	25(2)	14(2)	15(2)	-6(2)	3(2)	-4(2)

C(2B)	30(3)	20(2)	19(2)	2(2)	5(2)	-3(2)
C(3B)	20(2)	33(3)	29(3)	3(2)	0(2)	-1(2)
C(4B)	24(3)	37(3)	30(3)	1(2)	11(2)	-9(2)
C(5B)	35(3)	41(3)	26(3)	9(2)	12(2)	0(2)
C(6B)	22(2)	32(3)	20(3)	-3(2)	1(2)	-2(2)
F(1B)	33(2)	68(2)	46(2)	15(2)	18(1)	-13(1)
C(7B)	18(2)	31(3)	9(2)	0(2)	2(2)	-1(2)
C(8B)	22(2)	34(3)	18(3)	0(2)	9(2)	0(2)
C(9B)	25(3)	51(3)	19(3)	5(2)	9(2)	9(2)
C(10B)	24(3)	65(4)	11(3)	6(2)	3(2)	3(2)
C(11B)	32(3)	64(4)	13(3)	-1(2)	2(2)	-18(3)
C(12B)	35(3)	33(3)	15(2)	-3(2)	2(2)	-10(2)
F(2B)	29(2)	99(2)	27(2)	12(2)	-6(1)	3(2)
C(13B)	19(2)	18(2)	10(2)	-1(2)	3(2)	3(2)
C(14B)	23(2)	17(2)	18(2)	0(2)	0(2)	4(2)
C(15B)	21(2)	16(2)	26(3)	-7(2)	-4(2)	1(2)
C(16B)	22(2)	30(3)	17(3)	-5(2)	-4(2)	12(2)
C(17B)	24(2)	29(3)	16(2)	0(2)	3(2)	9(2)
C(18B)	23(2)	22(2)	18(2)	0(2)	3(2)	2(2)
F(3B)	40(2)	40(2)	25(2)	-14(1)	3(1)	13(1)
C(19B)	53(3)	42(3)	31(3)	-7(2)	14(3)	1(3)
C(20B)	42(3)	41(3)	36(3)	-19(3)	22(3)	-7(2)
C(21B)	36(3)	18(3)	43(3)	-11(2)	16(2)	-2(2)
C(22B)	44(3)	23(3)	90(4)	-21(3)	14(3)	-3(2)
C(23B)	40(3)	25(3)	62(3)	-7(2)	20(3)	3(2)

Tabelle 17.41 Lageparameter der Wasserstoffatome (* 10⁴) und isotrope Temperaturfaktoren (Å² * 10³)

	x	y	z	U(eq)
H(2A)	1603	1548	1799	25
H(3A)	48	1231	749	29
H(5A)	1114	-61	1623	31
H(6A)	2649	250	2700	28
H(8A)	2401	1405	5030	22
H(9A)	2218	1060	6673	21
H(11A)	4142	6	6101	28
H(12A)	4322	349	4439	25
H(14A)	5660	1257	4089	26
H(15A)	7248	1040	3501	25
H(17A)	5505	376	909	27
H(18A)	3925	589	1505	25
H(19A)	2959	1989	1513	38
H(19B)	3931	1645	1288	38
H(20A)	5179	2120	2356	35
H(22A)	3500	3141	1763	71
H(22B)	2852	3045	2729	71
H(22C)	2703	2706	1691	71

H(23A)	5573	2654	3787	79
H(23B)	4663	2970	4153	79
H(23C)	5207	3127	3147	79
H(2B)	6709	1330	6134	27
H(3B)	5255	1039	6845	33
H(5B)	7263	675	9619	40
H(6B)	8718	976	8911	30
H(8B)	10029	576	7564	29
H(9B)	11600	367	8757	37
H(11B)	12224	1723	9438	44
H(12B)	10632	1935	8265	33
H(14B)	8222	504	6130	24
H(15B)	8502	15	4699	27
H(17B)	10160	1041	3534	28
H(18B)	9875	1525	4965	25
H(19C)	9253	2382	8206	50
H(19D)	8453	2012	8667	50
H(20B)	6997	2321	7482	45
H(22D)	8294	3453	7436	78
H(22E)	8878	3316	6444	78
H(22F)	9248	3081	7619	78
H(23D)	6369	2715	5806	61
H(23E)	7111	3066	5280	61
H(23F)	6538	3236	6256	61

Tabelle 17.42 Torsionswinkel [°]

N(1LA)-Fe(1A)-C(1LA)-O(1LA)	33(6)	N(1LA)-Fe(1A)-P(1A)-C(1A)	46.50(19)
C(20A)-Fe(1A)-C(1LA)-O(1LA)	176(100)	C(1LA)-Fe(1A)-P(1A)-C(1A)	160.30(18)
C(21A)-Fe(1A)-C(1LA)-O(1LA)	138(6)	C(20A)-Fe(1A)-P(1A)-C(1A)	-98.76(18)
C(19A)-Fe(1A)-C(1LA)-O(1LA)	-160(6)	C(21A)-Fe(1A)-P(1A)-C(1A)	-103.5(3)
P(1A)-Fe(1A)-C(1LA)-O(1LA)	-76(6)	C(19A)-Fe(1A)-P(1A)-C(1A)	-68.64(18)
C(1LA)-Fe(1A)-N(1LA)-O(2LA)	-19.4(15)	C(7A)-P(1A)-C(1A)-C(2A)	126.0(3)
C(20A)-Fe(1A)-N(1LA)-O(2LA)	-147.7(14)	C(13A)-P(1A)-C(1A)-C(2A)	-125.8(3)
C(21A)-Fe(1A)-N(1LA)-O(2LA)	-117.7(14)	Fe(1A)-P(1A)-C(1A)-C(2A)	0.9(3)
C(19A)-Fe(1A)-N(1LA)-O(2LA)	170.9(14)	C(7A)-P(1A)-C(1A)-C(6A)	-51.2(3)
P(1A)-Fe(1A)-N(1LA)-O(2LA)	78.7(15)	C(13A)-P(1A)-C(1A)-C(6A)	57.0(3)
N(1LA)-Fe(1A)-P(1A)-C(7A)	-70.68(18)	Fe(1A)-P(1A)-C(1A)-C(6A)	-176.3(3)
C(1LA)-Fe(1A)-P(1A)-C(7A)	43.12(18)	C(6A)-C(1A)-C(2A)-C(3A)	1.3(5)
C(20A)-Fe(1A)-P(1A)-C(7A)	144.06(18)	P(1A)-C(1A)-C(2A)-C(3A)	-176.0(3)
C(21A)-Fe(1A)-P(1A)-C(7A)	139.3(2)	C(1A)-C(2A)-C(3A)-C(4A)	-1.0(6)
C(19A)-Fe(1A)-P(1A)-C(7A)	174.18(18)	C(2A)-C(3A)-C(4A)-F(1A)	178.7(3)
N(1LA)-Fe(1A)-P(1A)-C(13A)	169.41(18)	C(2A)-C(3A)-C(4A)-C(5A)	0.0(6)
C(1LA)-Fe(1A)-P(1A)-C(13A)	-76.78(18)	F(1A)-C(4A)-C(5A)-C(6A)	-178.0(3)
C(20A)-Fe(1A)-P(1A)-C(13A)	24.15(19)	C(3A)-C(4A)-C(5A)-C(6A)	0.7(6)
C(21A)-Fe(1A)-P(1A)-C(13A)	19.4(3)	C(4A)-C(5A)-C(6A)-C(1A)	-0.4(6)
C(19A)-Fe(1A)-P(1A)-C(13A)	54.27(18)	C(2A)-C(1A)-C(6A)-C(5A)	-0.6(6)

