

Synthese und Charakterisierung neuer Intercluster-Verbindungen

Von der Fakultät Chemie der Universität Stuttgart
zur Erlangung der Würde eines Doktors der
Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.) genehmigte Abhandlung

Vorgelegt von

M. Sc. Franziska Sabine Gruber

aus München

Hauptberichter: Prof. Dr. Dr. h.c. M. Jansen

Mitberichter: Prof. Dr. D. Gudat

Tag der Einreichung der Arbeit: 18. Oktober 2010

Tag der mündlichen Prüfung: 15. Dezember 2010

Max-Planck-Institut für Festkörperforschung, Stuttgart
2010

Inhaltsverzeichnis

Tabellenverzeichnis	iii
A. Kristallographische Daten	1
A.1. Verbindung 1	2
A.2. Verbindung 2	7
A.3. Verbindung 3	12
A.4. Verbindung 4	16
A.5. Verbindung 5	21
A.6. Verbindung 6	33
A.7. Verbindung 7	42
A.8. Verbindung 8	52
A.9. Verbindung 9	56
A.10. Verbindung 10	64
A.11. Verbindung 11	68
A.12. Verbindung 12	81
A.13. Verbindung 13	87
A.14. Verbindung 14	96
A.15. Verbindung 15	102
A.16. Verbindung 16	108
A.17. Verbindung 17	117
A.18. Verbindung 18	124
A.19. Verbindung 19	129
A.20. Verbindung 20	134
A.21. Verbindung 21	137
A.22. Verbindung 22	143
A.23. Verbindung 23	148
A.24. Verbindung 24	153

Tabellenverzeichnis

A.1. Atomkoordinaten und U_{eg} von 1 „nass“	4
A.2. Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 1 in „nasser“ Form.	4
A.3. Atomkoordinaten und U_{eg} von 1 „trocken“	5
A.4. Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 1 in „trockener“ Form.	6
A.5. Atomkoordinaten und U_{eg} von 2	7
A.6. Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 2	10
A.7. Atomkoordinaten und U_{eg} von 3	12
A.8. Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 3	14
A.9. Atomkoordinaten und U_{eg} von 4	16
A.10. Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 4	19
A.11. Atomkoordinaten und U_{eg} von 5	21
A.12. Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 5	29
A.13. Atomkoordinaten und U_{eg} von 6	33
A.14. Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 6	38
A.15. Atomkoordinaten und U_{eg} von 7	42
A.16. Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 7	48
A.17. Atomkoordinaten und U_{eg} von 8	52
A.18. Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 6	54
A.19. Atomkoordinaten und U_{eg} von 9 „nass“	58
A.20. Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 9 in „nasser“ Form.	59
A.21. Atomkoordinaten und U_{eg} von 9 „trocken“	60
A.22. Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 9 in „trockener“ Form.	62
A.23. Atomkoordinaten und U_{eg} von 10	64
A.24. Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 10	66
A.25. Atomkoordinaten und U_{eg} von 11 „nass“	70
A.26. Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 11 in „nasser“ Form.	72
A.27. Atomkoordinaten und U_{eg} von 11 „trocken“	73
A.28. Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 11 in „trockener“ Form.	78

A.29.Atomkoordinaten und U_{eg} von 12	81
A.30.Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 12	84
A.31.Atomkoordinaten und U_{eg} von 13 „nass“	89
A.32.Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 13 in „nasser“ Form.	91
A.33.Atomkoordinaten und U_{eg} von 13 „trocken“	92
A.34.Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 13 in „trockener“ Form.	94
A.35.Atomkoordinaten und U_{eg} von 14	96
A.36.Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 14	99
A.37.Atomkoordinaten und U_{eg} von 15	102
A.38.Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 15	106
A.39.Atomkoordinaten und U_{eg} von 16 „nass“	110
A.40.Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 16 in „nasser“ Form.	111
A.41.Atomkoordinaten und U_{eg} von 16 „trocken“	113
A.42.Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 16 in „trockener“ Form.	114
A.43.Atomkoordinaten und U_{eg} von 17	117
A.44.Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 17	121
A.45.Atomkoordinaten und U_{eg} von 18	124
A.46.Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 18	127
A.47.Atomkoordinaten und U_{eg} von 19	129
A.48.Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 19	132
A.49.Atomkoordinaten und U_{eg} von 20	134
A.50.Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 20	136
A.51.Atomkoordinaten und U_{eg} von 21	137
A.52.Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 21	140
A.53.Atomkoordinaten und U_{eg} von 22	143
A.54.Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 22	146
A.55.Atomkoordinaten und U_{eg} von 23	148
A.56.Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 23	151
A.57.Atomkoordinaten und U_{eg} von 24	153
A.58.Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 24	157

A. Kristallographische Daten

A.1. $[\text{Ag}_{14}(\text{C}\equiv\text{C}^t\text{Bu})_{12}(\text{CH}_3\text{CN})_2][\text{W}_6\text{O}_{19}] \mathbf{1}$

Kristallzustand	mass	trocken
Summenformel	$C_{76}H_{114}Ag_{14}N_2O_{19}W_6$	$C_{76}H_{114}Ag_{14}N_2O_{19}W_6$
Kristall	farblose Würfel (0,08 x 0,08 x 0,08 mm ³)	farblose Würfel (0,02 x 0,02 x 0,05 mm ³)
Kristallsystem, Raumgruppe	rhomboedrisch, R $\bar{3}$ (Nr. 148)	rhomboedrisch, R $\bar{3}$ (Nr. 148)
Gitterkonstanten/Å, °	$a = b = 17,965(1), c = 27,379(2)$	$a = b = 17,931(2), c = 27,402(3)$
Volumen/Å ³	7652(1)	7630(1)
Formeleinheiten	3	3
Röntgendichte/g cm ⁻³	2,586	2,594
Temperatur	100 K	100K
$2\theta_{max}$	53,46 °	52,74 °
hkl -Bereich	$-22 \leq h \leq 22, -22 \leq k \leq 22, -34 \leq l \leq 34$	$-21 \leq h \leq 21, -21 \leq k \leq 21, -22 \leq l \leq 22$
F(000)	5514	5514
Absorptionskoeffizient μ/mm^{-1}	9,403	9,430
Zahl der gemessenen Reflexe	21612	16020
davon symmetrieunabhängig	3636 ($R_{int} = 0,0335$)	3475 ($R_{int} = 0,0518$)
Anzahl der Parameter	184	184
Restelektronendichte/e·Å ⁻³ (max/min)	2,24/-1,77	3,57/-1,68
R_1 ($I > 2\sigma(I)$)	0,0326	0,0374
wR_2 ($I > 2\sigma(I)$)	0,0723	0,0769
R_1 (alle Daten)	0,0372	0,0406
wR_2 (alle Daten)	0,0763	0,0819
Datenbank	CCDC 714954	-
freies Volumen	-	-
freies Volumen mit Lösungsmittel	-	-
Lösungsmittel pro Formeleinheit	-	-
Besonderheiten	C, N anisotrop verfeinert, C10/C12 Splitpositionen	C, N anisotrop verfeinert, C10/C12 Splitpositionen

A. Kristallographische Daten

Tabelle A.1.: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsfaktoren (\AA^2) von **1** in „nasser“ Form. U_{eq} ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U_{eq}
W1	0,909388(18)	0,883835(17)	0,048708(10)	0,03964(10)
O1	0,8434(4)	0,8000(4)	0,0856(2)	0,0721(18)
O2	0,9485(3)	0,8342(3)	0,00032(17)	0,0454(11)
O3	1,0000	1,0000	0,0000	0,0245(19)
O4	0,9073(3)	0,9794(3)	0,07833(16)	0,0445(11)
Ag2	0,17832(3)	0,62991(3)	0,095604(16)	0,03188(12)
Ag3	0,3333	0,6667	0,03455(3)	0,03029(17)
Ag4	0,19280(3)	0,47873(3)	0,131247(16)	0,03361(12)
N1	0,3333	0,6667	-0,0529(3)	0,046(2)
C1	0,0909(4)	0,5265(4)	0,1364(2)	0,0359(13)
C2	0,0330(4)	0,4607(4)	0,1545(2)	0,0317(12)
C3	-0,0400(4)	0,3831(4)	0,1756(2)	0,0377(14)
C4	-0,0318(6)	0,3051(5)	0,1637(3)	0,059(2)
C5	-0,1231(5)	0,3733(6)	0,1543(3)	0,059(2)
C6	-0,0413(5)	0,3950(5)	0,2311(2)	0,0453(16)
C7	0,2560(4)	0,7388(4)	0,0551(2)	0,0339(13)
C8	0,2825(4)	0,8000(4)	0,0278(2)	0,0321(13)
C9	0,3099(6)	0,8715(4)	-0,0074(2)	0,0499(18)
C10	0,2448(10)	0,8400(6)	-0,0488(4)	0,127(6)
C11	0,3146(6)	0,9491(5)	0,0187(3)	0,0537(19)
C12	0,4001(8)	0,8965(6)	-0,0265(4)	0,101(4)
C100	0,3333	0,6667	-0,0943(4)	0,032(2)
C101	0,3333	0,6667	-0,1472(4)	0,049(3)

Tabelle A.2.: Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für **1** in „nasser“ Form.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
W1	0,04209(16)	0,03657(16)	0,03399(15)	0,01119(10)	0,00865(11)	0,01495(12)
O1	0,072(4)	0,056(4)	0,069(4)	0,029(3)	0,022(3)	0,017(3)
O2	0,055(3)	0,031(2)	0,048(3)	-0,001(2)	0,000(2)	0,020(2)
O3	0,027(3)	0,027(3)	0,019(4)	0,000	0,000	0,0135(14)
O4	0,048(3)	0,054(3)	0,033(2)	0,004(2)	0,013(2)	0,026(2)
Ag2	0,0347(2)	0,0316(2)	0,0266(2)	0,00261(17)	0,00406(17)	0,01449(19)
Ag3	0,0333(2)	0,0333(2)	0,0243(4)	0,000	0,000	0,01663(12)
Ag4	0,0363(2)	0,0360(2)	0,0275(2)	0,00059(18)	-0,00035(18)	0,0173(2)
N1	0,053(4)	0,053(4)	0,032(5)	0,000	0,000	0,0264(19)

Weiter auf der nächsten Seite

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
C1	0,039(3)	0,036(3)	0,032(3)	-0,004(3)	0,000(3)	0,018(3)
C2	0,031(3)	0,035(3)	0,028(3)	-0,001(2)	-0,001(2)	0,016(3)
C3	0,035(3)	0,035(3)	0,033(3)	0,005(3)	0,005(3)	0,011(3)
C4	0,067(5)	0,035(4)	0,061(5)	0,009(3)	0,023(4)	0,014(4)
C5	0,039(4)	0,075(6)	0,046(4)	0,016(4)	-0,002(3)	0,015(4)
C6	0,044(4)	0,044(4)	0,039(4)	0,004(3)	0,005(3)	0,016(3)
C7	0,038(3)	0,040(3)	0,027(3)	-0,002(2)	-0,003(2)	0,022(3)
C8	0,039(3)	0,040(3)	0,021(3)	-0,001(2)	-0,001(2)	0,023(3)
C9	0,080(5)	0,036(4)	0,028(3)	0,008(3)	0,002(3)	0,025(4)
C10	0,242(17)	0,056(6)	0,062(6)	0,001(5)	-0,079(8)	0,059(8)
C11	0,079(6)	0,041(4)	0,047(4)	0,005(3)	-0,003(4)	0,034(4)
C12	0,144(10)	0,047(5)	0,104(8)	0,036(5)	0,084(8)	0,044(6)
C100	0,036(3)	0,036(3)	0,023(5)	0,000	0,000	0,0182(17)
C101	0,063(5)	0,063(5)	0,020(5)	0,000	0,000	0,032(2)

Tabelle A.3.: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsfaktoren (\AA^2) von **1** in „trockener“ Form. U_{eq} ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U_{eq}
W	0,90885(2)	0,88380(2)	0,048654(11)	0,04139(11)
O1	0,8427(5)	0,7995(4)	0,0851(2)	0,074(2)
O2	0,9476(3)	0,8342(3)	0,00035(19)	0,0465(12)
O3	1,0000	1,0000	0,0000	0,027(2)
O4	0,9078(3)	0,9805(4)	0,07844(18)	0,0475(13)
Ag2	0,17795(3)	0,63016(3)	0,095783(18)	0,03413(13)
Ag3	0,3333	0,6667	0,03486(3)	0,0350(2)
Ag4	0,19226(3)	0,47850(3)	0,131184(18)	0,03571(14)
N1	0,3333	0,6667	-0,0535(4)	0,047(3)
C1	0,0908(4)	0,5266(5)	0,1364(3)	0,0379(15)
C2	0,0325(4)	0,4608(4)	0,1550(2)	0,0342(14)
C3	-0,0414(5)	0,3829(4)	0,1758(3)	0,0392(16)
C4	-0,0325(7)	0,3044(5)	0,1637(4)	0,067(3)
C5	-0,1241(5)	0,3737(6)	0,1543(3)	0,061(2)
C6	-0,0417(5)	0,3943(5)	0,2310(3)	0,0469(18)
C7	0,2564(5)	0,7397(5)	0,0554(2)	0,0352(15)
C8	0,2829(4)	0,7998(5)	0,0276(2)	0,0343(14)
C9	0,3103(6)	0,8716(5)	-0,0074(3)	0,052(2)
C10	0,2451(11)	0,8403(7)	-0,0487(4)	0,122(6)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
C11	0,3155(6)	0,9498(5)	0,0186(3)	0,055(2)
C12	0,4008(9)	0,8964(7)	-0,0264(4)	0,099(5)
C100	0,3333	0,6667	-0,0950(4)	0,036(3)
C101	0,3333	0,6667	-0,1474(5)	0,059(4)

Tabelle A.4.: Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für **1** in „trockener“ Form.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
W1	0,04323(18)	0,03837(18)	0,03669(17)	0,01129(12)	0,00892(12)	0,01597(14)
O1	0,077(5)	0,056(4)	0,068(4)	0,031(3)	0,027(4)	0,017(3)
O2	0,055(3)	0,031(3)	0,051(3)	-0,001(2)	0,001(3)	0,020(2)
O3	0,029(3)	0,029(3)	0,024(5)	0,000	0,000	0,0143(16)
O4	0,050(3)	0,059(3)	0,034(3)	0,007(2)	0,017(2)	0,027(3)
Ag2	0,0378(3)	0,0345(3)	0,0272(2)	0,00262(19)	0,0036(2)	0,0159(2)
Ag3	0,0365(3)	0,0365(3)	0,0320(4)	0,000	0,000	0,01825(15)
Ag4	0,0385(3)	0,0388(3)	0,0284(3)	0,0009(2)	-0,0004(2)	0,0183(2)
N1	0,051(4)	0,051(4)	0,038(6)	0,000	0,000	0,026(2)
C1	0,035(4)	0,040(4)	0,036(4)	-0,002(3)	-0,001(3)	0,018(3)
C2	0,034(3)	0,039(4)	0,027(3)	-0,001(3)	0,000(3)	0,017(3)
C3	0,037(4)	0,033(4)	0,040(4)	0,008(3)	0,007(3)	0,012(3)
C4	0,090(7)	0,035(4)	0,063(6)	0,004(4)	0,030(5)	0,022(5)
C5	0,041(4)	0,075(6)	0,045(5)	0,016(4)	-0,004(4)	0,014(4)
C6	0,040(4)	0,051(4)	0,037(4)	0,006(3)	0,006(3)	0,013(4)
C7	0,043(4)	0,041(4)	0,025(3)	0,003(3)	0,002(3)	0,024(3)
C8	0,041(4)	0,046(4)	0,025(3)	-0,001(3)	-0,003(3)	0,029(3)
C9	0,084(6)	0,043(4)	0,029(4)	0,007(3)	-0,002(4)	0,031(4)
C10	0,220(17)	0,052(6)	0,068(7)	0,002(5)	-0,074(9)	0,049(8)
C11	0,084(6)	0,045(4)	0,044(4)	0,006(4)	0,000(4)	0,039(5)
C12	0,137(11)	0,051(6)	0,105(9)	0,038(6)	0,085(8)	0,045(7)
C100	0,042(4)	0,042(4)	0,025(6)	0,000	0,000	0,021(2)
C101	0,076(6)	0,076(6)	0,026(6)	0,000	0,000	0,038(3)

A.2. ($n\text{Bu}_4\text{N}$) [$\text{Ag}_{14}(\text{C}\equiv\text{C}^t\text{Bu})_{12}(\text{CH}_3\text{CN})_2$][$\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$] 2

Kristallzustand	nass
Summenformel	$\text{C}_{102}\text{H}_{129}\text{Ag}_{14}\text{N}_8\text{O}_{40}\text{PW}_{12}$
Kristall	farblose Nadeln (0,10 x 0,10 x 0,05 mm ³)
Kristallsystem, Raumgruppe	tetragonal, P4/n (Nr. 85)
Gitterkonstanten/Å, °	$a = b = 32,582(2)$, $c = 14,106(1)$
Volumen/Å ³	14976(1)
Formeleinheiten	4
Röntgendichte/g cm ⁻³	2,551
Temperatur	100 K
$2\theta_{max}$	52,74 °
hkl -Bereich	$-40 \leq h \leq 40$, $-40 \leq k \leq 40$, $-17 \leq l \leq 17$
F(000)	10506
Absorptionskoeffizient μ/mm^{-1}	11,028
Zahl der gemessenen Reflexe	120734
davon symmetrieunabhängig	15357 ($R_{int} = 0,0551$)
Anzahl der Parameter	590
Restelektronendichte/e·Å ⁻³ (max/min)	2,06/-1,97
R_1 ($I > 2\sigma(I)$)	0,0394
wR_2 ($I > 2\sigma(I)$)	0,0914
R_1 (alle Daten)	0,0524
wR_2 (alle Daten)	0,1043
Datenbank	-
freies Volumen	20,5 %
freies Volumen mit Lösungsmittel	5,9 %
Lösungsmittel pro Formeleinheit	3 AN
Besonderheiten	ein Polyoxometallat und beide ($n\text{Bu}_4\text{N}$) ⁺ fehlgeordnet, H Atome fehlen an Kationen

Tabelle A.5.: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsfaktoren (Å²) von **2**.