P(1A)-C(1A)-C(6A)-C(5A)	176.6(3)	C(19A)-C(20A)-C(21A)-C(23A)	173.7(4)
C(13A)-P(1A)-C(7A)-C(8A)	161.5(3)	Fe(1A)-C(20A)-C(21A)-C(23A)	112.6(4)
C(1A)-P(1A)-C(7A)-C(8A)	-88.8(3)	C(19A)-C(20A)-C(21A)-C(22A)	-37.3(6)
Fe(1A)-P(1A)-C(7A)-C(8A)	36.5(3)	Fe(1A)-C(20A)-C(21A)-C(22A)	-98.4(4)
C(13A)-P(1A)-C(7A)-C(12A)	-19.5(4)	C(19A)-C(20A)-C(21A)-Fe(1A)	61.1(4)
C(1A)-P(1A)-C(7A)-C(12A)	90.2(3)	N(1LA)-Fe(1A)-C(21A)-C(20A)	-143.2(3)
Fe(1A)-P(1A)-C(7A)-C(12A)	-144.5(3)	C(1LA)-Fe(1A)-C(21A)-C(20A)	103.0(3)
C(12A)-C(7A)-C(8A)-C(9A)	-0.6(5)	C(19A)-Fe(1A)-C(21A)-C(20A)	-30.7(3)
P(1A)-C(7A)-C(8A)-C(9A)	178.4(3)	P(1A)-Fe(1A)-C(21A)-C(20A)	7.3(4)
C(7A)-C(8A)-C(9A)-C(10A)	1.3(6)	N(1LA)-Fe(1A)-C(21A)-C(23A)	106.8(4)
C(8A)-C(9A)-C(10A)-F(2A)	179.2(3)	C(1LA)-Fe(1A)-C(21A)-C(23A)	-7.0(4)
C(8A)-C(9A)-C(10A)-C(11A)	-1.8(6)	C(20A)-Fe(1A)-C(21A)-C(23A)	-110.0(5)
F(2A)-C(10A)-C(11A)-C(12A)	-179.4(3)	C(19A)-Fe(1A)-C(21A)-C(23A)	-140.7(4)
C(9A)-C(10A)-C(11A)-C(12A)	1.6(6)	P(1A)-Fe(1A)-C(21A)-C(23A)	-102.7(4)
C(10A)-C(11A)-C(12A)-C(7A)	-0.9(6)	N(1LA)-Fe(1A)-C(21A)-C(22A)	-26.5(3)
C(8A)-C(7A)-C(12A)-C(11A)	0.4(6)	C(1LA)-Fe(1A)-C(21A)-C(22A)	-140.3(3)
P(1A)-C(7A)-C(12A)-C(11A)	-178.6(3)	C(20A)-Fe(1A)-C(21A)-C(22A)	116.7(4)
C(7A)-P(1A)-C(13A)-C(18A)	117.4(3)	C(19A)-Fe(1A)-C(21A)-C(22A)	86.0(3)
C(1A)-P(1A)-C(13A)-C(18A)	11.6(4)	P(1A)-Fe(1A)-C(21A)-C(22A)	124.0(3)
Fe(1A)-P(1A)-C(13A)-C(18A)	-116.4(3)	N(1LB)-Fe(1B)-C(1LB)-O(1LB)	29(6)
C(7A)-P(1A)-C(13A)-C(14A)	-71.7(3)	C(20B)-Fe(1B)-C(1LB)-O(1LB)	170(6)
C(1A)-P(1A)-C(13A)-C(14A)	-177.5(3)	C(19B)-Fe(1B)-C(1LB)-O(1LB)	-167(6)
Fe(1A)-P(1A)-C(13A)-C(14A)	54.4(3)	C(21B)-Fe(1B)-C(1LB)-O(1LB)	131(6)
C(18A)-C(13A)-C(14A)-C(15A)	0.2(6)	P(1B)-Fe(1B)-C(1LB)-O(1LB)	-83(6)
P(1A)-C(13A)-C(14A)-C(15A)	-171.3(3)	C(1LB)-Fe(1B)-N(1LB)-O(2LB)	20.3(18)
C(13A)-C(14A)-C(15A)-C(16A)	0.9(6)	C(20B)-Fe(1B)-N(1LB)-O(2LB)	-106.7(17)
C(14A)-C(15A)-C(16A)-C(17A)	-1.9(6)	C(19B)-Fe(1B)-N(1LB)-O(2LB)	-146.9(17)
C(14A)-C(15A)-C(16A)-F(3A)	177.9(3)	C(21B)-Fe(1B)-N(1LB)-O(2LB)	-76.6(17)
F(3A)-C(16A)-C(17A)-C(18A)	-178.2(3)	P(1B)-Fe(1B)-N(1LB)-O(2LB)	119.4(17)
C(15A)-C(16A)-C(17A)-C(18A)	1.7(6)	N(1LB)-Fe(1B)-P(1B)-C(7B)	45.66(19)
C(14A)-C(13A)-C(18A)-C(17A)	-0.4(6)	C(1LB)-Fe(1B)-P(1B)-C(7B)	160.94(18)
P(1A)-C(13A)-C(18A)-C(17A)	170.4(3)	C(20B)-Fe(1B)-P(1B)-C(7B)	-98.2(2)
C(16A)-C(17A)-C(18A)-C(13A)	-0.5(6)	C(19B)-Fe(1B)-P(1B)-C(7B)	-67.01(19)
N(1LA)-Fe(1A)-C(19A)-C(20A)	125.8(3)	C(21B)-Fe(1B)-P(1B)-C(7B)	-105.4(3)
C(1LA)-Fe(1A)-C(19A)-C(20A)	-41.6(3)	N(1LB)-Fe(1B)-P(1B)-C(1B)	167.32(18)
C(21A)-Fe(1A)-C(19A)-C(20A)	31.4(3)	C(1LB)-Fe(1B)-P(1B)-C(1B)	-77.40(19)
P(1A)-Fe(1A)-C(19A)-C(20A)	-128.6(3)	C(20B)-Fe(1B)-P(1B)-C(1B)	23.43(19)
Fe(1A)-C(19A)-C(20A)-C(21A)	-60.8(4)	C(19B)-Fe(1B)-P(1B)-C(1B)	54.66(19)
N(1LA)-Fe(1A)-C(20A)-C(19A)	-78.0(3)	C(21B)-Fe(1B)-P(1B)-C(1B)	16.3(3)
C(1LA)-Fe(1A)-C(20A)-C(19A)	149.4(3)	N(1LB)-Fe(1B)-P(1B)-C(13B)	-73.05(19)
C(21A)-Fe(1A)-C(20A)-C(19A)	-129.3(4)	C(1LB)-Fe(1B)-P(1B)-C(13B)	42.23(19)
P(1A)-Fe(1A)-C(20A)-C(19A)	55.0(3)	C(20B)-Fe(1B)-P(1B)-C(13B)	143.07(19)
N(1LA)-Fe(1A)-C(20A)-C(21A)	51.3(3)	C(19B)-Fe(1B)-P(1B)-C(13B)	174.29(19)
C(1LA)-Fe(1A)-C(20A)-C(21A)	-81.3(3)	C(21B)-Fe(1B)-P(1B)-C(13B)	135.9(2)
C(19A)-Fe(1A)-C(20A)-C(21A)	129.3(4)	C(7B)-P(1B)-C(1B)-C(6B)	11.2(4)
P(1A)-Fe(1A)-C(20A)-C(21A)	-175.8(2)	C(13B)-P(1B)-C(1B)-C(6B)	115.8(3)