U_{eq} ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U_{eq}
W1	0,821241(12)	0,719713(13)	1,14416(3)	0,02577(10)
W2	0,719771(14)	0,678792(13)	0,78752(3)	0,02856(10)
W3	0,791001(13)	0,648854(12)	0,96579(3)	0,02707(10)
W5	0,672669(12)	0,251541(12)	0,17818(3)	0,02541(10)
W6	0,677198(13)	0,331566(12)	-0,00776(3)	0,02521(10)
W7	0,757241(13)	0,327054(12)	0,17799(3)	0,02460(10)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
P1	0,7500	0,7500	0,9662(3)	0,0154(9)
P2	0,7500	0,2500	0,0000	0,0145(8)
O1	0,7712(3)	0,6977(3)	1,1887(7)	0,065(3)
O2	0,8544(2)	0,7060(3)	1,2288(5)	0,047(2)
O3	0,8551(3)	0,7495(3)	1,0589(6)	0,065(3)
O4	0,8244(3)	0,6752(3)	1,0592(7)	0,062(3)
O5	0,6976(3)	0,7283(3)	0,7422(7)	0,068(3)
O6	0,7061(3)	0,6459(3)	0,7024(5)	0,050(2)
O7	0,7499(3)	0,6451(3)	0,8732(7)	0,067(3)
O8	0,6751(3)	0,6760(3)	0,8744(7)	0,064(3)
O9	0,8100(3)	0,6012(2)	0,9663(6)	0,045(2)
O10	0,7144(3)	0,7357(4)	0,9043(8)	0,017(2)
O11	0,7639(4)	0,7144(4)	1,0286(9)	0,024(3)
O12	0,6430(2)	0,3705(2)	0,0125(5)	0,0354(17)
O13	0,72147(19)	0,2245(2)	0,0622(4)	0,0223(14)
O14	0,7200(2)	0,3433(2)	0,0805(4)	0,0265(14)
O15	0,6448(2)	0,2109(2)	0,1048(5)	0,0290(15)
O16	0,7174(2)	0,2868(2)	0,2104(4)	0,0259(15)
O17	0,7501(2)	0,3631(2)	0,2636(5)	0,0363(18)
O18	0,8014(2)	0,3500(2)	0,1047(4)	0,0268(15)
O19	0,7021(2)	0,2074(2)	0,2362(4)	0,0270(15)
O20	0,6610(2)	0,2906(2)	0,0807(4)	0,0267(15)
O21	0,6372(2)	0,2624(2)	0,2626(5)	0,0412(19)
Ag2	0,45242(2)	0,41539(2)	0,52282(5)	0,02811(17)
Ag3	0,49202(2)	0,52209(2)	0,71268(5)	0,02799(17)
Ag4	0,46782(2)	0,58550(2)	0,57542(5)	0,03021(17)
Ag5	0,42145(2)	0,45584(2)	0,34672(5)	0,02967(17)
Ag6	0,51442(2)	0,43594(2)	0,67527(6)	0,03112(18)
Ag7	0,41741(2)	0,48914(2)	0,61815(5)	0,03056(17)
Ag8	0,41305(2)	0,53886(2)	0,43887(5)	0,02722(16)
N1	0,3711(3)	0,4352(3)	0,2376(7)	0,043(2)
N2	0,7500	0,7500	0,4655(12)	0,035(4)
N3	0,4713(5)	0,6769(5)	0,0881(12)	0,087(4)
N4	0,2895(5)	0,4850(5)	0,9082(13)	0,095(5)
N5	0,3201(6)	0,5736(7)	0,2539(15)	0,054(6)
C1	0,5174(3)	0,5800(3)	0,6949(7)	0,026(2)
C2	0,5238(3)	0,6162(3)	0,7123(7)	0,032(2)
C3	0,5321(4)	0,6600(4)	0,7354(9)	0,042(3)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
C4	0,5779(4)	0,6666(4)	0,7323(10)	0,054(3)
C5	0,5151(4)	0,6678(4)	0,8359(9)	0,052(3)
C6	0,5103(5)	0,6865(5)	0,6604(10)	0,061(4)
C7	0,4581(3)	0,4698(3)	0,7450(7)	0,030(2)
C8	0,4381(3)	0,4420(3)	0,7799(7)	0,030(2)
C9	0,4138(3)	0,4090(3)	0,8248(8)	0,035(2)
C10	0,4376(4)	0,3910(4)	0,9074(10)	0,055(3)
C11	0,3735(4)	0,4275(4)	0,8613(10)	0,052(3)
C12	0,4041(4)	0,3757(4)	0,7507(9)	0,048(3)
C13	0,3960(3)	0,4424(3)	0,5010(7)	0,029(2)
C14	0,3594(3)	0,4491(3)	0,5087(7)	0,029(2)
C15	0,3148(4)	0,4556(4)	0,5150(9)	0,044(3)
C16	0,3039(7)	0,5018(6)	0,4788(15)	0,100(6)
C17	0,2917(8)	0,4298(8)	0,4538(19)	0,140(10)
C18	0,3010(8)	0,4593(8)	0,6108(18)	0,134(9)
C19	0,5054(3)	0,3848(3)	0,5632(7)	0,028(2)
C20	0,5325(3)	0,3627(3)	0,5907(7)	0,029(2)
C21	0,5643(4)	0,3326(4)	0,6207(8)	0,040(3)
C22	0,5441(5)	0,2940(4)	0,6556(11)	0,060(4)
C23	0,5898(6)	0,3219(6)	0,5338(14)	0,090(6)
C24	0,5920(5)	0,3527(5)	0,6926(12)	0,071(4)
C25	0,4022(3)	0,5576(3)	0,5768(7)	0,028(2)
C26	0,3931(3)	0,5714(3)	0,6537(7)	0,028(2)
C27	0,3796(3)	0,5895(3)	0,7462(7)	0,032(2)
C28	0,3387(4)	0,5706(4)	0,7741(9)	0,050(3)
C29	0,3766(4)	0,6356(4)	0,7369(10)	0,056(3)
C30	0,4113(4)	0,5790(4)	0,8229(8)	0,042(3)
C31	0,4232(3)	0,5283(3)	0,2961(7)	0,026(2)
C32	0,4257(3)	0,5283(3)	0,2106(7)	0,031(2)
C33	0,4278(4)	0,5288(4)	0,1045(8)	0,039(3)
C34	0,4523(4)	0,5651(4)	0,0720(10)	0,056(3)
C35	0,3846(4)	0,5311(4)	0,0651(9)	0,047(3)
C36	0,4483(4)	0,4879(4)	0,0724(10)	0,058(4)
C37	0,3474(4)	0,4312(4)	0,1798(8)	0,039(3)
C38	0,3165(4)	0,4268(4)	0,1037(10)	0,055(3)
C50	0,7668(7)	0,7164(7)	0,4003(16)	0,036(5)
C51	0,7873(4)	0,6817(4)	0,4632(9)	0,045(3)
C52	0,7948(7)	0,6436(7)	0,3921(17)	0,040(5)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
C53	0,7984(8)	0,6438(8)	0,5369(18)	0,044(6)
C54	0,8172(5)	0,6095(5)	0,4611(12)	0,073(5)
C55	0,7146(7)	0,7316(7)	0,5298(16)	0,035(5)
C100	0,4554(5)	0,7024(5)	0,0438(12)	0,067(4)
C103	0,2294(5)	0,4442(5)	0,8287(12)	0,072(4)
C101	0,4377(5)	0,7361(5)	-0,0060(12)	0,074(5)
C102	0,2635(5)	0,4662(5)	0,8716(12)	0,066(4)
C104	0,2977(6)	0,5371(6)	0,2249(14)	0,027(4)
C105	0,2822(7)	0,5129(7)	0,2048(15)	0,034(5)

Tabelle A.6.: Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für **2**.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
W1	0,0249(2)	0,0350(2)	0,01734(18)	0,00128(15)	-0,00296(15)	0,00449(16)
W2	0,0387(2)	0,0295(2)	0,01745(19)	-0,00466(15)	-0,00182(16)	-0,00516(18)
W3	0,0281(2)	0,0220(2)	0,0311(2)	-0,00195(16)	-0,00166(17)	0,00319(16)
W5	0,0296(2)	0,0292(2)	0,01745(19)	-0,00302(15)	0,00642(15)	-0,00580(16)
W6	0,0287(2)	0,0274(2)	0,01948(19)	-0,00198(15)	0,00351(15)	0,00562(16)
W7	0,0333(2)	0,0251(2)	0,01544(18)	-0,00343(14)	0,00209(15)	-0,00632(16)
P1	0,0176(13)	0,0176(13)	0,0109(19)	0,000	0,000	0,000
P2	0,0173(13)	0,0173(13)	0,0090(18)	0,000	0,000	0,000
O1	0,036(5)	0,089(7)	0,068(6)	-0,059(6)	0,022(4)	-0,026(5)
O2	0,039(5)	0,070(6)	0,032(4)	0,001(4)	-0,012(3)	0,019(4)
O3	0,100(8)	0,040(5)	0,055(6)	0,022(4)	0,053(6)	0,029(5)
O4	0,036(5)	0,085(7)	0,065(6)	-0,051(5)	0,024(4)	-0,027(5)
O5	0,099(8)	0,038(5)	0,066(6)	0,026(4)	0,055(6)	0,034(5)
O6	0,081(7)	0,044(5)	0,025(4)	-0,009(3)	-0,017(4)	-0,020(4)
O7	0,039(5)	0,092(8)	0,071(6)	0,055(6)	-0,025(5)	-0,030(5)
O8	0,088(7)	0,039(5)	0,063(6)	0,021(4)	0,045(5)	0,026(5)
O9	0,042(5)	0,029(4)	0,065(6)	0,004(4)	-0,001(4)	0,005(4)
O10	0,013(6)	0,031(7)	0,007(5)	-0,002(5)	0,000(4)	-0,001(5)
O11	0,021(7)	0,030(7)	0,020(6)	-0,003(5)	-0,006(5)	0,001(5)
O12	0,038(4)	0,038(4)	0,030(4)	-0,002(3)	0,008(3)	0,013(3)
O13	0,024(3)	0,030(4)	0,012(3)	-0,001(3)	-0,001(2)	-0,001(3)
O14	0,035(4)	0,028(4)	0,016(3)	-0,005(3)	0,005(3)	0,000(3)
O15	0,033(4)	0,027(4)	0,027(4)	-0,006(3)	-0,001(3)	-0,008(3)
O16	0,035(4)	0,025(3)	0,018(3)	-0,002(3)	0,005(3)	-0,007(3)
O17	0,054(5)	0,033(4)	0,022(3)	-0,010(3)	0,002(3)	-0,010(4)

Weiter auf der nächsten Seite

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
O18	0,034(4)	0,026(4)	0,020(3)	-0,001(3)	0,000(3)	-0,007(3)
O19	0,036(4)	0,031(4)	0,014(3)	-0,001(3)	0,000(3)	-0,007(3)
O20	0,027(4)	0,033(4)	0,021(3)	0,002(3)	0,004(3)	-0,002(3)
O21	0,049(5)	0,049(5)	0,025(4)	-0,007(3)	0,012(3)	-0,008(4)
Ag2	0,0267(4)	0,0292(4)	0,0284(4)	0,0004(3)	-0,0019(3)	0,0042(3)
Ag3	0,0304(4)	0,0248(4)	0,0288(4)	0,0019(3)	-0,0003(3)	-0,0017(3)
Ag4	0,0298(4)	0,0320(4)	0,0288(4)	0,0003(3)	-0,0015(3)	0,0003(3)
Ag5	0,0319(4)	0,0302(4)	0,0269(4)	0,0004(3)	-0,0001(3)	0,0013(3)
Ag6	0,0322(4)	0,0304(4)	0,0307(4)	-0,0038(3)	-0,0004(3)	0,0004(3)
Ag7	0,0329(4)	0,0295(4)	0,0293(4)	-0,0008(3)	-0,0031(3)	0,0020(3)
Ag8	0,0307(4)	0,0297(4)	0,0213(3)	-0,0032(3)	0,0003(3)	0,0019(3)
N1	0,040(6)	0,047(6)	0,041(5)	0,003(5)	-0,008(4)	-0,005(5)
N2	0,039(6)	0,039(6)	0,026(9)	0,000	0,000	0,000
N4	0,068(10)	0,108(13)	0,110(13)	0,024(10)	-0,008(9)	0,017(9)
N3	0,084(11)	0,067(9)	0,110(12)	0,002(9)	-0,002(9)	-0,001(8)
N5	0,039(12)	0,067(15)	0,057(13)	0,034(11)	0,004(10)	0,036(11)

A.3. $[\text{Ag}_{15}(\text{C}\equiv\text{C}^t\text{Bu})_{12}(\text{CH}_3\text{CN})_5][\text{PW}_{12}\text{O}_{40}] \mathbf{3}$

Kristallzustand	nass
Summenformel	$\text{C}_{80}\text{H}_{120}\text{Ag}_{15}\text{N}_4\text{O}_{40}\text{PW}_{12}$
Kristall	farblose Plättchen (0,35 x 0,20 x 0,05 mm ³)
Kristallsystem, Raumgruppe	monoklin, $\text{P}2_1/c$ (Nr. 14)
Gitterkonstanten/Å, °	$a = 17,531(1)$, $b = 19,112(2)$, $c = 19,792(2)$, $\beta = 92,655(1)$
Volumen/Å ³	6624(1)
Formeleinheiten	2
Röntgendichte/g cm ⁻³	2,824
Temperatur	100 K
$2\theta_{max}$	41,72 °
hkl -Bereich	$-17 \leq h \leq 17$, $-19 \leq k \leq 19$, $-19 \leq l \leq 19$
F(000)	5112
Absorptionskoeffizient μ/mm^{-1}	12,602
Zahl der gemessenen Reflexe	31978
davon symmetrieunabhängig	6948 ($R_{int} = 0,0417$)
Anzahl der Parameter	532
Restelektronendichte/e·Å ⁻³ (max/min)	2,74/-1,67
R_1 ($I > 2\sigma(I)$)	0,0502
wR_2 ($I > 2\sigma(I)$)	0,1213
R_1 (alle Daten)	0,0652
wR_2 (alle Daten)	0,1297
Datenbank	CCDC 714955
freies Volumen	21,7 %
freies Volumen mit Lösungsmittel	-
Lösungsmittel pro Formeleinheit	-
Besonderheiten	ein Polyoxometallat fehlgeordnet

Tabelle A.7.: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsfaktoren (Å²) von **3**.