Fe(1B)-P(1B)-C(1B)-C(6B)	-117.2(3)	N(1LB)-Fe(1B)-C(19B)-C(20B)	124.1(3)
C(7B)-P(1B)-C(1B)-C(2B)	-172.7(3)	C(1LB)-Fe(1B)-C(19B)-C(20B)	-40.0(4)
C(13B)-P(1B)-C(1B)-C(2B)	-68.1(3)	C(21B)-Fe(1B)-C(19B)-C(20B)	32.3(3)
Fe(1B)-P(1B)-C(1B)-C(2B)	59.0(3)	P(1B)-Fe(1B)-C(19B)-C(20B)	-125.6(3)
C(6B)-C(1B)-C(2B)-C(3B)	-0.6(6)	Fe(1B)-C(19B)-C(20B)-C(21B)	-60.7(4)
P(1B)-C(1B)-C(2B)-C(3B)	-176.9(3)	N(1LB)-Fe(1B)-C(20B)-C(19B)	-77.2(4)
C(1B)-C(2B)-C(3B)-C(4B)	-0.3(6)	C(1LB)-Fe(1B)-C(20B)-C(19B)	150.9(3)
C(2B)-C(3B)-C(4B)-C(5B)	0.8(7)	C(21B)-Fe(1B)-C(20B)-C(19B)	-128.4(4)
C(2B)-C(3B)-C(4B)-F(1B)	-178.9(4)	P(1B)-Fe(1B)-C(20B)-C(19B)	57.9(3)
F(1B)-C(4B)-C(5B)-C(6B)	179.3(4)	N(1LB)-Fe(1B)-C(20B)-C(21B)	51.2(4)
C(3B)-C(4B)-C(5B)-C(6B)	-0.4(7)	C(1LB)-Fe(1B)-C(20B)-C(21B)	-80.7(3)
C(2B)-C(1B)-C(6B)-C(5B)	1.0(6)	C(19B)-Fe(1B)-C(20B)-C(21B)	128.4(4)
P(1B)-C(1B)-C(6B)-C(5B)	177.1(3)	P(1B)-Fe(1B)-C(20B)-C(21B)	-173.7(2)
C(4B)-C(5B)-C(6B)-C(1B)	-0.6(6)	C(19B)-C(20B)-C(21B)-C(22B)	-36.4(6)
C(1B)-P(1B)-C(7B)-C(12B)	-118.1(3)	Fe(1B)-C(20B)-C(21B)-C(22B)	-97.6(4)
C(13B)-P(1B)-C(7B)-C(12B)	135.4(3)	C(19B)-C(20B)-C(21B)-C(23B)	174.4(4)
Fe(1B)-P(1B)-C(7B)-C(12B)	8.4(4)	Fe(1B)-C(20B)-C(21B)-C(23B)	113.2(4)
C(1B)-P(1B)-C(7B)-C(8B)	63.7(3)	C(19B)-C(20B)-C(21B)-Fe(1B)	61.2(4)
C(13B)-P(1B)-C(7B)-C(8B)	-42.7(3)	N(1LB)-Fe(1B)-C(21B)-C(20B)	-141.7(3)
Fe(1B)-P(1B)-C(7B)-C(8B)	-169.8(3)	C(1LB)-Fe(1B)-C(21B)-C(20B)	103.7(3)
C(12B)-C(7B)-C(8B)-C(9B)	0.5(6)	C(19B)-Fe(1B)-C(21B)-C(20B)	-31.0(3)
P(1B)-C(7B)-C(8B)-C(9B)	178.7(3)	P(1B)-Fe(1B)-C(21B)-C(20B)	10.8(4)
C(7B)-C(8B)-C(9B)-C(10B)	-2.1(6)	N(1LB)-Fe(1B)-C(21B)-C(22B)	-22.7(4)
C(8B)-C(9B)-C(10B)-F(2B)	-178.4(3)	C(1LB)-Fe(1B)-C(21B)-C(22B)	-137.2(3)
C(8B)-C(9B)-C(10B)-C(11B)	3.3(6)	C(20B)-Fe(1B)-C(21B)-C(22B)	119.1(5)
F(2B)-C(10B)-C(11B)-C(12B)	179.0(4)	C(19B)-Fe(1B)-C(21B)-C(22B)	88.0(4)
C(9B)-C(10B)-C(11B)-C(12B)	-2.7(6)	P(1B)-Fe(1B)-C(21B)-C(22B)	129.9(3)
C(8B)-C(7B)-C(12B)-C(11B)	0.1(6)	N(1LB)-Fe(1B)-C(21B)-C(23B)	108.9(4)
P(1B)-C(7B)-C(12B)-C(11B)	-178.1(3)	C(1LB)-Fe(1B)-C(21B)-C(23B)	-5.6(4)
C(10B)-C(11B)-C(12B)-C(7B)	1.0(6)	C(20B)-Fe(1B)-C(21B)-C(23B)	-109.3(4)
C(7B)-P(1B)-C(13B)-C(14B)	88.3(3)	C(19B)-Fe(1B)-C(21B)-C(23B)	-140.3(4)
C(1B)-P(1B)-C(13B)-C(14B)	-19.2(4)	P(1B)-Fe(1B)-C(21B)-C(23B)	-98.5(4)
Fe(1B)-P(1B)-C(13B)-C(14B)	-144.5(3)		
C(7B)-P(1B)-C(13B)-C(18B)	-87.1(3)		
C(1B)-P(1B)-C(13B)-C(18B)	165.4(3)		
Fe(1B)-P(1B)-C(13B)-C(18B)	40.1(3)		
C(18B)-C(13B)-C(14B)-C(15B)	0.7(5)		
P(1B)-C(13B)-C(14B)-C(15B)	-174.6(3)		
C(13B)-C(14B)-C(15B)-C(16B)	-0.5(6)		
C(14B)-C(15B)-C(16B)-F(3B)	179.9(3)		
C(14B)-C(15B)-C(16B)-C(17B)	0.3(6)		
F(3B)-C(16B)-C(17B)-C(18B)	-179.9(3)		
C(15B)-C(16B)-C(17B)-C(18B)	-0.3(6)		
C(16B)-C(17B)-C(18B)-C(13B)	0.5(5)		
C(14B)-C(13B)-C(18B)-C(17B)	-0.7(5)		
P(1B)-C(13B)-C(18B)-C(17B)	174.9(3)		

17.8 Röntgenstrukturdaten von 355

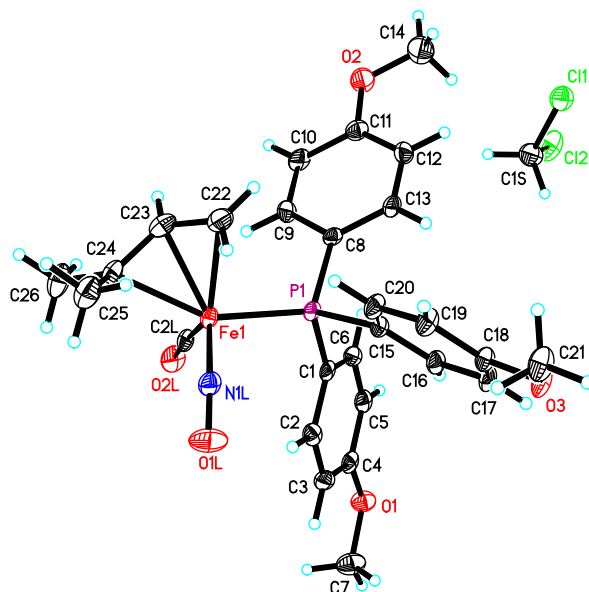


Abb. 17.8 Übersichtszeichnung der Kristallstruktur von 355

Tabelle 17.43 Kristalldaten und Strukturverfeinerung

Empirische Formel	C ₂₈ H ₃₂ Cl ₂ Fe N O ₅ P
Formelgewicht	620.27 g/mol
Temperatur	100(2) K
Wellenlänge	0.71073 Å
Kristallsystem	triklin, P-1
Gitterkonstante	a = 10.3224(18) Å α = 115.031(6)° b = 12.326(2) Å β = 96.705(7)° c = 12.631(2) Å γ = 90.837(7)°
Volumen	1442.4(4) Å ³
Z	2
Dichte (errechnet)	1.428 Mg*m ⁻³
Absorptionskoeffizient	0.801 mm ⁻¹
F(000)	644
Kristallgröße	0.24 x 0.20 x 0.15 mm ³
Theta-Bereich für Datensammlung	1.80 bis 26.50°
Bereich für Indizes	-12 ≤ h ≤ 12, -15 ≤ k ≤ 15, -15 ≤ l ≤ 15
Gesammelte/unabhängige Reflexe	19920 / 5915 [R(int) = 0.0549]
Vervollständigung für theta = 28.47	99.1 %
Max. und min. Transmission	0.7454 und 0.5586
Verfeinerungsmethode	Full-matrix least-squares on F ²
Daten/Einschränkung/Parameter	5915 / 0 / 348
Goodness-of-fit on F ²	1.072
Abschließende R Indizes [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0563, wR2 = 0.1473
R Indizes (alle Daten)	R1 = 0.0638, wR2 = 0.1530
Restelektronendichte	1.510 und -0.929 eÅ ⁻³