U_{eq} ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U_{eq}
W1	0,08711(6)	0,90032(5)	-0,12606(4)	0,0448(3)
W2	-0,00033(5)	0,81473(4)	0,00954(5)	0,0458(3)
W3	0,11446(5)	0,91297(5)	0,12732(4)	0,0435(3)
W4	0,20325(5)	0,99824(5)	-0,00876(5)	0,0403(3)
W5	0,08880(6)	1,08501(5)	-0,13564(4)	0,0455(3)
W6	0,11508(5)	1,09945(5)	0,11786(4)	0,0397(3)
P1	0,0000	1,0000	0,0000	0,0270(17)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
O1	0,1273(9)	0,8518(8)	-0,1850(7)	0,060(4)
O2	0,0676(9)	0,8332(9)	-0,0584(9)	0,076(6)
O3	0,1727(12)	0,9267(8)	-0,0711(8)	0,088(6)
O4	0,0869(12)	0,9909(8)	-0,1636(8)	0,083(6)
O5	0,0800(9)	0,8384(10)	0,0714(10)	0,082(6)
O6	-0,0015(9)	0,7284(8)	0,0138(8)	0,067(5)
O8	0,1870(9)	0,9336(7)	0,0613(8)	0,059(4)
O9	0,1678(11)	0,8726(9)	0,1885(8)	0,083(6)
O10	0,0170(10)	0,9124(11)	0,1633(10)	0,099(7)
O11	-0,0693(14)	1,0034(12)	0,0448(13)	0,036(7)
O12	0,1210(10)	1,0078(8)	0,1549(8)	0,065(5)
O13	0,1850(9)	1,0699(9)	0,0533(9)	0,076(6)
O14	0,0177(9)	1,1057(10)	0,1540(8)	0,077(5)
O15	0,0823(9)	1,1686(10)	0,0562(9)	0,082(6)
O16	0,1703(11)	1,1455(10)	0,1729(8)	0,087(6)
O17	0,1729(12)	1,0628(8)	-0,0777(8)	0,087(6)
O18	0,1294(8)	1,1266(8)	-0,1983(7)	0,053(4)
O19	0,2960(9)	0,9985(9)	-0,0112(10)	0,080(6)
O20	0,0674(9)	1,1583(11)	-0,0761(9)	0,087(6)
O21	0,0735(13)	1,0053(13)	0,0405(12)	0,036(7)
O22	-0,0088(12)	0,9346(12)	-0,0422(12)	0,027(6)
O23	0,0079(12)	0,9374(11)	0,0487(11)	0,023(6)
Ag1	0,67823(10)	0,50830(9)	1,10727(10)	0,0552(5)
Ag2	0,67793(10)	0,51960(10)	0,95455(10)	0,0560(5)
Ag3	0,61200(12)	0,37717(11)	0,95273(13)	0,0845(7)
Ag4	0,46112(10)	0,39324(10)	0,87827(10)	0,0576(5)
Ag5	0,54863(10)	0,52142(11)	0,84932(10)	0,0629(6)
Ag6	0,43705(11)	0,61205(10)	0,91017(12)	0,0709(6)
Ag7	0,58379(11)	0,64315(9)	0,98424(10)	0,0598(5)
Ag8	0,84424(19)	0,4573(2)	0,94978(18)	0,0531(9)
N1	0,8001(12)	0,5059(10)	1,1634(10)	0,059(5)
N2	0,905(2)	0,3714(19)	0,8798(18)	0,048(9)
N3	0,868(2)	0,561(2)	0,875(2)	0,067(11)
C1	0,8631(14)	0,5085(12)	1,1753(12)	0,055(6)
C2	0,9447(13)	0,5123(12)	1,1936(12)	0,059(7)
C3	0,7169(15)	0,4363(14)	1,0099(13)	0,067(7)
C4	0,7447(15)	0,3844(15)	1,0362(14)	0,074(8)
C5	0,7815(17)	0,3199(16)	1,0678(15)	0,083(8)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
C6	0,8632(16)	0,3314(16)	1,0904(15)	0,091(9)
C7	0,7759(19)	0,2606(17)	1,0122(16)	0,106(11)
C8	0,735(2)	0,301(2)	1,127(2)	0,149(16)
C9	0,5678(18)	0,4002(15)	0,8472(15)	0,084(9)
C10	0,626(2)	0,3916(19)	0,8172(18)	0,110(11)
C11	0,694(2)	0,3784(19)	0,7725(18)	0,104(11)
C12	0,678(2)	0,3843(19)	0,7002(18)	0,118(12)
C13	0,726(2)	0,308(2)	0,7971(19)	0,130(13)
C14	0,755(2)	0,442(2)	0,793(2)	0,137(14)
C15	0,3540(14)	0,3707(12)	0,9092(12)	0,056(6)
C16	0,2932(13)	0,3454(12)	0,9238(11)	0,052(6)
C17	0,2184(14)	0,3116(13)	0,9342(13)	0,063(7)
C18	0,1775(14)	0,2971(14)	0,8674(12)	0,070(7)
C19	0,2377(17)	0,2414(16)	0,9726(15)	0,094(10)
C20	0,1749(18)	0,3578(17)	0,9763(16)	0,099(10)
C21	0,6389(13)	0,5993(13)	0,8914(12)	0,057(6)
C22	0,6353(18)	0,6404(17)	0,8471(17)	0,094(10)
C23	0,643(2)	0,683(2)	0,779(2)	0,122(12)
C24	0,562(2)	0,716(2)	0,772(2)	0,136(14)
C25	0,672(2)	0,635(2)	0,723(2)	0,139(14)
C26	0,699(2)	0,733(2)	0,795(2)	0,147(15)
C27	0,4602(16)	0,6911(16)	0,9785(14)	0,078(8)
C28	0,4772(17)	0,7508(17)	0,9970(15)	0,087(9)
C29	0,461(3)	0,814(3)	1,046(3)	0,19(2)
C30	0,538(2)	0,831(2)	1,074(2)	0,130(13)
C31	0,426(3)	0,871(2)	0,997(2)	0,159(17)
C32	0,547(4)	0,832(4)	0,982(3)	0,27(3)
C33	0,4192(14)	0,5457(13)	0,8290(13)	0,061(7)
C34	0,4038(14)	0,5238(13)	0,7732(13)	0,058(6)
C35	0,386(2)	0,504(2)	0,7057(19)	0,110(11)
C50	0,4570(17)	0,4870(15)	0,6692(15)	0,087(9)
C62	0,348(4)	0,437(4)	0,704(4)	0,31(4)
C63	0,354(3)	0,575(3)	0,666(3)	0,20(2)
C100	0,935(2)	0,3321(19)	0,8467(18)	0,031(9)
C101	0,962(2)	0,2822(19)	0,8022(18)	0,031(9)
C103	0,894(2)	0,612(2)	0,8593(18)	0,031(9)
C104	0,924(3)	0,668(2)	0,846(2)	0,054(12)

Tabelle A.8.: Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für **3**.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
W1	0,0630(6)	0,0355(5)	0,0365(5)	0,0012(4)	0,0087(5)	0,0046(5)
W2	0,0489(6)	0,0262(5)	0,0629(6)	0,0021(4)	0,0110(5)	-0,0080(4)
W3	0,0371(5)	0,0507(6)	0,0412(5)	0,0093(4)	-0,0159(4)	-0,0066(4)
W4	0,0304(5)	0,0426(6)	0,0470(6)	0,0081(4)	-0,0087(4)	-0,0068(4)
W5	0,0602(6)	0,0432(6)	0,0331(5)	0,0038(4)	0,0041(4)	-0,0238(5)
W6	0,0399(5)	0,0418(6)	0,0363(5)	0,0017(4)	-0,0123(4)	-0,0150(4)
P1	0,024(4)	0,031(4)	0,026(4)	0,000(4)	0,000(3)	-0,008(3)
O1	0,071(11)	0,064(11)	0,047(9)	-0,015(8)	0,013(8)	0,012(9)
O2	0,049(10)	0,082(13)	0,097(13)	0,054(11)	0,010(9)	0,032(9)
O3	0,163(19)	0,043(10)	0,054(11)	0,007(8)	-0,053(12)	-0,018(11)
O4	0,161(18)	0,043(10)	0,040(9)	0,006(8)	-0,060(11)	-0,013(10)
O5	0,040(10)	0,097(14)	0,110(15)	-0,055(12)	0,021(10)	-0,022(9)
O6	0,073(11)	0,041(10)	0,085(12)	0,010(9)	-0,005(9)	-0,009(8)
O8	0,068(11)	0,034(9)	0,073(11)	0,005(8)	0,002(9)	0,000(8)
O9	0,113(15)	0,077(13)	0,057(11)	0,025(10)	-0,017(10)	0,023(11)
O10	0,062(12)	0,132(18)	0,103(15)	-0,068(13)	0,015(11)	-0,043(12)
O11	0,037(16)	0,028(15)	0,040(16)	0,002(12)	-0,026(14)	0,003(12)
O12	0,088(12)	0,055(11)	0,054(10)	0,017(8)	0,020(9)	0,001(9)
O13	0,057(11)	0,084(13)	0,085(13)	0,061(11)	-0,008(9)	-0,018(9)
O14	0,057(11)	0,105(14)	0,069(11)	0,051(11)	0,012(9)	0,016(10)
O15	0,050(10)	0,117(16)	0,082(13)	0,049(12)	0,017(9)	0,022(10)
O16	0,124(16)	0,089(13)	0,049(10)	-0,016(9)	-0,002(10)	-0,074(12)
O17	0,153(18)	0,036(10)	0,064(11)	0,012(8)	-0,060(12)	-0,014(10)
O18	0,061(10)	0,061(10)	0,035(8)	0,006(7)	-0,001(7)	-0,027(8)
O19	0,055(11)	0,066(12)	0,121(16)	0,004(11)	0,014(11)	-0,011(9)
O20	0,041(10)	0,125(16)	0,096(14)	-0,057(12)	0,018(9)	-0,040(10)
O21	0,024(15)	0,049(18)	0,035(16)	0,010(13)	0,002(13)	-0,016(13)
O22	0,008(12)	0,037(16)	0,037(15)	0,022(13)	0,007(11)	0,000(11)
O23	0,028(14)	0,011(13)	0,029(14)	0,008(11)	0,005(11)	-0,011(11)
Ag1	0,0405(10)	0,0534(12)	0,0704(13)	-0,0055(9)	-0,0126(9)	0,0030(9)
Ag2	0,0445(10)	0,0581(12)	0,0641(12)	-0,0090(9)	-0,0118(9)	0,0108(9)
Ag3	0,0610(13)	0,0610(14)	0,128(2)	-0,0246(13)	-0,0313(13)	0,0154(11)
Ag4	0,0361(10)	0,0565(12)	0,0800(13)	-0,0078(10)	0,0008(9)	-0,0048(9)
Ag5	0,0375(10)	0,0898(15)	0,0610(12)	-0,0025(11)	-0,0019(9)	-0,0165(10)
Ag6	0,0581(12)	0,0481(12)	0,1036(17)	-0,0148(11)	-0,0270(12)	0,0045(10)
Ag7	0,0554(12)	0,0451(11)	0,0778(14)	0,0044(10)	-0,0088(10)	-0,0081(9)
Ag8	0,038(2)	0,068(2)	0,054(2)	-0,0031(19)	0,0057(17)	0,0001(18)

A.4. $[\text{Ag}_{42}(\text{CO}_3)(\text{C}\equiv\text{C}^t\text{Bu})_{27}(\text{CH}_3\text{CN})_2][\text{CoW}_{12}\text{O}_{40}]_2^+ \cdot 4$

Kristallzustand	nass
Summenformel	$\text{C}_{171}\text{H}_0\text{Ag}_{42}\text{Co}_2\text{N}_4\text{O}_{83}\text{W}_{24}$
Kristall	türkise Rhomben (0,35 x 0,20 x 0,05 mm ³)
Kristallsystem, Raumgruppe	orthorhombisch, <i>Pmmn</i> (Nr. 59)
Gitterkonstanten/Å, °	$a = 21,389(1)$, $b = 30,437(2)$, $c = 20,784(1)$
Volumen/Å ³	13531(1)
Formeleinheiten	2
Röntgendichte/g cm ⁻³	3,068
Temperatur	100 K
$2\theta_{max}$	53,10 °
<i>hkl</i> -Bereich	$-26 \leq h \leq 26$, $-38 \leq k \leq 38$, $-26 \leq l \leq 26$
F(000)	11044
Absorptionskoeffizient μ/mm^{-1}	13,289
Zahl der gemessenen Reflexe	121697
davon symmetrieunabhängig	14751 ($R_{int} = 0,0578$)
Anzahl der Parameter	577
Restelektronendichte/e·Å ⁻³ (max/min)	2,74/-1,67
R_1 ($I > 2\sigma(I)$)	0,0473
wR_2 ($I > 2\sigma(I)$)	0,1333
R_1 (alle Daten)	0,0703
wR_2 (alle Daten)	0,1564
Datenbank	CCDC 774418
freies Volumen	11,4 %
freies Volumen mit Lösungsmittel	-
Lösungsmittel pro Formeleinheit	-
Besonderheiten	keine H Atome, Gegenion fehlt

Tabelle A.9.: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsfaktoren (Å²) von **4**.