Tabelle 17.44 Lageparameter ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$), U(eq) ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors

	x	y	z	U(eq)
Fe(1)	7668(1)	6574(1)	4160(1)	17(1)
P(1)	8431(1)	5894(1)	2439(1)	15(1)
O(1)	14012(2)	7543(2)	2932(2)	25(1)
O(2)	8527(2)	584(2)	75(2)	31(1)
O(3)	6118(2)	7933(2)	-817(2)	26(1)
N(1L)	7463(2)	7994(2)	4481(2)	22(1)
O(1L)	7596(2)	9050(2)	4807(2)	37(1)
C(2L)	9202(3)	6400(2)	4821(2)	20(1)
O(2L)	10241(2)	6364(2)	5243(2)	28(1)
C(1)	10140(2)	6362(2)	2599(2)	16(1)
C(2)	10530(3)	7568(2)	3261(2)	19(1)
C(3)	11809(3)	8001(2)	3393(2)	20(1)
C(4)	12731(3)	7210(2)	2871(2)	19(1)
C(5)	12366(3)	5999(2)	2228(2)	20(1)
C(6)	11084(3)	5583(2)	2094(2)	18(1)
C(7)	14414(3)	8779(3)	3576(3)	32(1)
C(8)	8394(2)	4280(2)	1632(2)	16(1)
C(9)	8747(3)	3627(2)	2282(2)	21(1)
C(10)	8802(3)	2405(2)	1735(2)	23(1)
C(11)	8485(3)	1796(2)	521(2)	22(1)
C(12)	8137(3)	2429(2)	-140(2)	22(1)
C(13)	8100(3)	3663(2)	423(2)	20(1)
C(14)	8263(4)	-75(3)	-1171(3)	44(1)
C(15)	7696(2)	6442(2)	1394(2)	17(1)
C(16)	8440(3)	6727(2)	681(2)	19(1)
C(17)	7876(3)	7217(2)	-49(2)	21(1)
C(18)	6563(3)	7420(2)	-88(2)	20(1)
C(19)	5806(3)	7136(3)	603(2)	22(1)
C(20)	6379(3)	6653(2)	1340(2)	21(1)
C(21)	4787(3)	8209(3)	-842(3)	29(1)
C(22)	5957(3)	5367(3)	3323(3)	28(1)
C(23)	6511(3)	5294(3)	4344(3)	27(1)
C(24)	6659(3)	6301(3)	5441(2)	24(1)
C(25)	5656(3)	7206(3)	5809(3)	34(1)
C(26)	7434(4)	6182(3)	6471(3)	37(1)
C(1S)	11958(3)	104(3)	-2644(3)	31(1)
Cl(1)	10447(1)	-470(1)	-3527(1)	30(1)
Cl(2)	13204(1)	-865(1)	-3204(1)	39(1)

Tabelle 17.45 Bindungslängen [\AA] und Bindungswinkel [$^\circ$]

Fe(1)-N(1L)	1.643(2)	Fe(1)-C(22)	2.146(3)
Fe(1)-C(2L)	1.762(3)	Fe(1)-C(24)	2.159(3)
Fe(1)-C(23)	2.071(3)	Fe(1)-P(1)	2.2193(8)

P(1)-C(8)	1.808(3)	C(20)-H(20)	0.9500
P(1)-C(1)	1.809(3)	C(21)-H(21A)	0.9800
P(1)-C(15)	1.819(2)	C(21)-H(21B)	0.9800
O(1)-C(4)	1.362(3)	C(21)-H(21C)	0.9800
O(1)-C(7)	1.418(3)	C(22)-C(23)	1.386(4)
O(2)-C(11)	1.359(3)	C(22)-H(22A)	0.9500
O(2)-C(14)	1.422(4)	C(22)-H(22B)	0.9500
O(3)-C(18)	1.364(3)	C(23)-C(24)	1.404(4)
O(3)-C(21)	1.421(3)	C(23)-H(23)	0.9500
N(1L)-O(1L)	1.188(3)	C(24)-C(25)	1.497(4)
C(2L)-O(2L)	1.151(3)	C(24)-C(26)	1.509(4)
C(1)-C(2)	1.387(4)	C(25)-H(25A)	0.9800
C(1)-C(6)	1.390(4)	C(25)-H(25B)	0.9800
C(2)-C(3)	1.382(4)	C(25)-H(25C)	0.9800
C(2)-H(2)	0.9500	C(26)-H(26A)	0.9800
C(3)-C(4)	1.385(4)	C(26)-H(26B)	0.9800
C(3)-H(3)	0.9500	C(26)-H(26C)	0.9800
C(4)-C(5)	1.384(4)	C(1S)-Cl(1)	1.753(3)
C(5)-C(6)	1.378(4)	C(1S)-Cl(2)	1.766(3)
C(5)-H(5)	0.9500	C(1S)-H(1S1)	0.9900
C(6)-H(6)	0.9500	C(1S)-H(1S2)	0.9900
C(7)-H(7A)	0.9800		
C(7)-H(7B)	0.9800	N(1L)-Fe(1)-C(2L)	111.23(12)
C(7)-H(7C)	0.9800	N(1L)-Fe(1)-C(23)	130.86(12)
C(8)-C(13)	1.380(4)	C(2L)-Fe(1)-C(23)	100.64(12)
C(8)-C(9)	1.398(3)	N(1L)-Fe(1)-C(22)	115.60(12)
C(9)-C(10)	1.370(4)	C(2L)-Fe(1)-C(22)	132.04(12)
C(9)-H(9)	0.9500	C(23)-Fe(1)-C(22)	38.33(11)
C(10)-C(11)	1.388(4)	N(1L)-Fe(1)-C(24)	102.00(11)
C(10)-H(10)	0.9500	C(2L)-Fe(1)-C(24)	92.31(11)
C(11)-C(12)	1.387(4)	C(23)-Fe(1)-C(24)	38.71(11)
C(12)-C(13)	1.384(4)	C(22)-Fe(1)-C(24)	68.82(11)
C(12)-H(12)	0.9500	N(1L)-Fe(1)-P(1)	103.91(8)
C(13)-H(13)	0.9500	C(2L)-Fe(1)-P(1)	89.13(9)
C(14)-H(14A)	0.9800	C(23)-Fe(1)-P(1)	113.22(9)
C(14)-H(14B)	0.9800	C(22)-Fe(1)-P(1)	89.36(8)
C(14)-H(14C)	0.9800	C(24)-Fe(1)-P(1)	151.55(8)
C(15)-C(20)	1.386(4)	C(8)-P(1)-C(1)	103.06(12)
C(15)-C(16)	1.395(4)	C(8)-P(1)-C(15)	106.00(11)
C(16)-C(17)	1.382(3)	C(1)-P(1)-C(15)	101.80(11)
C(16)-H(16)	0.9500	C(8)-P(1)-Fe(1)	116.17(8)
C(17)-C(18)	1.381(4)	C(1)-P(1)-Fe(1)	112.14(8)
C(17)-H(17)	0.9500	C(15)-P(1)-Fe(1)	115.96(9)
C(18)-C(19)	1.380(4)	C(4)-O(1)-C(7)	117.3(2)
C(19)-C(20)	1.387(3)	C(11)-O(2)-C(14)	117.2(2)
C(19)-H(19)	0.9500	C(18)-O(3)-C(21)	117.1(2)