U_{eq} ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U_{eq}
W1	0,67380(2)	0,635233(15)	0,23204(2)	0,01969(12)
W2	0,7500	0,63794(2)	0,36824(3)	0,02152(16)
W3	0,66164(3)	0,531940(17)	0,13881(3)	0,02705(13)
W4	0,58611(3)	0,534354(17)	0,27434(3)	0,02792(14)
W5	0,67451(3)	0,537968(18)	0,43079(3)	0,02939(14)
W6	0,66303(3)	0,447031(17)	0,23351(3)	0,03367(15)
W7	0,7500	0,45019(2)	0,38823(4)	0,0338(2)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
Co1	0,7500	0,53927(7)	0,28074(11)	0,0189(5)
O1	0,6847(4)	0,6642(2)	0,3152(4)	0,0190(17)
O2	0,7500	0,6626(3)	0,1995(5)	0,015(2)
O3	0,6229(4)	0,6744(3)	0,1993(4)	0,0198(17)
O4	0,6773(4)	0,5937(3)	0,1639(4)	0,0202(17)
O5	0,6167(4)	0,5959(3)	0,2721(4)	0,0215(17)
O6	0,5088(4)	0,5434(3)	0,2919(5)	0,030(2)
O7	0,5812(4)	0,5425(3)	0,1802(5)	0,028(2)
O8	0,6204(4)	0,5297(3)	0,3586(4)	0,0265(19)
O9	0,6779(4)	0,5179(3)	0,2385(4)	0,0236(18)
O10	0,6373(5)	0,5405(3)	0,0606(5)	0,032(2)
O11	0,7500	0,5263(4)	0,1269(6)	0,023(3)
O12	0,6497(4)	0,4703(3)	0,1460(5)	0,029(2)
O13	0,7500	0,4419(4)	0,2124(7)	0,034(3)
O14	0,5836(4)	0,4723(3)	0,2616(5)	0,030(2)
O15	0,6369(5)	0,3949(3)	0,2183(6)	0,041(3)
O16	0,6893(4)	0,4434(3)	0,3208(5)	0,031(2)
O17	0,7500	0,3989(4)	0,4217(8)	0,041(4)
O18	0,6860(5)	0,4761(3)	0,4428(5)	0,035(2)
O19	0,7500	0,5200(4)	0,3672(6)	0,025(3)
O20	0,7500	0,5476(4)	0,4822(6)	0,028(3)
O21	0,6203(5)	0,5478(3)	0,4904(5)	0,033(2)
O22	0,6895(4)	0,5975(3)	0,4000(4)	0,0256(19)
O23	0,7500	0,6761(4)	0,4300(6)	0,024(3)
O24	0,7500	0,6022(3)	0,2780(5)	0,015(2)
O98	0,6991(6)	0,7500	0,2477(5)	0,022(3)
O99	0,7500	0,7500	0,3383(9)	0,031(4)
Ag1	0,65199(5)	0,62870(4)	0,04756(5)	0,0336(2)
Ag2	0,52901(5)	0,61074(3)	0,13775(5)	0,0322(2)
Ag3	0,50989(6)	0,63344(4)	0,31376(5)	0,0365(3)
Ag4	0,59618(7)	0,62887(4)	0,49368(6)	0,0482(3)
Ag5	0,7500	0,61624(7)	0,56845(11)	0,0625(6)
Ag6	0,68066(8)	0,69761(4)	0,53240(7)	0,0579(4)
Ag7	0,57916(9)	0,69701(5)	0,39752(8)	0,0707(5)
Ag8	0,50330(5)	0,69960(3)	0,21634(5)	0,0309(2)
Ag9	0,56859(5)	0,69885(3)	0,08787(5)	0,0325(2)
Ag10	0,7500	0,69764(6)	0,05904(10)	0,0517(5)
Ag11	0,67987(7)	0,7500	0,14855(7)	0,0338(3)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
Ag12	0,60752(8)	0,7500	0,28554(7)	0,0334(3)
Ag13	0,68354(14)	0,7500	0,40856(12)	0,0762(7)
N1	0,7500	0,5483(12)	0,6473(17)	0,103(10)
N2	0,2500	0,6450(12)	1,0166(18)	0,109(11)
C1	0,7500	0,6337(6)	0,0156(9)	0,030(4)
C2	0,7500	0,6041(7)	-0,0227(10)	0,033(4)
C3	0,7500	0,5702(8)	-0,0761(12)	0,047(6)
C4	0,6866(16)	0,5746(11)	-0,1085(16)	0,116(10)
C5	0,7500	0,5231(11)	-0,0477(16)	0,073(8)
C6	0,5518(6)	0,6348(4)	0,0392(6)	0,029(3)
C7	0,5198(7)	0,6186(5)	-0,0006(7)	0,036(3)
C8	0,4820(9)	0,5976(7)	-0,0514(9)	0,057(5)
C9	0,4130(17)	0,6105(12)	-0,0451(17)	0,127(11)
C10	0,485(2)	0,5483(15)	-0,043(2)	0,179(19)
C11	0,5069(19)	0,6094(14)	-0,114(2)	0,149(14)
C12	0,4638(7)	0,6337(5)	0,2199(7)	0,032(3)
C13	0,4291(7)	0,6045(5)	0,2050(7)	0,035(3)
C14	0,3825(8)	0,5691(6)	0,1880(8)	0,048(4)
C15	0,4153(10)	0,5285(7)	0,1621(10)	0,060(5)
C16	0,3351(12)	0,5883(8)	0,1394(12)	0,080(7)
C17	0,3483(11)	0,5573(8)	0,2506(11)	0,075(6)
C18	0,5251(7)	0,6414(5)	0,4168(7)	0,037(3)
C19	0,4873(7)	0,6154(5)	0,4411(7)	0,036(3)
C20	0,4390(8)	0,5861(6)	0,4677(8)	0,048(4)
C21	0,4468(11)	0,5409(7)	0,4391(11)	0,069(6)
C22	0,3750(12)	0,6063(9)	0,4554(12)	0,085(7)
C23	0,4493(14)	0,5860(9)	0,5415(14)	0,097(8)
C24	0,6502(9)	0,6388(6)	0,5808(9)	0,052(4)
C25	0,6224(8)	0,6222(6)	0,6252(8)	0,048(4)
C26	0,5884(11)	0,6031(7)	0,6837(10)	0,068(6)
C27	0,6322(14)	0,6068(9)	0,7400(13)	0,094(8)
C28	0,5788(12)	0,5520(8)	0,6686(12)	0,079(7)
C29	0,5253(13)	0,6281(9)	0,6966(13)	0,087(7)
C30	0,7500	0,7500	0,5668(12)	0,026(5)
C31	0,7500	0,7500	0,624(2)	0,072(12)
C32	0,723(2)	0,7500	0,696(2)	0,045(11)
C33	0,7500	0,7083(11)	0,7249(15)	0,069(8)
C34	0,649(3)	0,7500	0,708(3)	0,068(16)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
C35	0,6106(18)	0,7500	0,4756(18)	0,085(10)
C36	0,5785(18)	0,7500	0,5302(18)	0,085(10)
C37	0,5342(14)	0,7500	0,5740(14)	0,062(7)
C38	0,4934(15)	0,7093(10)	0,5762(15)	0,104(9)
C39	0,578(3)	0,7500	0,646(3)	0,15(2)
C40	0,5143(9)	0,7500	0,3109(9)	0,031(4)
C41	0,4611(10)	0,7500	0,3269(10)	0,037(5)
C42	0,3969(13)	0,7500	0,3506(12)	0,052(6)
C43	0,3631(13)	0,7072(8)	0,3322(12)	0,084(7)
C44	0,402(2)	0,7500	0,431(2)	0,115(14)
C45	0,5040(9)	0,7500	0,1310(9)	0,026(4)
C46	0,4516(10)	0,7500	0,1099(10)	0,037(5)
C47	0,3840(14)	0,7500	0,0865(14)	0,061(7)
C48	0,390(4)	0,7500	0,015(4)	0,20(3)
C49	0,351(2)	0,7106(14)	0,103(2)	0,156(15)
C50	0,6622(10)	0,7500	0,0503(10)	0,032(4)
C51	0,6419(11)	0,7500	-0,0041(11)	0,040(5)
C52	0,6189(12)	0,7500	-0,0711(12)	0,047(6)
C53	0,5470(16)	0,7500	-0,0731(16)	0,073(8)
C54	0,6419(10)	0,7071(7)	-0,1056(10)	0,063(5)
C55	0,7500	0,5139(11)	0,6249(15)	0,066(8)
C56	0,7500	0,4734(15)	0,599(2)	0,102(13)
C57	0,2500	0,6178(17)	0,982(2)	0,115(15)
C58	0,2500	0,5703(18)	0,953(3)	0,131(17)
C99	0,7500	0,7500	0,2775(10)	0,013(4)

Tabelle A.10.: Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 4.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
W1	0,0210(2)	0,0124(2)	0,0257(2)	-0,00101(18)	-0,00566(19)	0,00056(18)
W2	0,0341(4)	0,0149(3)	0,0156(3)	0,0026(2)	0,000	0,000
W3	0,0313(3)	0,0194(3)	0,0305(3)	-0,0072(2)	-0,0035(2)	0,0029(2)
W4	0,0211(3)	0,0212(3)	0,0414(3)	0,0078(2)	0,0039(2)	0,0011(2)
W5	0,0299(3)	0,0236(3)	0,0347(3)	0,0060(2)	0,0072(2)	-0,0034(2)
W6	0,0298(3)	0,0118(2)	0,0593(4)	-0,0007(2)	-0,0074(3)	-0,0032(2)
W7	0,0397(5)	0,0150(4)	0,0468(5)	0,0115(3)	0,000	0,000
Co1	0,0188(11)	0,0107(10)	0,0272(12)	0,0007(9)	0,000	0,000
O1	0,028(4)	0,010(4)	0,019(4)	0,002(3)	0,003(3)	0,001(3)
O2	0,020(6)	0,010(5)	0,014(5)	-0,007(4)	0,000	0,000

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
O3	0,020(4)	0,012(4)	0,026(4)	-0,002(3)	-0,006(3)	-0,002(3)
O4	0,026(4)	0,013(4)	0,022(4)	-0,002(3)	0,000(3)	-0,003(3)
O5	0,020(4)	0,020(4)	0,025(4)	0,004(3)	0,004(3)	0,000(3)
O6	0,020(5)	0,026(5)	0,044(6)	0,009(4)	0,005(4)	-0,001(4)
O7	0,028(5)	0,018(4)	0,039(5)	-0,006(4)	0,000(4)	-0,007(4)
O8	0,020(4)	0,021(4)	0,038(5)	0,006(4)	0,005(4)	-0,001(3)
O9	0,019(4)	0,017(4)	0,034(5)	-0,002(4)	0,000(4)	-0,007(3)
O10	0,037(5)	0,026(5)	0,032(5)	-0,010(4)	-0,004(4)	-0,004(4)
O11	0,023(6)	0,010(5)	0,036(7)	-0,003(5)	0,000	0,000
O12	0,027(5)	0,016(4)	0,045(6)	-0,009(4)	-0,003(4)	-0,004(4)
O13	0,031(7)	0,018(6)	0,052(9)	0,006(6)	0,000	0,000
O14	0,021(5)	0,021(5)	0,047(6)	0,004(4)	-0,002(4)	-0,008(4)
O15	0,033(6)	0,013(4)	0,076(8)	0,000(5)	-0,013(5)	-0,007(4)
O16	0,024(5)	0,017(4)	0,053(6)	0,010(4)	0,000(4)	0,000(4)
O17	0,036(8)	0,023(7)	0,064(10)	0,014(7)	0,000	0,000
O18	0,040(6)	0,020(5)	0,045(6)	0,015(4)	-0,001(5)	-0,002(4)
O19	0,029(7)	0,015(6)	0,032(7)	0,007(5)	0,000	0,000
O20	0,036(7)	0,018(6)	0,031(7)	0,007(5)	0,000	0,000
O21	0,037(6)	0,025(5)	0,038(5)	0,005(4)	0,008(4)	0,000(4)
O22	0,029(5)	0,022(4)	0,026(5)	0,006(4)	0,006(4)	0,000(4)
O23	0,037(7)	0,014(6)	0,022(6)	0,002(5)	0,000	0,000
O24	0,013(5)	0,010(5)	0,021(6)	0,002(4)	0,000	0,000
O98	0,037(7)	0,013(5)	0,016(6)	0,000	0,002(5)	0,000
O99	0,046(12)	0,007(8)	0,039(11)	0,000	0,000	0,000
Ag1	0,0311(6)	0,0353(6)	0,0344(6)	0,0016(4)	0,0040(4)	0,0063(4)
Ag2	0,0338(6)	0,0281(5)	0,0346(5)	-0,0033(4)	-0,0001(4)	-0,0057(4)
Ag3	0,0431(6)	0,0341(6)	0,0323(6)	0,0047(4)	0,0046(5)	0,0104(5)
Ag4	0,0653(9)	0,0328(6)	0,0465(7)	-0,0035(5)	-0,0149(6)	0,0083(6)
Ag5	0,0785(15)	0,0456(11)	0,0635(13)	0,0134(10)	0,000	0,000
Ag6	0,0960(12)	0,0277(6)	0,0499(8)	-0,0026(5)	0,0198(8)	-0,0123(7)
Ag7	0,0834(12)	0,0528(9)	0,0759(11)	0,0189(8)	0,0146(9)	-0,0325(8)
Ag8	0,0351(6)	0,0200(5)	0,0376(6)	0,0025(4)	0,0037(4)	-0,0004(4)
Ag9	0,0446(6)	0,0234(5)	0,0296(5)	-0,0048(4)	-0,0030(5)	0,0046(4)
Ag10	0,0657(13)	0,0310(9)	0,0585(11)	-0,0194(8)	0,000	0,000
Ag11	0,0346(8)	0,0478(9)	0,0191(7)	0,000	-0,0014(6)	0,000
Ag12	0,0387(9)	0,0330(8)	0,0285(7)	0,000	0,0008(6)	0,000
Ag13	0,0957(19)	0,0719(16)	0,0611(14)	0,000	0,0081(13)	0,000

A.5. $[\text{W}_4\text{O}_{16}]\text{Ag}_{37}(\text{C}\equiv\text{C}^t\text{Bu})_{26}(\text{CH}_3\text{CN})_2[\text{PW}_{12}\text{O}_{40}] 5$

Kristallzustand	nass
Summenformel	$\text{C}_{161,5}\text{H}_0\text{Ag}_{37}\text{N}_{3,5}\text{O}_{56}\text{PW}_{16}$
Kristall	farblose Nadeln (0,01 x 0,02 x 0,02 mm ³)
Kristallsystem, Raumgruppe	triklin, $P\bar{1}$ (Nr. 2)
Gitterkonstanten/Å, °	$a = 20,316(1)$, $b = 21,964(2)$, $c = 28,704(2)$ $\alpha = 103,068(1)$, $\beta = 93,894(1)$, $\gamma = 96,906(1)$
Volumen/Å ³	12326(2)
Formeleinheiten	2
Röntgendichte/g cm ⁻³	2,654
Temperatur	100 K
$2\theta_{max}$	41,64 °
hkl -Bereich	$-20 \leq h \leq 20$, $-21 \leq k \leq 21$, $-28 \leq l \leq 28$
F(000)	8759
Absorptionskoeffizient μ/mm^{-1}	10,350
Zahl der gemessenen Reflexe	59268
davon symmetrieunabhängig	25687 ($R_{int} = 0,0576$)
Anzahl der Parameter	1665
Restelektronendichte/e·Å ⁻³ (max/min)	2,94/-2,80
R_1 ($I > 2\sigma(I)$)	0,0653
wR_2 ($I > 2\sigma(I)$)	0,1690
R_1 (alle Daten)	0,1061
wR_2 (alle Daten)	0,2046
Datenbank	-
freies Volumen	-
freies Volumen mit Lösungsmittel	-
Lösungsmittel pro Formeleinheit	-
Besonderheiten	keine H Atome

Tabelle A.11.: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsfaktoren (Å²) von 5. U_{eq} ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U_{eq}
W1	0.26120(6)	0.19797(5)	0.15191(4)	0.0354(3)
W2	0.25874(5)	0.18711(5)	0.27066(4)	0.0332(3)
W3	0.28902(5)	0.06686(5)	0.18255(4)	0.0338(3)
W4	0.22978(6)	0.31787(5)	0.23457(4)	0.0362(3)
W5	0.83386(6)	0.76083(6)	0.15908(5)	0.0484(4)
W6	0.86599(6)	0.79564(6)	0.33865(5)	0.0468(4)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
W7	0.66064(6)	0.74671(7)	0.16177(5)	0.0557(4)
W8	0.68076(6)	0.61809(6)	0.33101(5)	0.0447(4)
W9	0.93460(6)	0.70340(7)	0.24338(5)	0.0516(4)
W10	0.68700(7)	0.78011(7)	0.34194(5)	0.0565(4)
W11	0.85909(7)	0.63243(7)	0.32706(5)	0.0575(4)
W12	0.58311(6)	0.67356(7)	0.24891(5)	0.0588(4)
W13	0.76380(7)	0.85298(6)	0.25414(5)	0.0534(4)
W14	0.82747(8)	0.59341(7)	0.14782(5)	0.0619(4)
W15	0.65445(9)	0.57928(9)	0.15066(6)	0.0861(6)
W16	0.75091(8)	0.52267(7)	0.23195(6)	0.0643(4)
P1	0.7583(3)	0.6888(3)	0.2449(2)	0.0278(17)
O1	0.2382(8)	-0.0075(8)	0.1652(6)	0.042(5)
O2	0.3498(8)	0.0555(8)	0.2294(6)	0.038(5)
O3	0.3452(8)	0.0650(8)	0.1371(7)	0.040(5)
O4	0.2307(8)	0.0999(8)	0.2366(6)	0.035(5)
O5	0.2274(8)	0.1105(8)	0.1452(6)	0.039(5)
O6	0.3164(8)	0.1695(8)	0.2090(6)	0.038(5)
O7	0.3240(9)	0.1782(8)	0.3103(6)	0.046(5)
O8	0.1894(9)	0.1891(8)	0.3065(6)	0.039(5)
O9	0.2849(8)	0.2739(9)	0.2788(6)	0.041(5)
O10	0.2015(8)	0.2147(8)	0.2128(6)	0.036(5)
O11	0.2965(9)	0.2841(8)	0.1880(6)	0.039(5)
O12	0.3283(9)	0.1920(8)	0.1165(6)	0.043(5)
O13	0.1978(9)	0.2112(8)	0.1122(6)	0.042(5)
O14	0.1789(8)	0.3297(8)	0.1874(7)	0.042(5)
O15	0.2787(8)	0.3926(8)	0.2572(7)	0.044(5)
O16	0.1658(8)	0.3175(8)	0.2754(6)	0.038(5)
O17	0.6799(11)	0.7037(11)	0.3622(8)	0.077(7)
O18	0.9289(12)	0.7718(11)	0.2972(9)	0.085(8)
O19	0.6546(12)	0.6581(12)	0.1398(8)	0.087(8)
O20	0.8744(13)	0.7197(12)	0.3570(8)	0.091(8)
O21	0.5007(10)	0.6648(13)	0.2469(10)	0.095(9)
O22	0.6069(12)	0.6260(11)	0.2934(9)	0.087(8)
O23	0.6955(11)	0.5521(10)	0.2830(8)	0.070(7)
O24	0.7486(15)	0.4479(12)	0.2314(11)	0.117(11)
O25	0.8990(15)	0.6325(12)	0.1946(9)	0.103(10)
O26	0.7081(11)	0.8326(13)	0.2992(9)	0.087(8)
O27	0.7570(12)	0.7389(12)	0.2171(8)	0.086(8)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
O28	0.6857(14)	0.5227(14)	0.1890(10)	0.112(10)
O29	0.8277(13)	0.6712(13)	0.1346(9)	0.093(8)
O30	0.9128(12)	0.8501(14)	0.3812(8)	0.099(9)
O31	0.6900(10)	0.8194(12)	0.2025(10)	0.089(8)
O32	0.8336(11)	0.8442(11)	0.2951(9)	0.084(8)
O33	0.9011(10)	0.6030(10)	0.3643(8)	0.066(6)
O34	0.7426(10)	0.7568(11)	0.1362(9)	0.076(7)
O35	0.7740(11)	0.6300(11)	0.3472(7)	0.072(7)
O36	0.9009(13)	0.7517(10)	0.2014(9)	0.085(8)
O37	1.0129(11)	0.7095(10)	0.2379(8)	0.065(6)
O38	0.7678(10)	0.9278(11)	0.2629(7)	0.067(7)
O39	0.8191(10)	0.8350(10)	0.2041(9)	0.076(7)
O40	0.6599(11)	0.8296(11)	0.3875(8)	0.071(7)
O41	0.8750(10)	0.7919(9)	0.1196(7)	0.057(6)
O42	0.6008(12)	0.5314(12)	0.1060(9)	0.091(8)
O43	0.6511(10)	0.5824(10)	0.3721(8)	0.065(6)
O44	0.7758(11)	0.7911(9)	0.3572(8)	0.065(7)
O45	0.6028(12)	0.7279(11)	0.2088(8)	0.082(8)
O46	0.6138(15)	0.7686(17)	0.1240(11)	0.130(12)
O47	0.8641(17)	0.5549(12)	0.1048(9)	0.117(11)
O48	0.8103(13)	0.5328(14)	0.1839(9)	0.103(9)
O49	0.8279(15)	0.5658(14)	0.2800(9)	0.111(11)
O50	0.9297(14)	0.6531(13)	0.2898(9)	0.101(10)
O51	0.7505(12)	0.6257(13)	0.2090(8)	0.094(9)
O52	0.7038(12)	0.6888(14)	0.2773(10)	0.104(9)
O53	0.6031(13)	0.7371(14)	0.2976(11)	0.112(11)
O54	0.6036(14)	0.6070(11)	0.2015(10)	0.110(10)
O55	0.7446(17)	0.5788(17)	0.1269(11)	0.142(13)
O56	0.8261(13)	0.7026(12)	0.2762(11)	0.104(9)
Ag1	0.22782(13)	0.42159(12)	0.14620(10)	0.0636(7)
Ag2	0.05463(13)	0.29903(12)	0.15920(9)	0.0602(7)
Ag3	0.45451(12)	0.23038(12)	0.13091(9)	0.0558(7)
Ag4	0.00592(11)	0.26505(12)	0.26853(9)	0.0573(7)
Ag5	0.47963(12)	0.08666(12)	0.13843(9)	0.0577(7)
Ag6	0.40315(12)	0.21460(13)	0.38035(9)	0.0599(7)
Ag7	0.16876(12)	0.30138(11)	0.08937(9)	0.0538(7)
Ag8	0.04157(13)	0.26070(13)	0.37283(10)	0.0669(8)
Ag9	0.28810(13)	-0.02056(11)	0.05018(9)	0.0551(7)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
Ag10	0.43055(11)	-0.02340(11)	0.22549(8)	0.0483(6)
Ag11	0.11827(12)	0.43329(12)	0.21262(10)	0.0604(7)
Ag12	0.04394(13)	0.12216(12)	0.26680(9)	0.0629(8)
Ag13	0.46848(11)	0.09682(12)	0.35884(9)	0.0524(7)
Ag14	0.27356(11)	0.31179(11)	0.41294(8)	0.0496(6)
Ag15	0.34887(11)	0.35198(11)	0.34009(8)	0.0466(6)
Ag16	0.07142(11)	0.16904(11)	0.09722(8)	0.0487(6)
Ag17	0.08068(11)	0.39351(11)	0.29711(9)	0.0529(7)
Ag18	0.23740(12)	0.49291(11)	0.27512(10)	0.0577(7)
Ag19	0.28766(12)	-0.06747(11)	0.25379(9)	0.0517(6)
Ag20	0.16299(11)	0.29598(11)	0.34292(8)	0.0443(6)
Ag21	0.23896(11)	0.04372(11)	0.35765(8)	0.0488(6)
Ag22	0.17788(12)	0.06800(12)	0.06221(8)	0.0539(7)
Ag23	0.34694(11)	0.06428(11)	0.30314(8)	0.0428(6)
Ag24	0.22223(11)	0.42996(11)	0.35547(9)	0.0526(7)
Ag25	0.25806(12)	0.17623(11)	0.40848(9)	0.0508(6)
Ag26	0.40589(11)	0.30583(11)	0.23182(9)	0.0519(7)
Ag27	0.17373(11)	0.01890(10)	0.26075(8)	0.0438(6)
Ag28	0.27480(11)	-0.10780(11)	0.14538(8)	0.0473(6)
Ag29	0.11442(11)	0.07562(11)	0.16901(8)	0.0467(6)
Ag30	0.36194(11)	0.10540(11)	0.06386(8)	0.0479(6)
Ag31	0.50697(11)	0.10692(12)	0.26089(9)	0.0512(7)
Ag32	0.34260(12)	0.33545(11)	0.12667(9)	0.0541(7)
Ag33	0.47836(12)	0.24780(12)	0.30829(10)	0.0614(7)
Ag34	0.09915(10)	0.20551(11)	0.21029(8)	0.0422(6)
Ag35	0.39822(11)	-0.04368(11)	0.12197(8)	0.0484(6)
Ag36	0.42013(10)	0.17334(11)	0.21642(8)	0.0447(6)
Ag37	0.11562(12)	0.14823(14)	0.35955(11)	0.0682(8)
N1	0.3236(16)	0.5721(15)	0.3085(11)	0.084(9)
N2	0.1821(13)	-0.1814(13)	0.1428(9)	0.060(7)
N3	0.7622(19)	0.3759(19)	0.3952(15)	0.032(11)
N4	0.7721(17)	0.0596(18)	0.4541(14)	0.017(9)
N5	0.715(3)	0.347(3)	0.113(2)	0.09(2)
C1	0.3198(13)	-0.1016(13)	0.0727(10)	0.040(7)
C2	0.2930(16)	-0.1356(16)	0.0381(13)	0.060(9)
C3	0.268(2)	-0.182(2)	-0.0044(19)	0.121(16)
C4	0.244(2)	-0.248(2)	0.0068(18)	0.125(17)
C5	0.270(2)	-0.164(2)	-0.0520(17)	0.110(15)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
C6	0.180(4)	-0.177(4)	-0.011(3)	0.23(3)
C7	0.5078(15)	0.2075(15)	0.3668(11)	0.055(9)
C8	0.5596(16)	0.1923(15)	0.3838(12)	0.059(9)
C9	0.6249(19)	0.1816(19)	0.4055(15)	0.086(12)
C10	0.6660(19)	0.2481(19)	0.4283(15)	0.090(12)
C11	0.6166(15)	0.1459(15)	0.4445(12)	0.057(9)
C12	0.6611(19)	0.1440(18)	0.3644(14)	0.086(12)
C13	0.0104(15)	0.1533(14)	0.3397(11)	0.051(8)
C14	-0.0432(16)	0.1592(14)	0.3491(11)	0.055(9)
C15	-0.1167(16)	0.1605(16)	0.3585(12)	0.066(10)
C16	-0.1477(18)	0.2051(17)	0.3325(14)	0.080(11)
C17	-0.1171(17)	0.1788(17)	0.4179(13)	0.076(11)
C18	-0.1528(17)	0.0962(17)	0.3377(13)	0.073(10)
C19	0.0596(15)	0.2558(14)	0.0804(11)	0.053(8)
C20	0.0533(14)	0.2915(13)	0.0544(11)	0.045(8)
C21	0.0369(18)	0.3303(18)	0.0217(14)	0.079(11)
C22	-0.035(2)	0.310(2)	-0.0011(16)	0.104(14)
C23	0.079(2)	0.322(2)	-0.0198(18)	0.123(17)
C24	0.047(2)	0.403(2)	0.0432(16)	0.103(14)
C25	0.0027(15)	0.3322(15)	0.3319(12)	0.054(9)
C26	-0.0032(14)	0.3700(14)	0.3687(11)	0.046(8)
C27	-0.0117(14)	0.4149(14)	0.4163(11)	0.051(8)
C28	0.0552(16)	0.4472(15)	0.4405(12)	0.063(9)
C29	-0.055(2)	0.3812(19)	0.4491(15)	0.092(13)
C30	-0.0526(17)	0.4666(17)	0.4033(13)	0.073(10)
C31	0.4916(14)	-0.0019(13)	0.1603(11)	0.046(8)
C32	0.5532(14)	0.0054(13)	0.1673(10)	0.044(8)
C33	0.6276(14)	0.0075(14)	0.1763(11)	0.046(8)
C34	0.6578(16)	0.0560(16)	0.2208(12)	0.065(10)
C35	0.6576(15)	0.0296(15)	0.1307(11)	0.057(9)
C36	0.6441(19)	-0.0610(18)	0.1740(14)	0.084(12)
C37	0.1782(14)	0.1047(13)	0.4071(11)	0.045(8)
C38	0.1388(15)	0.0797(15)	0.4273(11)	0.055(9)
C39	0.0897(17)	0.0495(17)	0.4560(13)	0.073(10)
C40	0.0906(19)	-0.0208(19)	0.4434(14)	0.085(12)
C41	0.0224(17)	0.0663(16)	0.4470(13)	0.071(10)
C42	0.118(2)	0.0810(19)	0.5115(15)	0.091(12)
C43	-0.0055(14)	0.1868(14)	0.2065(11)	0.049(8)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
C44	-0.0579(15)	0.1543(15)	0.1884(11)	0.053(8)
C45	-0.1187(16)	0.1128(16)	0.1646(12)	0.064(10)
C46	-0.1112(17)	0.0975(17)	0.1087(13)	0.074(11)
C47	-0.1788(19)	0.1485(18)	0.1778(14)	0.087(12)
C48	-0.122(2)	0.053(2)	0.1820(16)	0.102(14)
C49	0.3063(15)	0.4077(15)	0.3982(12)	0.055(9)
C50	0.3008(15)	0.4580(15)	0.4279(12)	0.056(9)
C51	0.2999(16)	0.5193(16)	0.4627(12)	0.061(9)
C52	0.2277(18)	0.5282(17)	0.4747(14)	0.078(11)
C53	0.3288(19)	0.5724(19)	0.4390(15)	0.090(12)
C54	0.3439(18)	0.5162(18)	0.5091(14)	0.082(11)
C55	0.1952(15)	0.4994(15)	0.1992(11)	0.053(8)
C56	0.2221(19)	0.5390(19)	0.1811(14)	0.081(11)
C57	0.250(2)	0.588(2)	0.1583(17)	0.110(15)
C58	0.331(2)	0.591(2)	0.1610(18)	0.118(16)
C59	0.234(2)	0.647(2)	0.1898(18)	0.122(16)
C60	0.214(2)	0.576(2)	0.1031(19)	0.130(17)
C61	0.2073(14)	-0.0455(14)	0.3012(11)	0.048(8)
C62	0.2091(14)	-0.0967(15)	0.3076(11)	0.052(8)
C63	0.2046(19)	-0.1636(18)	0.3186(14)	0.080(11)
C64	0.145(2)	-0.169(2)	0.3494(16)	0.103(14)
C65	0.188(2)	-0.212(2)	0.2692(17)	0.106(14)
C66	0.270(3)	-0.172(2)	0.3396(19)	0.130(17)
C67	0.4442(15)	0.3242(15)	0.1593(11)	0.054(9)
C68	0.4467(14)	0.3796(15)	0.1745(11)	0.047(8)
C69	0.4630(17)	0.4519(17)	0.1952(13)	0.072(10)
C70	0.4677(17)	0.4855(16)	0.1509(13)	0.071(10)
C71	0.4093(17)	0.4758(16)	0.2274(13)	0.067(10)
C72	0.5359(15)	0.4671(15)	0.2250(12)	0.059(9)
C73	0.5235(16)	0.1867(16)	0.2310(12)	0.062(9)
C74	0.5737(15)	0.2211(15)	0.2291(11)	0.053(9)
C75	0.6350(16)	0.2609(16)	0.2271(13)	0.066(10)
C76	0.691(2)	0.255(2)	0.2650(16)	0.101(14)
C77	0.6624(18)	0.2349(18)	0.1763(14)	0.083(12)
C78	0.625(2)	0.327(2)	0.2289(17)	0.111(15)
C79	0.3358(15)	0.2472(14)	0.4372(11)	0.052(8)
C80	0.3825(14)	0.2682(13)	0.4675(10)	0.043(8)
C81	0.4351(17)	0.2992(17)	0.5094(13)	0.070(10)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
C82	0.5028(19)	0.2924(18)	0.4971(14)	0.086(12)
C83	0.429(2)	0.370(2)	0.5269(17)	0.109(15)
C84	0.420(2)	0.2707(19)	0.5545(15)	0.094(13)
C85	0.3524(18)	-0.1135(18)	0.2088(13)	0.074(11)
C86	0.3809(17)	-0.1518(16)	0.1905(12)	0.064(10)
C87	0.4103(17)	-0.2098(16)	0.1590(13)	0.067(10)
C88	0.466(3)	-0.178(2)	0.1373(19)	0.134(18)
C89	0.3582(16)	-0.2491(15)	0.1191(12)	0.061(9)
C90	0.430(2)	-0.249(2)	0.1967(16)	0.097(13)
C91	0.1534(15)	0.4805(15)	0.3289(11)	0.056(9)
C92	0.1290(16)	0.5269(16)	0.3283(12)	0.062(9)
C93	0.113(2)	0.5949(19)	0.3324(17)	0.17(2)
C94	0.061(3)	0.612(3)	0.368(2)	0.194(16)
C95	0.092(3)	0.608(3)	0.284(2)	0.194(16)
C96	0.176(3)	0.644(3)	0.352(2)	0.194(16)
C97	0.4505(14)	0.3379(15)	0.3062(11)	0.050(8)
C98	0.4705(16)	0.3848(16)	0.3353(12)	0.062(9)
C99	0.5082(18)	0.4424(17)	0.3729(13)	0.073(11)
C100	0.5822(19)	0.4425(19)	0.3648(15)	0.089(12)
C101	0.4862(17)	0.5020(16)	0.3592(13)	0.069(10)
C102	0.491(2)	0.4419(19)	0.4256(15)	0.092(13)
C103	0.0290(18)	0.3788(16)	0.2175(13)	0.066(10)
C104	-0.027(2)	0.3682(19)	0.2044(15)	0.088(12)
C105	-0.102(2)	0.357(2)	0.1872(17)	0.100(14)
C106	-0.112(3)	0.299(3)	0.134(2)	0.16(2)
C107	-0.118(2)	0.413(2)	0.1722(17)	0.110(15)
C108	-0.134(3)	0.347(2)	0.229(2)	0.135(18)
C109	0.2604(16)	0.3615(15)	0.0827(12)	0.060(9)
C110	0.2914(18)	0.3750(17)	0.0541(14)	0.073(11)
C111	0.320(3)	0.398(3)	0.0133(19)	0.18(3)
C112	0.296(4)	0.348(4)	-0.032(3)	0.31(3)
C113	0.308(4)	0.461(4)	0.005(4)	0.31(3)
C114	0.394(4)	0.400(4)	0.024(4)	0.31(3)
C115	0.2655(17)	0.0534(17)	0.0191(13)	0.071(10)
C116	0.2497(12)	0.0912(12)	-0.0051(9)	0.035(7)
C117	0.2379(15)	0.1335(14)	-0.0367(11)	0.081(11)
C118	0.214(2)	0.095(2)	-0.0850(16)	0.153(12)
C119	0.191(2)	0.176(2)	-0.0169(19)	0.153(12)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
C120	0.303(2)	0.170(2)	-0.0397(19)	0.153(12)
C121	0.5065(14)	0.0300(14)	0.2929(11)	0.047(8)
C122	0.5103(13)	-0.0159(13)	0.3100(10)	0.038(7)
C123	0.5205(15)	-0.0723(14)	0.3276(11)	0.052(8)
C124	0.455(2)	-0.1028(19)	0.3360(15)	0.092(13)
C125	0.550(2)	-0.115(2)	0.2932(16)	0.103(14)
C126	0.5622(18)	-0.0454(18)	0.3804(14)	0.080(11)
C127	0.3606(14)	0.0611(13)	0.3744(11)	0.045(8)
C128	0.3681(14)	0.0592(13)	0.4152(11)	0.046(8)
C129	0.3778(17)	0.0482(17)	0.4659(13)	0.069(10)
C130	0.448(2)	0.082(2)	0.4892(16)	0.106(14)
C131	0.365(2)	-0.020(2)	0.4696(18)	0.120(16)
C132	0.3246(18)	0.0826(18)	0.4937(14)	0.082(11)
C133	0.4739(14)	0.1451(15)	0.0845(12)	0.049(8)
C134	0.473(4)	0.104(4)	0.054(3)	0.20(3)
C135	0.501(4)	0.049(4)	0.007(3)	0.23(3)
C136	0.4383(19)	-0.0217(19)	-0.0095(14)	0.006(10)
C137	0.486(3)	0.100(3)	-0.040(2)	0.18(2)
C139	0.1522(14)	0.2910(14)	0.4134(11)	0.047(8)
C140	0.1563(14)	0.2932(14)	0.4538(12)	0.049(8)
C141	0.1563(17)	0.3014(16)	0.5081(13)	0.069(10)
C142	0.2038(16)	0.2605(16)	0.5245(12)	0.064(10)
C143	0.1810(17)	0.3733(17)	0.5305(13)	0.071(10)
C144	0.0848(19)	0.2836(18)	0.5215(14)	0.085(12)
C145	0.0736(13)	0.0734(13)	0.0891(10)	0.038(7)
C146	0.0712(15)	0.0165(15)	0.0814(11)	0.055(9)
C147	0.0486(19)	-0.0585(18)	0.0695(14)	0.079(11)
C148	0.101(2)	-0.091(2)	0.0894(19)	0.126(17)
C149	0.034(2)	-0.083(2)	0.0133(16)	0.102(14)
C150	-0.025(3)	-0.064(3)	0.095(2)	0.19(3)
C151	0.0741(13)	0.0319(13)	0.2226(10)	0.042(8)
C152	0.0480(14)	-0.0036(14)	0.2429(11)	0.048(8)
C153	0.0101(18)	-0.0547(18)	0.2616(14)	0.078(11)
C154	0.0305(17)	-0.0498(17)	0.3143(13)	0.075(11)
C155	-0.065(3)	-0.054(3)	0.249(2)	0.137(18)
C156	0.027(2)	-0.121(2)	0.2357(19)	0.129(17)
C300	0.370(2)	0.610(2)	0.3240(16)	0.096(13)
C301	0.426(2)	0.658(2)	0.3419(18)	0.121(16)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
C302	0.137(2)	-0.212(2)	0.1425(15)	0.088(12)
C303	0.069(2)	-0.253(2)	0.1398(16)	0.100(14)
C305	0.7605(19)	0.417(2)	0.3773(15)	0.010(10)
C306	0.763(2)	0.468(2)	0.3561(17)	0.022(12)
C307	0.7706(19)	0.021(2)	0.4283(16)	0.008(10)
C308	0.773(2)	-0.036(2)	0.3890(17)	0.022(12)
C309	0.663(3)	0.361(2)	0.1033(19)	0.036(14)
C310	0.597(3)	0.372(3)	0.091(3)	0.07(2)