O(1L)-N(1L)-Fe(1)	165.7(2)	H(14A)-C(14)-H(14B)	109.5
O(2L)-C(2L)-Fe(1)	174.6(2)	O(2)-C(14)-H(14C)	109.5
C(2)-C(1)-C(6)	118.1(2)	H(14A)-C(14)-H(14C)	109.5
C(2)-C(1)-P(1)	118.09(19)	H(14B)-C(14)-H(14C)	109.5
C(6)-C(1)-P(1)	123.76(19)	C(20)-C(15)-C(16)	118.2(2)
C(3)-C(2)-C(1)	121.5(2)	C(20)-C(15)-P(1)	120.08(19)
C(3)-C(2)-H(2)	119.2	C(16)-C(15)-P(1)	121.60(19)
C(1)-C(2)-H(2)	119.2	C(17)-C(16)-C(15)	120.5(2)
C(2)-C(3)-C(4)	119.4(2)	C(17)-C(16)-H(16)	119.7
C(2)-C(3)-H(3)	120.3	C(15)-C(16)-H(16)	119.7
C(4)-C(3)-H(3)	120.3	C(18)-C(17)-C(16)	120.2(2)
O(1)-C(4)-C(5)	115.9(2)	C(18)-C(17)-H(17)	119.9
O(1)-C(4)-C(3)	124.2(2)	C(16)-C(17)-H(17)	119.9
C(5)-C(4)-C(3)	120.0(2)	O(3)-C(18)-C(19)	124.6(2)
C(6)-C(5)-C(4)	120.0(2)	O(3)-C(18)-C(17)	115.3(2)
C(6)-C(5)-H(5)	120.0	C(19)-C(18)-C(17)	120.2(2)
C(4)-C(5)-H(5)	120.0	C(18)-C(19)-C(20)	119.3(2)
C(5)-C(6)-C(1)	121.0(2)	C(18)-C(19)-H(19)	120.3
C(5)-C(6)-H(6)	119.5	C(20)-C(19)-H(19)	120.3
C(1)-C(6)-H(6)	119.5	C(15)-C(20)-C(19)	121.5(2)
O(1)-C(7)-H(7A)	109.5	C(15)-C(20)-H(20)	119.3
O(1)-C(7)-H(7B)	109.5	C(19)-C(20)-H(20)	119.3
H(7A)-C(7)-H(7B)	109.5	O(3)-C(21)-H(21A)	109.5
O(1)-C(7)-H(7C)	109.5	O(3)-C(21)-H(21B)	109.5
H(7A)-C(7)-H(7C)	109.5	H(21A)-C(21)-H(21B)	109.5
H(7B)-C(7)-H(7C)	109.5	O(3)-C(21)-H(21C)	109.5
C(13)-C(8)-C(9)	118.3(2)	H(21A)-C(21)-H(21C)	109.5
C(13)-C(8)-P(1)	124.55(19)	H(21B)-C(21)-H(21C)	109.5
C(9)-C(8)-P(1)	117.09(19)	C(23)-C(22)-Fe(1)	67.89(16)
C(10)-C(9)-C(8)	121.0(2)	C(23)-C(22)-H(22A)	120.0
C(10)-C(9)-H(9)	119.5	Fe(1)-C(22)-H(22A)	77.1
C(8)-C(9)-H(9)	119.5	C(23)-C(22)-H(22B)	120.0
C(9)-C(10)-C(11)	120.1(2)	Fe(1)-C(22)-H(22B)	126.8
C(9)-C(10)-H(10)	120.0	H(22A)-C(22)-H(22B)	120.0
C(11)-C(10)-H(10)	120.0	C(22)-C(23)-C(24)	121.3(3)
O(2)-C(11)-C(12)	125.0(3)	C(22)-C(23)-Fe(1)	73.78(17)
O(2)-C(11)-C(10)	115.2(2)	C(24)-C(23)-Fe(1)	74.04(16)
C(12)-C(11)-C(10)	119.8(2)	C(22)-C(23)-H(23)	119.3
C(13)-C(12)-C(11)	119.5(2)	C(24)-C(23)-H(23)	119.3
C(13)-C(12)-H(12)	120.3	Fe(1)-C(23)-H(23)	124.5
C(11)-C(12)-H(12)	120.3	C(23)-C(24)-C(25)	123.1(3)
C(8)-C(13)-C(12)	121.4(2)	C(23)-C(24)-C(26)	117.5(3)
C(8)-C(13)-H(13)	119.3	C(25)-C(24)-C(26)	112.7(3)
C(12)-C(13)-H(13)	119.3	C(23)-C(24)-Fe(1)	67.25(15)
O(2)-C(14)-H(14A)	109.5	C(25)-C(24)-Fe(1)	108.42(18)
O(2)-C(14)-H(14B)	109.5	C(26)-C(24)-Fe(1)	119.7(2)

C(24)-C(25)-H(25A)	109.5	C(24)-C(26)-H(26C)	109.5
C(24)-C(25)-H(25B)	109.5	H(26A)-C(26)-H(26C)	109.5
H(25A)-C(25)-H(25B)	109.5	H(26B)-C(26)-H(26C)	109.5
C(24)-C(25)-H(25C)	109.5	Cl(1)-C(1S)-Cl(2)	111.28(17)
H(25A)-C(25)-H(25C)	109.5	Cl(1)-C(1S)-H(1S1)	109.4
H(25B)-C(25)-H(25C)	109.5	Cl(2)-C(1S)-H(1S1)	109.4
C(24)-C(26)-H(26A)	109.5	Cl(1)-C(1S)-H(1S2)	109.4
C(24)-C(26)-H(26B)	109.5	Cl(2)-C(1S)-H(1S2)	109.4
H(26A)-C(26)-H(26B)	109.5	H(1S1)-C(1S)-H(1S2)	108.0