Tabelle A.12.: Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 5.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
W1	0.0352(7)	0.0381(8)	0.0312(7)	0.0076(6)	0.0042(6)	-0.0008(5)
W2	0.0310(7)	0.0366(8)	0.0292(7)	0.0060(6)	0.0004(5)	-0.0016(5)
W3	0.0304(7)	0.0381(8)	0.0305(7)	0.0063(6)	0.0020(5)	-0.0013(5)
W4	0.0335(7)	0.0367(8)	0.0357(8)	0.0066(6)	-0.0002(6)	-0.0002(5)
W5	0.0505(8)	0.0570(9)	0.0369(8)	0.0177(7)	0.0050(6)	-0.0089(6)
W6	0.0500(8)	0.0507(9)	0.0357(8)	0.0124(7)	-0.0036(6)	-0.0086(6)
W7	0.0442(8)	0.0739(11)	0.0494(9)	0.0283(8)	-0.0077(7)	-0.0102(7)
W8	0.0469(8)	0.0441(8)	0.0448(8)	0.0163(7)	0.0121(6)	-0.0020(6)
W9	0.0426(8)	0.0581(10)	0.0640(10)	0.0323(8)	0.0156(7)	0.0064(6)
W10	0.0666(10)	0.0623(10)	0.0483(9)	0.0195(8)	0.0218(7)	0.0185(7)
W11	0.0588(9)	0.0720(11)	0.0556(10)	0.0348(8)	0.0157(8)	0.0207(7)
W12	0.0390(8)	0.0765(11)	0.0599(10)	0.0212(9)	0.0063(7)	-0.0072(7)
W13	0.0530(9)	0.0493(10)	0.0667(10)	0.0288(8)	0.0186(7)	0.0063(7)
W14	0.0768(11)	0.0565(10)	0.0479(10)	0.0039(8)	0.0248(8)	-0.0028(8)
W15	0.0953(13)	0.0963(14)	0.0436(10)	0.0066(9)	0.0008(9)	-0.0558(10)
W16	0.0886(12)	0.0409(9)	0.0613(11)	0.0104(8)	0.0217(9)	-0.0042(8)
P1	0.030(4)	0.030(5)	0.022(4)	0.007(4)	0.001(3)	-0.002(3)
O1	0.037(11)	0.051(13)	0.036(12)	0.007(10)	-0.003(9)	0.004(9)
O2	0.038(11)	0.041(12)	0.035(12)	0.009(9)	0.009(9)	0.006(9)
O3	0.035(11)	0.038(12)	0.051(13)	0.017(10)	0.014(9)	0.004(9)
O4	0.032(11)	0.030(11)	0.038(12)	0.000(9)	0.008(9)	-0.008(8)
O5	0.034(11)	0.048(13)	0.027(11)	-0.001(9)	-0.002(9)	0.002(9)
O6	0.037(11)	0.039(12)	0.040(12)	0.010(9)	0.018(9)	-0.001(9)
O7	0.068(14)	0.033(12)	0.031(12)	-0.001(9)	0.010(10)	0.004(10)
O8	0.050(12)	0.032(12)	0.030(11)	-0.009(9)	0.002(9)	0.015(9)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
O9	0.038(11)	0.062(14)	0.023(11)	0.018(10)	-0.002(9)	0.001(9)
O10	0.037(11)	0.040(12)	0.026(11)	0.005(9)	0.006(9)	-0.011(8)
O11	0.054(12)	0.035(12)	0.033(12)	0.026(9)	0.005(9)	-0.005(9)
O12	0.070(14)	0.021(11)	0.030(11)	-0.005(9)	-0.009(10)	0.004(9)
O13	0.051(12)	0.038(12)	0.034(12)	0.004(9)	0.009(9)	0.006(9)
O14	0.041(12)	0.028(11)	0.055(13)	0.002(10)	0.021(10)	0.010(8)
O15	0.041(12)	0.028(12)	0.063(14)	0.010(10)	0.009(10)	0.005(9)
O16	0.043(11)	0.035(12)	0.036(12)	0.010(9)	-0.019(9)	0.004(8)
O17	0.091(18)	0.089(19)	0.048(15)	0.003(13)	-0.014(13)	0.037(14)
O18	0.094(19)	0.09(2)	0.084(19)	0.061(16)	0.021(15)	-0.006(14)
O19	0.090(19)	0.11(2)	0.044(15)	0.002(14)	-0.003(13)	-0.007(15)
O20	0.13(2)	0.10(2)	0.055(17)	0.010(15)	0.042(15)	0.026(16)
O21	0.036(14)	0.13(2)	0.14(3)	0.08(2)	0.008(14)	0.002(13)
O22	0.100(19)	0.057(17)	0.080(19)	-0.024(14)	-0.011(15)	0.009(13)
O23	0.072(16)	0.067(16)	0.061(16)	0.001(12)	0.008(12)	0.002(12)
O24	0.13(2)	0.09(2)	0.15(3)	0.025(19)	0.11(2)	0.023(17)
O25	0.19(3)	0.09(2)	0.065(18)	0.056(16)	0.055(19)	0.09(2)
O26	0.059(15)	0.14(2)	0.10(2)	0.079(18)	0.027(14)	0.052(15)
O27	0.094(19)	0.12(2)	0.044(15)	0.037(15)	0.005(13)	-0.017(15)
O28	0.10(2)	0.15(3)	0.11(2)	0.07(2)	0.047(18)	-0.006(18)
O29	0.10(2)	0.12(2)	0.061(17)	0.013(16)	-0.005(14)	0.017(16)
O30	0.082(18)	0.16(3)	0.045(16)	0.029(16)	0.002(13)	-0.031(17)
O31	0.033(13)	0.11(2)	0.14(2)	0.053(19)	0.043(14)	0.009(13)
O32	0.078(17)	0.074(18)	0.11(2)	0.036(15)	0.057(16)	0.000(13)
O33	0.053(14)	0.087(18)	0.066(16)	0.032(13)	0.017(12)	0.002(12)
O34	0.039(13)	0.087(18)	0.091(19)	0.012(14)	-0.004(12)	-0.010(11)
O35	0.076(16)	0.099(19)	0.028(13)	-0.012(12)	-0.003(11)	0.022(13)
O36	0.13(2)	0.028(14)	0.09(2)	0.007(13)	0.012(16)	-0.004(13)
O37	0.073(16)	0.064(16)	0.061(16)	0.014(12)	0.004(12)	0.024(12)
O38	0.064(15)	0.11(2)	0.050(15)	0.050(14)	0.008(11)	0.025(13)
O39	0.048(14)	0.057(16)	0.100(19)	-0.004(14)	-0.014(13)	-0.028(11)
O40	0.078(16)	0.085(18)	0.075(17)	0.048(14)	0.044(13)	0.028(13)
O41	0.065(14)	0.064(15)	0.038(13)	0.015(11)	0.008(11)	-0.021(11)
O42	0.081(18)	0.10(2)	0.079(19)	0.021(16)	-0.006(14)	-0.030(14)
O43	0.068(15)	0.074(17)	0.056(15)	0.030(13)	-0.002(12)	0.003(12)
O44	0.108(19)	0.048(14)	0.060(15)	0.045(12)	0.039(13)	0.018(12)
O45	0.090(18)	0.070(18)	0.075(18)	0.008(14)	0.016(14)	-0.022(13)
O46	0.12(2)	0.21(4)	0.10(2)	0.08(2)	0.06(2)	0.08(2)

Weiter auf der nächsten Seite

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
O47	0.21(3)	0.07(2)	0.070(19)	0.011(15)	0.05(2)	0.022(19)
O48	0.11(2)	0.13(3)	0.068(19)	0.022(17)	0.032(16)	-0.004(17)
O49	0.17(3)	0.14(3)	0.057(17)	0.036(17)	0.078(18)	0.13(2)
O50	0.14(2)	0.13(2)	0.068(18)	0.052(17)	0.073(17)	0.062(19)
O51	0.083(18)	0.13(2)	0.050(16)	-0.002(16)	0.024(13)	-0.017(16)
O52	0.074(18)	0.13(3)	0.10(2)	0.034(19)	0.019(16)	-0.021(16)
O53	0.09(2)	0.14(3)	0.15(3)	0.10(2)	0.020(19)	0.076(18)
O54	0.14(3)	0.055(18)	0.12(2)	0.020(16)	0.014(19)	-0.053(16)
O55	0.15(3)	0.20(4)	0.10(2)	0.11(3)	0.04(2)	-0.01(2)
O56	0.10(2)	0.070(19)	0.12(2)	-0.006(17)	0.000(18)	0.010(15)
Ag1	0.0739(19)	0.0518(18)	0.0637(19)	0.0113(14)	0.0124(14)	0.0049(13)
Ag2	0.0608(17)	0.0674(19)	0.0469(17)	0.0028(14)	-0.0050(13)	0.0130(13)
Ag3	0.0484(15)	0.0540(17)	0.0600(17)	0.0088(13)	0.0115(13)	-0.0078(12)
Ag4	0.0390(14)	0.0659(18)	0.0519(17)	-0.0125(13)	0.0045(12)	-0.0020(12)
Ag5	0.0477(15)	0.0639(18)	0.0624(18)	0.0190(14)	0.0002(13)	0.0066(12)
Ag6	0.0443(15)	0.085(2)	0.0405(16)	-0.0040(14)	-0.0049(12)	0.0101(13)
Ag7	0.0633(17)	0.0523(17)	0.0451(16)	0.0131(13)	-0.0026(13)	0.0062(12)
Ag8	0.0536(17)	0.0665(19)	0.076(2)	0.0096(15)	0.0125(14)	0.0008(13)
Ag9	0.0706(17)	0.0518(17)	0.0402(15)	0.0075(12)	-0.0044(13)	0.0099(13)
Ag10	0.0413(14)	0.0563(17)	0.0470(16)	0.0109(12)	0.0062(11)	0.0069(11)
Ag11	0.0589(17)	0.0608(18)	0.0638(18)	0.0192(14)	0.0022(14)	0.0110(13)
Ag12	0.0587(17)	0.0635(19)	0.0584(18)	0.0014(14)	0.0208(14)	-0.0065(13)
Ag13	0.0439(15)	0.0674(18)	0.0435(15)	0.0098(13)	0.0000(12)	0.0065(12)
Ag14	0.0490(15)	0.0511(16)	0.0437(15)	0.0071(12)	-0.0067(12)	0.0016(11)
Ag15	0.0394(14)	0.0462(15)	0.0452(15)	0.0006(12)	-0.0074(11)	-0.0035(11)
Ag16	0.0488(15)	0.0506(16)	0.0412(15)	0.0051(12)	-0.0040(12)	0.0008(11)
Ag17	0.0417(14)	0.0509(16)	0.0590(17)	0.0037(13)	-0.0031(12)	0.0016(11)
Ag18	0.0584(16)	0.0444(16)	0.0682(19)	0.0114(14)	0.0049(14)	0.0037(12)
Ag19	0.0592(16)	0.0510(16)	0.0437(16)	0.0094(12)	0.0075(12)	0.0051(12)
Ag20	0.0450(14)	0.0517(16)	0.0323(14)	0.0051(11)	-0.0011(11)	0.0030(11)
Ag21	0.0507(15)	0.0525(16)	0.0427(15)	0.0113(12)	0.0086(12)	0.0034(11)
Ag22	0.0608(16)	0.0663(18)	0.0313(14)	0.0055(12)	0.0024(12)	0.0091(13)
Ag23	0.0423(14)	0.0518(16)	0.0332(14)	0.0103(11)	0.0004(11)	0.0036(11)
Ag24	0.0481(15)	0.0475(16)	0.0577(17)	0.0068(13)	-0.0092(12)	0.0075(11)
Ag25	0.0536(15)	0.0502(16)	0.0443(15)	0.0083(12)	-0.0008(12)	-0.0011(12)
Ag26	0.0503(15)	0.0502(16)	0.0506(16)	0.0070(13)	0.0040(12)	-0.0012(11)
Ag27	0.0444(14)	0.0416(15)	0.0442(15)	0.0131(12)	0.0045(11)	-0.0041(10)
Ag28	0.0480(15)	0.0461(16)	0.0461(15)	0.0095(12)	0.0049(12)	0.0027(11)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Ag29	0.0454(14)	0.0512(16)	0.0388(15)	0.0079(12)	0.0001(11)	-0.0046(11)
Ag30	0.0566(16)	0.0475(16)	0.0382(15)	0.0072(12)	0.0140(12)	0.0016(11)
Ag31	0.0376(14)	0.0642(18)	0.0531(16)	0.0180(13)	0.0036(12)	0.0051(11)
Ag32	0.0566(16)	0.0542(17)	0.0499(16)	0.0162(13)	0.0074(13)	-0.0076(12)
Ag33	0.0519(16)	0.0625(18)	0.0651(19)	0.0172(14)	-0.0118(13)	-0.0047(13)
Ag34	0.0286(12)	0.0536(16)	0.0382(14)	0.0037(12)	-0.0004(10)	-0.0032(10)
Ag35	0.0371(14)	0.0649(17)	0.0425(15)	0.0142(13)	0.0015(11)	0.0024(11)
Ag36	0.0313(13)	0.0499(16)	0.0506(16)	0.0123(12)	0.0017(11)	-0.0027(10)
Ag37	0.0419(15)	0.093(2)	0.082(2)	0.0480(17)	0.0097(14)	0.0073(14)

**A.6. $\{[\text{Ag}_{12}\text{Cl}(\text{C}\equiv\text{C}^t\text{Bu})_6(\text{C}_3\text{H}_7\text{NO})_{10}]$
 $[\text{Ag}_{14}(\text{C}\equiv\text{C}^t\text{Bu})_8(\text{C}_3\text{H}_7\text{NO})_{10}]\text{H}[\text{P}_2\text{W}_{18}\text{O}_{62}]_2\}_n$ 6**

Kristallzustand	nass
Summenformel	$\text{C}_{72}\text{H}_{133}\text{Ag}_{13}\text{Cl}_{0,5}\text{N}_{10}\text{O}_{72}\text{P}_2\text{W}_{18}$
Kristall	farblose Nadeln (0,20 x 0,10 x 0,01 mm ³)
Kristallsystem, Raumgruppe	triklin, $\text{P}\bar{1}$ (Nr. 2)
Gitterkonstanten/Å, °	$a = 14,896(4)$, $b = 16,753(4)$, $c = 33,148(8)$ $\alpha = 79,297(3)$, $\beta = 84,142(3)$, $\gamma = 75,982(3)$
Volumen/Å ³	7872(3)
Formeleinheiten	2
Röntgendichte/g cm ⁻³	2,988
Temperatur	100 K
$2\theta_{max}$	38,38 °
hkl -Bereich	$-13 \leq h \leq 13$, $-15 \leq k \leq 15$, $-30 \leq l \leq 30$
F(000)	6385
Absorptionskoeffizient μ/mm^{-1}	14,768
Zahl der gemessenen Reflexe	29741
davon symmetriunabhängig	13015 ($R_{int} = 0,0899$)
Anzahl der Parameter	1305
Restelektronendichte/e·Å ⁻³ (max/min)	4,02/-3,15
R_1 ($I > 2\sigma(I)$)	0,0790
wR_2 ($I > 2\sigma(I)$)	0,1332
R_1 (alle Daten)	0,1997
wR_2 (alle Daten)	0,2366
Datenbank	CCDC 793541
freies Volumen	17,2 %
freies Volumen mit Lösungsmittel	-
Lösungsmittel pro Formeleinheit	-
Besonderheiten	

Tabelle A.13.: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsfaktoren (Å²) von 6. U_{eq} ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U_{eq}
W1	0,68909(15)	-0,08437(13)	0,24070(8)	0,0285(6)
W2	0,70574(14)	0,34546(13)	0,30659(7)	0,0250(6)
W3	0,91028(14)	0,22693(13)	0,27854(8)	0,0263(7)
W4	0,55291(14)	0,03665(13)	0,37542(7)	0,0233(6)
W5	0,76142(14)	0,01792(13)	0,43213(7)	0,0254(6)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
W6	0,61562(15)	0,35597(14)	0,20323(8)	0,0307(7)
W7	0,46411(14)	0,04767(14)	0,27227(8)	0,0277(7)
W8	0,77740(14)	-0,09410(13)	0,34426(7)	0,0241(6)
W9	0,94562(14)	-0,00258(13)	0,29517(7)	0,0257(6)
W10	0,42937(14)	0,25741(14)	0,25510(8)	0,0286(7)
W11	0,85666(15)	0,00770(14)	0,19170(8)	0,0295(7)
W12	0,51907(14)	0,24584(13)	0,35853(7)	0,0238(6)
W13	0,72925(14)	0,22818(13)	0,41366(7)	0,0234(6)
W14	0,93473(14)	0,10566(13)	0,38448(7)	0,0241(6)
W15	0,52807(15)	0,04189(14)	0,16191(8)	0,0329(7)
W16	0,69662(15)	0,13754(15)	0,11339(8)	0,0362(7)
W17	0,82058(15)	0,23700(14)	0,17500(8)	0,0312(7)
W18	0,49072(16)	0,25417(15)	0,14389(8)	0,0368(7)
P1	0,6422(9)	0,1365(8)	0,2205(4)	0,019(4)
P2	0,7370(8)	0,1274(8)	0,3289(4)	0,018(4)
O1	0,459(2)	0,2431(18)	0,3110(10)	0,022(9)
O2	0,7296(18)	0,1217(16)	0,4515(10)	0,019(9)
O3	0,6115(18)	0,2316(17)	0,4013(9)	0,011(8)
O4	0,431(2)	0,3180(17)	0,3791(11)	0,027(9)
O5	0,6488(19)	-0,0491(18)	0,3554(10)	0,023(9)
O6	0,888(2)	0,0293(17)	0,4283(10)	0,020(8)
O7	0,761(2)	-0,0487(18)	0,4761(10)	0,028(9)
O8	0,748(2)	-0,0951(19)	0,2911(12)	0,039(11)
O9	0,640(2)	0,0327(17)	0,4154(10)	0,028(9)
O10	0,785(2)	-0,1980(17)	0,3646(9)	0,019(8)
O11	1,040(2)	0,1000(19)	0,4011(11)	0,030(9)
O12	0,485(2)	0,1449(18)	0,3856(10)	0,026(9)
O13	1,011(2)	0,255(2)	0,2623(12)	0,041(11)
O14	0,932(2)	0,1918(17)	0,3342(12)	0,037(11)
O15	0,955(2)	0,029(2)	0,3488(10)	0,034(10)
O16	0,904(2)	-0,0150(17)	0,2459(12)	0,033(11)
O17	0,380(2)	-0,0093(18)	0,2870(10)	0,029(9)
O18	1,062(2)	-0,0473(17)	0,2859(10)	0,022(9)
O19	0,495(2)	0,0531(19)	0,3259(13)	0,048(13)
O20	0,6323(18)	0,1335(17)	0,3378(10)	0,021(9)
O21	0,484(2)	-0,022(2)	0,4035(11)	0,035(10)
O22	0,796(2)	-0,0575(17)	0,3923(10)	0,025(9)
O23	0,901(2)	-0,0986(18)	0,3242(10)	0,031(10)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
O24	0,775(2)	0,1226(19)	0,3721(10)	0,028(9)
O25	0,516(2)	0,3229(17)	0,2391(10)	0,022(9)
O26	0,623(2)	-0,0389(19)	0,1903(10)	0,029(9)
O27	0,7152(17)	0,0512(18)	0,2291(9)	0,013(8)
O28	0,7422(18)	0,3028(18)	0,3632(11)	0,027(10)
O29	0,432(2)	0,2535(17)	0,1982(12)	0,037(11)
O30	0,831(2)	0,332(2)	0,2900(10)	0,029(9)
O31	0,674(2)	0,3544(19)	0,2520(12)	0,042(11)
O32	0,574(2)	0,464(2)	0,1889(11)	0,035(10)
O33	0,413(2)	0,328(2)	0,1127(10)	0,045(11)
O34	0,958(2)	-0,0305(17)	0,1641(10)	0,023(9)
O35	0,7126(18)	0,2955(17)	0,4509(10)	0,017(8)
O36	0,6782(19)	-0,1880(18)	0,2445(13)	0,041(11)
O37	0,906(2)	0,267(2)	0,1414(10)	0,038(10)
O38	0,461(2)	0,0557(18)	0,2151(12)	0,034(10)
O39	0,3853(18)	0,1552(18)	0,2684(10)	0,021(9)
O40	0,7895(19)	0,042(2)	0,3152(11)	0,034(10)
O41	0,4546(19)	0,156(2)	0,1420(12)	0,038(11)
O42	0,782(2)	0,0464(17)	0,1466(9)	0,016(8)
O43	0,801(2)	-0,0873(18)	0,2070(10)	0,025(9)
O44	0,325(3)	0,333(2)	0,2592(11)	0,043(11)
O45	0,753(2)	0,212(2)	0,1323(12)	0,042(11)
O46	0,5565(18)	0,1423(19)	0,2505(9)	0,018(8)
O47	0,5950(18)	0,3158(17)	0,3255(10)	0,021(9)
O48	0,604(2)	0,1382(19)	0,1758(12)	0,039(11)
O49	0,474(2)	-0,016(2)	0,1418(11)	0,044(11)
O50	0,861(2)	0,248(2)	0,2247(15)	0,066(16)
O51	0,943(2)	0,1125(17)	0,2737(9)	0,018(8)
O52	0,866(2)	0,1944(19)	0,4136(11)	0,033(10)
O53	0,681(2)	0,4500(17)	0,3115(11)	0,034(10)
O54	0,577(2)	-0,0374(19)	0,2684(13)	0,041(11)
O55	0,589(2)	0,2285(18)	0,1038(12)	0,046(12)
O56	0,620(2)	0,059(2)	0,1178(12)	0,046(12)
O57	0,558(2)	0,3249(19)	0,1612(12)	0,040(11)
O58	0,8694(19)	0,1176(18)	0,1877(9)	0,017(8)
O59	0,734(2)	0,3424(19)	0,1720(10)	0,030(9)
O60	0,690(2)	0,208(2)	0,2157(10)	0,033(10)
O61	0,7646(19)	0,2025(17)	0,3018(11)	0,030(10)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
O62	0,741(2)	0,134(3)	0,0658(10)	0,051(12)
O70	0,235(2)	0,653(2)	0,3822(11)	0,038(11)
O71	0,910(2)	0,329(2)	0,4727(12)	0,044(11)
O72	0,682(2)	0,2458(18)	0,5559(12)	0,042(11)
O73	1,060(3)	0,309(2)	0,3806(19)	0,10(2)
O74	0,596(2)	0,623(2)	0,4161(12)	0,045(11)
O80	0,477(3)	-0,212(2)	0,1023(16)	0,068(15)
O81	0,208(3)	0,140(2)	0,0385(12)	0,046(11)
O82	0,286(4)	-0,106(3)	0,1590(17)	0,090(18)
O83	0,260(2)	0,088(2)	0,1284(13)	0,049(11)
O84	0,222(4)	0,274(3)	0,1119(18)	0,098(17)
Ag1	0,6103(2)	0,3690(2)	0,50947(13)	0,0235(11)
Ag2	0,5839(3)	0,5516(2)	0,48332(14)	0,0320(12)
Ag3	0,6446(3)	0,4823(2)	0,38544(14)	0,0304(11)
Ag4	0,7616(3)	0,4335(2)	0,45275(14)	0,0300(11)
Ag5	0,3679(3)	0,5655(2)	0,41262(13)	0,0303(11)
Ag6	0,5075(3)	0,4063(2)	0,43546(13)	0,0288(11)
Ag7	0,9017(3)	0,3463(3)	0,38866(19)	0,0690(19)
Ag8	0,5316(3)	0,0492(3)	0,05092(15)	0,0456(13)
Ag9	0,3439(3)	0,1763(4)	0,08074(17)	0,0643(16)
Ag10	0,3466(3)	0,0457(3)	0,01596(18)	0,0639(16)
Ag11	0,6216(4)	0,1772(3)	0,00393(19)	0,0719(17)
Ag12	0,4828(3)	-0,1047(3)	0,04373(16)	0,0533(15)
Ag13	0,3500(3)	-0,0319(3)	0,10212(16)	0,0569(15)
N1	0,096(3)	0,742(2)	0,3840(13)	0,029(11)
N2	0,982(3)	0,191(3)	0,4901(13)	0,033(12)
N3	0,723(3)	0,103(3)	0,5769(15)	0,043(13)
N4	1,181(4)	0,224(3)	0,3539(18)	0,072(17)
N5	0,558(2)	0,729(2)	0,3630(13)	0,021(10)
N10	0,497(4)	-0,253(3)	0,1723(19)	0,071(17)
N11	0,059(4)	0,157(3)	0,0600(17)	0,060(15)
N12	0,258(4)	-0,140(4)	0,226(2)	0,083(19)
N13	0,186(3)	0,089(3)	0,1921(14)	0,033(12)
N14	0,142(4)	0,331(4)	0,170(2)	0,082(19)
C1	0,173(4)	0,699(4)	0,401(2)	0,058(19)
C2	0,087(4)	0,741(4)	0,338(2)	0,06(2)
C3	0,012(5)	0,793(5)	0,410(2)	0,08(2)
C4	0,910(4)	0,253(3)	0,4849(16)	0,028(14)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
C5	1,075(4)	0,207(4)	0,4789(19)	0,048(17)
C6	0,978(4)	0,111(3)	0,5026(19)	0,048(17)
C7	0,691(3)	0,170(3)	0,5501(17)	0,024(13)
C8	0,754(4)	0,105(4)	0,6147(18)	0,051(17)
C9	0,738(3)	0,021(3)	0,5652(15)	0,014(12)
C10	1,090(5)	0,254(4)	0,358(2)	0,07(2)
C11	1,213(5)	0,155(5)	0,330(3)	0,10(3)
C12	1,256(5)	0,248(5)	0,370(3)	0,10(3)
C13	0,548(3)	0,691(3)	0,3993(16)	0,025(14)
C14	0,506(4)	0,814(4)	0,348(2)	0,055(18)
C15	0,637(4)	0,693(3)	0,3339(18)	0,045(17)
C16	0,499(4)	0,495(3)	0,3804(19)	0,042(16)
C17	0,448(4)	0,521(3)	0,3502(18)	0,034(15)
C18	0,400(3)	0,548(3)	0,3108(17)	0,033(15)
C19	0,307(5)	0,512(5)	0,315(3)	0,10(3)
C20	0,461(4)	0,509(3)	0,2785(18)	0,042(16)
C21	0,380(4)	0,642(3)	0,2997(17)	0,036(15)
C22	0,702(4)	0,451(4)	0,5167(19)	0,045(17)
C23	0,755(3)	0,486(3)	0,5244(15)	0,021(13)
C24	0,829(4)	0,527(3)	0,5295(17)	0,035(15)
C25	0,918(3)	0,471(3)	0,5364(18)	0,039(15)
C26	0,834(3)	0,592(3)	0,4923(13)	0,008(11)
C27	0,790(4)	0,572(3)	0,5692(18)	0,044(16)
C28	0,792(3)	0,474(3)	0,3890(15)	0,018(12)
C29	0,854(4)	0,493(3)	0,3649(17)	0,034(15)
C30	0,921(3)	0,526(3)	0,3329(16)	0,021(13)
C31	0,955(4)	0,480(4)	0,299(2)	0,060(19)
C32	0,871(5)	0,614(4)	0,315(2)	0,09(2)
C33	1,007(4)	0,525(4)	0,355(2)	0,07(2)
C34	0,491(3)	0,323(3)	0,4946(16)	0,027(14)
C35	0,451(3)	0,267(3)	0,4961(17)	0,032(15)
C36	0,409(3)	0,195(3)	0,5027(15)	0,020(13)
C37	0,484(3)	0,117(3)	0,4993(17)	0,034(15)
C38	0,361(4)	0,193(3)	0,5476(16)	0,038(15)
C39	0,342(3)	0,208(3)	0,4722(16)	0,033(15)
C50	0,513(6)	-0,216(5)	0,134(3)	0,09(3)
C51	0,538(5)	-0,248(5)	0,212(3)	0,10(3)
C52	0,439(6)	-0,316(5)	0,176(3)	0,10(3)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
C53	0,146(4)	0,111(4)	0,053(2)	0,060(19)
C54	0,045(6)	0,243(5)	0,049(3)	0,12(3)
C55	-0,020(5)	0,125(4)	0,075(2)	0,08(2)
C56	0,296(6)	-0,109(6)	0,188(3)	0,09(3)
C57	0,175(4)	-0,188(4)	0,223(2)	0,062(19)
C58	0,269(4)	-0,135(4)	0,268(2)	0,06(2)
C59	0,260(4)	0,097(4)	0,166(2)	0,054(19)
C60	0,104(4)	0,063(4)	0,179(2)	0,07(2)
C61	0,191(3)	0,101(3)	0,2341(15)	0,025(13)
C62	0,330(4)	-0,084(4)	0,047(2)	0,06(2)
C63	0,735(4)	0,120(3)	-0,0545(17)	0,033(15)
C64	0,816(5)	0,161(4)	-0,063(2)	0,07(2)
C65	0,876(5)	0,165(5)	-0,027(2)	0,09(3)
C66	0,881(5)	0,115(5)	-0,094(2)	0,09(2)
C67	0,783(5)	0,247(5)	-0,090(3)	0,10(3)
C68	0,461(4)	0,167(4)	0,030(2)	0,055(18)
C69	0,428(5)	0,241(4)	0,016(2)	0,07(2)
C70	0,376(6)	0,329(6)	-0,004(3)	0,11(3)
C71	0,340(19)	0,311(18)	-0,041(9)	0,44(16)
C72	0,393(7)	0,397(7)	0,014(3)	0,14(4)
C74	0,609(4)	-0,075(4)	0,052(2)	0,056(18)
C75	0,690(4)	-0,105(4)	0,064(2)	0,052(18)
C76	0,796(5)	-0,124(5)	0,078(3)	0,08(2)
C77	0,846(6)	-0,218(5)	0,067(3)	0,11(3)
C78	0,854(5)	-0,069(5)	0,057(2)	0,09(2)
C79	0,790(5)	-0,149(5)	0,125(3)	0,10(3)
C81	0,145(7)	0,364(6)	0,203(3)	0,13(4)
C80	0,226(6)	0,301(5)	0,145(3)	0,10(3)
Cl1	0,660(3)	0,314(3)	0,008(2)	0,18(3)