Tabelle 17.46 Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$). Der Exponent des anisotropen Temperaturfaktors ist definiert als: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Fe(1)	22(1)	19(1)	15(1)	12(1)	0(1)	1(1)
P(1)	17(1)	16(1)	15(1)	12(1)	-2(1)	2(1)
O(1)	20(1)	24(1)	31(1)	13(1)	0(1)	0(1)
O(2)	49(1)	18(1)	27(1)	11(1)	5(1)	4(1)
O(3)	28(1)	39(1)	26(1)	28(1)	-1(1)	9(1)
N(1L)	25(1)	24(1)	21(1)	14(1)	0(1)	1(1)
O(1L)	35(1)	19(1)	55(1)	17(1)	-2(1)	2(1)
C(2L)	30(1)	22(1)	15(1)	13(1)	2(1)	1(1)
O(2L)	30(1)	34(1)	27(1)	23(1)	-7(1)	2(1)
C(1)	18(1)	21(1)	14(1)	13(1)	-2(1)	1(1)
C(2)	22(1)	21(1)	17(1)	11(1)	0(1)	4(1)
C(3)	25(1)	18(1)	21(1)	12(1)	-1(1)	0(1)
C(4)	19(1)	27(1)	18(1)	17(1)	-2(1)	1(1)
C(5)	23(1)	23(1)	17(1)	13(1)	0(1)	6(1)
C(6)	22(1)	18(1)	16(1)	11(1)	-2(1)	2(1)
C(7)	23(2)	29(2)	43(2)	17(1)	-1(1)	-4(1)
C(8)	17(1)	15(1)	19(1)	11(1)	-1(1)	1(1)
C(9)	26(1)	22(1)	16(1)	12(1)	-4(1)	1(1)
C(10)	27(1)	22(1)	26(1)	19(1)	-2(1)	2(1)
C(11)	25(1)	19(1)	26(1)	12(1)	3(1)	2(1)
C(12)	29(1)	21(1)	17(1)	9(1)	0(1)	0(1)
C(13)	24(1)	22(1)	18(1)	14(1)	0(1)	0(1)
C(14)	78(3)	19(2)	33(2)	6(1)	15(2)	3(2)
C(15)	22(1)	16(1)	15(1)	11(1)	-2(1)	2(1)
C(16)	23(1)	21(1)	17(1)	12(1)	1(1)	5(1)
C(17)	27(1)	24(1)	17(1)	15(1)	3(1)	5(1)
C(18)	27(1)	21(1)	18(1)	14(1)	-3(1)	3(1)
C(19)	19(1)	30(1)	25(1)	20(1)	0(1)	5(1)
C(20)	22(1)	26(1)	22(1)	18(1)	0(1)	2(1)
C(21)	29(2)	38(2)	31(2)	26(1)	0(1)	11(1)
C(22)	30(2)	28(2)	29(2)	16(1)	1(1)	-5(1)
C(23)	30(2)	24(1)	35(2)	19(1)	6(1)	0(1)
C(24)	28(1)	29(2)	25(1)	21(1)	6(1)	2(1)

C(25)	38(2)	37(2)	37(2)	23(1)	14(1)	10(1)
C(26)	45(2)	49(2)	32(2)	31(2)	9(1)	9(2)
C(1S)	34(2)	27(2)	31(2)	14(1)	-3(1)	1(1)
Cl(1)	32(1)	30(1)	32(1)	19(1)	-1(1)	3(1)
Cl(2)	35(1)	52(1)	48(1)	38(1)	7(1)	14(1)

Tabelle 17.47 Lageparameter der Wasserstoffatome ($\cdot 10^4$) und isotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$)

	x	y	z	U(eq)
H(2)	9903	8109	3632	23
H(3)	12054	8832	3837	24
H(5)	13001	5455	1880	24
H(6)	10841	4750	1650	21
H(7A)	13920	9242	3219	48
H(7B)	15350	8902	3558	48
H(7C)	14251	9049	4395	48
H(9)	8953	4036	3115	25
H(10)	9057	1976	2188	27
H(12)	7927	2018	-973	26
H(13)	7866	4095	-32	24
H(14A)	7382	65	-1448	66
H(14B)	8319	-933	-1381	66
H(14C)	8905	189	-1542	66
H(16)	9342	6583	698	23
H(17)	8394	7414	-526	25
H(19)	4902	7271	574	26
H(20)	5858	6462	1818	25
H(21A)	4224	7472	-1089	44
H(21B)	4582	8561	-1401	44
H(21C)	4635	8782	-53	44
H(22A)	5669	6108	3358	34
H(22B)	5866	4675	2590	34
H(23)	6797	4549	4300	33
H(25A)	5157	7224	5108	50
H(25B)	6092	8001	6313	50
H(25C)	5061	6986	6248	50
H(26A)	6835	5995	6928	55
H(26B)	7947	6939	6976	55
H(26C)	8025	5536	6179	55
H(1S1)	11889	209	-1831	37
H(1S2)	12190	901	-2610	37

Tabelle 17.48 Torsionswinkel [$^\circ$]

N(1L)-Fe(1)-P(1)-C(8)	-165.19(12)	C(22)-Fe(1)-P(1)-C(8)	-48.94(12)
C(2L)-Fe(1)-P(1)-C(8)	83.13(12)	C(24)-Fe(1)-P(1)-C(8)	-10.11(19)
C(23)-Fe(1)-P(1)-C(8)	-18.08(13)	N(1L)-Fe(1)-P(1)-C(1)	76.65(12)

C(2L)-Fe(1)-P(1)-C(1)	-35.03(12)	C(14)-O(2)-C(11)-C(12)	3.6(4)
C(23)-Fe(1)-P(1)-C(1)	-136.24(12)	C(14)-O(2)-C(11)-C(10)	-177.4(3)
C(22)-Fe(1)-P(1)-C(1)	-167.09(12)	C(9)-C(10)-C(11)-O(2)	-177.8(2)
C(24)-Fe(1)-P(1)-C(1)	-128.27(18)	C(9)-C(10)-C(11)-C(12)	1.2(4)
N(1L)-Fe(1)-P(1)-C(15)	-39.69(12)	O(2)-C(11)-C(12)-C(13)	178.3(3)
C(2L)-Fe(1)-P(1)-C(15)	-151.37(12)	C(10)-C(11)-C(12)-C(13)	-0.6(4)
C(23)-Fe(1)-P(1)-C(15)	107.42(13)	C(9)-C(8)-C(13)-C(12)	0.6(4)
C(22)-Fe(1)-P(1)-C(15)	76.56(12)	P(1)-C(8)-C(13)-C(12)	177.6(2)
C(24)-Fe(1)-P(1)-C(15)	115.39(18)	C(11)-C(12)-C(13)-C(8)	-0.4(4)
C(2L)-Fe(1)-N(1L)-O(1L)	10.3(9)	C(8)-P(1)-C(15)-C(20)	95.4(2)
C(23)-Fe(1)-N(1L)-O(1L)	137.0(9)	C(1)-P(1)-C(15)-C(20)	-157.1(2)
C(22)-Fe(1)-N(1L)-O(1L)	179.7(9)	Fe(1)-P(1)-C(15)-C(20)	-35.1(2)
C(24)-Fe(1)-N(1L)-O(1L)	107.6(9)	C(8)-P(1)-C(15)-C(16)	-88.4(2)
P(1)-Fe(1)-N(1L)-O(1L)	-84.2(9)	C(1)-P(1)-C(15)-C(16)	19.1(2)
N(1L)-Fe(1)-C(2L)-O(2L)	-31(3)	Fe(1)-P(1)-C(15)-C(16)	141.10(19)
C(23)-Fe(1)-C(2L)-O(2L)	-173(3)	C(20)-C(15)-C(16)-C(17)	0.6(4)
C(22)-Fe(1)-C(2L)-O(2L)	162(3)	P(1)-C(15)-C(16)-C(17)	-175.7(2)
C(24)-Fe(1)-C(2L)-O(2L)	-135(3)	C(15)-C(16)-C(17)-C(18)	-0.6(4)
P(1)-Fe(1)-C(2L)-O(2L)	73(3)	C(21)-O(3)-C(18)-C(19)	1.2(4)
C(8)-P(1)-C(1)-C(2)	-175.67(19)	C(21)-O(3)-C(18)-C(17)	-177.2(2)
C(15)-P(1)-C(1)-C(2)	74.6(2)	C(16)-C(17)-C(18)-O(3)	178.5(2)
Fe(1)-P(1)-C(1)-C(2)	-50.0(2)	C(16)-C(17)-C(18)-C(19)	0.1(4)
C(8)-P(1)-C(1)-C(6)	4.5(2)	O(3)-C(18)-C(19)-C(20)	-177.9(2)
C(15)-P(1)-C(1)-C(6)	-105.3(2)	C(17)-C(18)-C(19)-C(20)	0.4(4)
Fe(1)-P(1)-C(1)-C(6)	130.14(19)	C(16)-C(15)-C(20)-C(19)	-0.2(4)
C(6)-C(1)-C(2)-C(3)	1.9(4)	P(1)-C(15)-C(20)-C(19)	176.2(2)
P(1)-C(1)-C(2)-C(3)	-177.96(19)	C(18)-C(19)-C(20)-C(15)	-0.3(4)
C(1)-C(2)-C(3)-C(4)	-1.2(4)	N(1L)-Fe(1)-C(22)-C(23)	-124.31(19)
C(7)-O(1)-C(4)-C(5)	179.5(2)	C(2L)-Fe(1)-C(22)-C(23)	42.3(2)
C(7)-O(1)-C(4)-C(3)	0.2(4)	C(24)-Fe(1)-C(22)-C(23)	-30.77(18)
C(2)-C(3)-C(4)-O(1)	179.1(2)	P(1)-Fe(1)-C(22)-C(23)	130.54(18)
C(2)-C(3)-C(4)-C(5)	-0.2(4)	Fe(1)-C(22)-C(23)-C(24)	59.2(2)
O(1)-C(4)-C(5)-C(6)	-178.5(2)	N(1L)-Fe(1)-C(23)-C(22)	80.0(2)
C(3)-C(4)-C(5)-C(6)	0.9(4)	C(2L)-Fe(1)-C(23)-C(22)	-149.44(19)
C(4)-C(5)-C(6)-C(1)	-0.1(4)	C(24)-Fe(1)-C(23)-C(22)	130.3(3)
C(2)-C(1)-C(6)-C(5)	-1.2(3)	P(1)-Fe(1)-C(23)-C(22)	-55.78(19)
P(1)-C(1)-C(6)-C(5)	178.64(19)	N(1L)-Fe(1)-C(23)-C(24)	-50.2(2)
C(1)-P(1)-C(8)-C(13)	-95.2(2)	C(2L)-Fe(1)-C(23)-C(24)	80.28(18)
C(15)-P(1)-C(8)-C(13)	11.4(3)	C(22)-Fe(1)-C(23)-C(24)	-130.3(3)
Fe(1)-P(1)-C(8)-C(13)	141.8(2)	P(1)-Fe(1)-C(23)-C(24)	173.94(14)
C(1)-P(1)-C(8)-C(9)	81.8(2)	C(22)-C(23)-C(24)-C(25)	38.8(4)
C(15)-P(1)-C(8)-C(9)	-171.6(2)	Fe(1)-C(23)-C(24)-C(25)	97.8(3)
Fe(1)-P(1)-C(8)-C(9)	-41.2(2)	C(22)-C(23)-C(24)-C(26)	-171.9(3)
C(13)-C(8)-C(9)-C(10)	0.1(4)	Fe(1)-C(23)-C(24)-C(26)	-112.8(3)
P(1)-C(8)-C(9)-C(10)	-177.1(2)	C(22)-C(23)-C(24)-Fe(1)	-59.0(2)
C(8)-C(9)-C(10)-C(11)	-1.0(4)	N(1L)-Fe(1)-C(24)-C(23)	143.53(17)

C(2L)-Fe(1)-C(24)-C(23)	-104.19(18)	P(1)-Fe(1)-C(24)-C(25)	-130.73(19)
C(22)-Fe(1)-C(24)-C(23)	30.49(17)	N(1L)-Fe(1)-C(24)-C(26)	-106.7(2)
P(1)-Fe(1)-C(24)-C(23)	-11.8(3)	C(2L)-Fe(1)-C(24)-C(26)	5.6(3)
N(1L)-Fe(1)-C(24)-C(25)	24.6(2)	C(23)-Fe(1)-C(24)-C(26)	109.8(3)
C(2L)-Fe(1)-C(24)-C(25)	136.8(2)	C(22)-Fe(1)-C(24)-C(26)	140.2(3)
C(23)-Fe(1)-C(24)-C(25)	-119.0(3)	P(1)-Fe(1)-C(24)-C(26)	98.0(3)
C(22)-Fe(1)-C(24)-C(25)	-88.5(2)		