Tabelle A.14.: Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für **6**.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
W1	0,0246(13)	0,0221(13)	0,0390(17)	-0,0122(13)	-0,0009(12)	-0,0010(11)
W2	0,0222(13)	0,0189(13)	0,0316(17)	-0,0086(12)	0,0034(12)	0,0007(11)
W3	0,0186(12)	0,0207(13)	0,0382(18)	-0,0091(13)	0,0045(12)	-0,0011(11)
W4	0,0175(12)	0,0186(13)	0,0325(17)	-0,0084(12)	0,0027(11)	-0,0004(11)
W5	0,0237(13)	0,0173(13)	0,0341(17)	-0,0082(13)	-0,0003(12)	-0,0004(11)
W6	0,0315(14)	0,0223(14)	0,0337(17)	-0,0054(13)	-0,0002(12)	0,0024(12)

Weiter auf der nächsten Seite

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
W7	0,0197(13)	0,0269(14)	0,0378(18)	-0,0119(13)	-0,0008(12)	-0,0031(11)
W8	0,0207(12)	0,0138(12)	0,0363(17)	-0,0096(12)	0,0002(12)	0,0024(10)
W9	0,0187(12)	0,0195(13)	0,0377(17)	-0,0124(13)	0,0025(12)	0,0018(11)
W10	0,0193(12)	0,0258(14)	0,0361(18)	-0,0070(13)	-0,0002(12)	0,0041(11)
W11	0,0233(13)	0,0293(14)	0,0360(18)	-0,0154(13)	0,0033(12)	-0,0004(11)
W12	0,0160(12)	0,0161(13)	0,0351(17)	-0,0080(12)	0,0024(11)	0,0052(10)
W13	0,0198(12)	0,0156(13)	0,0327(17)	-0,0108(12)	0,0029(11)	0,0034(10)
W14	0,0144(12)	0,0217(13)	0,0359(17)	-0,0142(13)	-0,0006(11)	0,0034(11)
W15	0,0322(14)	0,0314(15)	0,0357(18)	-0,0120(13)	-0,0044(13)	-0,0027(12)
W16	0,0317(14)	0,0413(16)	0,0349(18)	-0,0133(14)	0,0021(13)	-0,0033(13)
W17	0,0285(14)	0,0286(14)	0,0339(18)	-0,0092(13)	0,0062(13)	-0,0019(12)
W18	0,0365(14)	0,0370(15)	0,0320(18)	-0,0071(14)	-0,0045(13)	0,0031(13)
P1	0,016(8)	0,013(8)	0,029(10)	-0,001(8)	-0,011(8)	-0,005(7)
P2	0,015(8)	0,020(9)	0,018(10)	-0,009(8)	-0,007(7)	0,004(7)
O1	0,03(2)	0,020(19)	0,02(2)	-0,017(18)	0,022(17)	-0,015(17)
O2	0,008(17)	0,000(16)	0,06(3)	-0,026(18)	0,006(17)	-0,005(14)
O3	0,008(16)	0,019(18)	0,000(19)	0,014(16)	0,001(14)	-0,002(15)
O4	0,016(18)	0,000(17)	0,05(3)	0,019(18)	-0,006(18)	0,014(15)
O5	0,007(17)	0,022(19)	0,04(3)	-0,007(19)	-0,001(17)	-0,013(16)
O6	0,023(18)	0,013(18)	0,02(2)	0,023(17)	-0,026(16)	-0,011(16)
O7	0,03(2)	0,015(19)	0,02(2)	0,011(18)	-0,006(17)	0,024(17)
O8	0,03(2)	0,02(2)	0,07(3)	-0,04(2)	-0,01(2)	0,029(17)
O9	0,05(2)	0,000(17)	0,04(3)	-0,010(18)	0,010(19)	-0,017(17)
O10	0,028(19)	0,013(18)	0,02(2)	0,004(17)	0,004(16)	-0,015(16)
O11	0,03(2)	0,03(2)	0,04(3)	-0,03(2)	-0,001(18)	-0,017(18)
O12	0,04(2)	0,013(19)	0,01(2)	0,017(17)	-0,010(18)	-0,002(17)
O13	0,011(19)	0,04(2)	0,07(3)	-0,01(2)	0,018(19)	-0,001(17)
O14	0,03(2)	0,000(18)	0,08(3)	-0,03(2)	0,00(2)	0,021(16)
O15	0,04(2)	0,06(3)	0,01(2)	0,00(2)	-0,010(18)	-0,02(2)
O16	0,018(19)	0,000(17)	0,08(3)	-0,02(2)	0,04(2)	0,001(15)
O17	0,05(2)	0,015(19)	0,03(2)	-0,008(18)	0,011(19)	-0,026(18)
O18	0,027(19)	0,017(18)	0,03(2)	-0,023(18)	0,026(17)	-0,026(16)
O19	0,009(18)	0,02(2)	0,12(4)	-0,05(2)	0,03(2)	0,005(16)
O20	0,000(17)	0,012(18)	0,04(3)	0,006(18)	0,010(16)	0,009(15)
O21	0,03(2)	0,04(2)	0,03(2)	0,00(2)	0,007(18)	-0,016(19)
O22	0,027(19)	0,003(17)	0,04(3)	0,005(18)	-0,014(18)	0,005(16)
O23	0,03(2)	0,012(19)	0,03(3)	0,007(18)	0,008(18)	0,013(17)
O24	0,020(19)	0,02(2)	0,03(3)	0,005(19)	0,010(18)	0,013(17)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
O25	0,03(2)	0,004(17)	0,02(2)	0,005(17)	0,016(17)	0,005(16)
O26	0,03(2)	0,03(2)	0,03(2)	-0,03(2)	0,014(18)	0,005(18)
O27	0,000(16)	0,03(2)	0,002(19)	0,014(17)	0,011(14)	-0,014(16)
O28	0,000(16)	0,02(2)	0,06(3)	-0,03(2)	0,014(17)	-0,001(15)
O29	0,022(19)	0,000(17)	0,08(3)	0,02(2)	-0,03(2)	0,002(16)
O30	0,018(19)	0,05(2)	0,02(2)	-0,02(2)	0,009(17)	0,001(18)
O31	0,05(2)	0,01(2)	0,06(3)	-0,02(2)	0,03(2)	0,000(18)
O32	0,04(2)	0,03(2)	0,03(3)	-0,02(2)	-0,005(19)	0,005(18)
O33	0,06(2)	0,08(3)	0,00(2)	0,01(2)	-0,042(19)	0,00(2)
O34	0,024(19)	0,004(17)	0,04(2)	-0,009(18)	0,021(18)	-0,003(16)
O35	0,009(16)	0,013(18)	0,04(2)	-0,019(18)	-0,017(16)	-0,003(15)
O36	0,005(17)	0,000(18)	0,10(4)	0,00(2)	-0,014(19)	0,036(15)
O37	0,05(2)	0,05(2)	0,01(2)	0,02(2)	0,015(19)	-0,03(2)
O38	0,03(2)	0,013(19)	0,07(3)	-0,02(2)	0,00(2)	-0,008(17)
O39	0,007(17)	0,04(2)	0,04(2)	-0,039(19)	0,024(16)	-0,024(16)
O40	0,004(17)	0,07(3)	0,05(3)	-0,02(2)	0,019(18)	-0,036(19)
O41	0,000(17)	0,03(2)	0,08(3)	-0,05(2)	-0,006(18)	0,021(16)
O42	0,04(2)	0,009(17)	0,000(19)	-0,014(16)	0,028(16)	-0,020(16)
O43	0,04(2)	0,019(19)	0,03(2)	-0,022(18)	-0,001(18)	-0,011(17)
O44	0,08(3)	0,02(2)	0,02(2)	-0,001(19)	0,00(2)	0,00(2)
O45	0,018(19)	0,03(2)	0,05(3)	0,00(2)	0,044(19)	0,012(18)
O46	0,000(16)	0,04(2)	0,01(2)	-0,010(17)	0,011(15)	0,014(15)
O47	0,007(17)	0,008(17)	0,05(3)	-0,024(18)	0,032(17)	0,001(15)
O48	0,04(2)	0,02(2)	0,05(3)	0,02(2)	-0,01(2)	-0,020(18)
O49	0,05(2)	0,06(3)	0,01(2)	0,01(2)	-0,010(19)	0,01(2)
O50	0,03(2)	0,01(2)	0,14(5)	-0,03(3)	0,05(3)	0,008(18)
O51	0,031(19)	0,008(18)	0,01(2)	0,009(16)	0,017(16)	-0,002(16)
O52	0,03(2)	0,03(2)	0,05(3)	-0,06(2)	0,017(19)	0,007(18)
O53	0,06(2)	0,000(18)	0,04(3)	-0,025(18)	0,00(2)	0,002(18)
O54	0,011(18)	0,013(19)	0,10(4)	-0,02(2)	0,01(2)	0,003(16)
O55	0,03(2)	0,000(18)	0,07(3)	0,03(2)	0,00(2)	0,030(17)
O56	0,04(2)	0,03(2)	0,08(3)	-0,04(2)	0,03(2)	-0,03(2)
O57	0,03(2)	0,013(19)	0,07(3)	-0,01(2)	0,03(2)	-0,017(17)
O58	0,017(18)	0,03(2)	0,01(2)	-0,003(17)	0,003(16)	-0,015(16)
O59	0,04(2)	0,02(2)	0,02(2)	-0,019(19)	-0,022(18)	0,011(18)
O60	0,03(2)	0,03(2)	0,03(3)	0,028(19)	0,002(18)	0,008(18)
O61	0,011(18)	0,006(18)	0,08(3)	0,010(19)	0,014(19)	-0,031(16)
O62	0,04(2)	0,10(3)	0,00(2)	0,03(2)	-0,006(19)	-0,03(2)

Weiter auf der nächsten Seite

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
O70	0,018(19)	0,03(2)	0,04(3)	0,00(2)	0,030(19)	0,018(18)
O71	0,05(2)	0,03(2)	0,05(3)	-0,01(2)	0,00(2)	-0,01(2)
O72	0,05(2)	0,000(19)	0,07(3)	0,00(2)	-0,03(2)	0,011(17)
O73	0,03(2)	0,04(3)	0,23(7)	-0,05(4)	0,06(3)	-0,02(2)
O74	0,03(2)	0,01(2)	0,06(3)	0,00(2)	0,01(2)	0,028(19)
O80	0,10(3)	0,00(2)	0,10(4)	0,01(2)	-0,06(3)	-0,01(2)
O81	0,06(3)	0,05(2)	0,05(3)	-0,01(2)	0,02(2)	-0,05(2)
O82	0,13(5)	0,11(4)	0,07(4)	-0,04(4)	-0,02(4)	-0,08(4)
O83	0,04(2)	0,05(3)	0,06(3)	-0,04(2)	-0,01(2)	0,00(2)
Ag1	0,019(2)	0,018(2)	0,033(3)	-0,009(2)	0,000(2)	-0,0007(19)
Ag2	0,023(2)	0,018(2)	0,049(3)	-0,009(2)	0,001(2)	0,006(2)
Ag3	0,032(2)	0,019(2)	0,039(3)	-0,011(2)	0,003(2)	-0,002(2)
Ag4	0,022(2)	0,026(2)	0,040(3)	-0,011(2)	0,004(2)	0,000(2)
Ag5	0,025(2)	0,026(2)	0,036(3)	-0,009(2)	0,006(2)	0,001(2)
Ag6	0,025(2)	0,021(2)	0,036(3)	-0,004(2)	0,005(2)	0,002(2)
Ag7	0,050(3)	0,034(3)	0,095(5)	0,007(3)	0,033(3)	0,014(3)
Ag8	0,047(3)	0,045(3)	0,042(3)	-0,013(3)	0,002(3)	-0,003(2)
Ag9	0,051(3)	0,090(4)	0,050(4)	-0,010(3)	-0,006(3)	-0,013(3)
Ag10	0,047(3)	0,061(3)	0,065(4)	-0,003(3)	0,017(3)	0,008(3)
Ag11	0,068(4)	0,064(4)	0,087(5)	-0,025(4)	0,001(3)	-0,013(3)
Ag12	0,044(3)	0,048(3)	0,063(4)	-0,006(3)	0,002(3)	-0,004(3)
Ag13	0,054(3)	0,069(4)	0,055(4)	-0,027(3)	0,000(3)	-0,018(3)
Cl1	0,06(3)	0,12(4)	0,29(8)	0,13(5)	-0,04(4)	-0,01(3)

A.7. $\{[\text{Ag}_{16}(\text{C}\equiv\text{C}^t\text{Bu})_{11}(\text{CH}_3\text{CN})_7][\text{P}_2\text{W}_{18}\text{O}_{62}]\}_2$ $[\text{Ag}_{14}(\text{C}\equiv\text{C}^t\text{Bu})_{12}(\text{CH}_3\text{CN})_2] \cdot 7$

Kristallzustand	nass
Summenformel	$\text{C}_{118}\text{H}_{177}\text{Ag}_{23}\text{N}_8\text{O}_{62}\text{P}_2\text{W}_{18}$
Kristall	farblose Nadeln (0,10 x 0,02 x 0,02 mm ³)
Kristallsystem, Raumgruppe	triklin, $\text{P}\bar{1}$ (Nr. 2)
Gitterkonstanten/Å, °	$a = 13,886(1)$, $b = 23,876(1)$, $c = 35,219(2)$ $\alpha = 93,110(1)$, $\beta = 97,494(1)$, $\gamma = 105,701(1)$
Volumen/Å ³	11095(1)
Formeleinheiten	2
Röntgendichte/g cm ⁻³	2,560
Temperatur	100 K
$2\theta_{max}$	52,04 °
hkl -Bereich	$-17 \leq h \leq 17$, $-29 \leq k \leq 29$, $-43 \leq l \leq 43$
F(000)	7760
Absorptionskoeffizient μ/mm^{-1}	11,333
Zahl der gemessenen Reflexe	88340
davon symmetrieunabhängig	43400 ($R_{int} = 0,0520$)
Anzahl der Parameter	1509
Restelektronendichte/e·Å ⁻³ (max/min)	4,94/-2,45
R_1 ($I > 2\sigma(I)$)	0,0652
wR_2 ($I > 2\sigma(I)$)	0,1022
R_1 (alle Daten)	0,1696
wR_2 (alle Daten)	0,2099
Datenbank	CCDC 793542
freies Volumen	22,2 %
freies Volumen mit Lösungsmittel	-
Lösungsmittel pro Formeleinheit	-
Besonderheiten	

Tabelle A.15.: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsfaktoren (Å²) von **7**. U_{eq} ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U_{eq}
W1	-0,44013(6)	-0,43175(3)	0,20539(3)	0,02715(18)
W2	-0,63090(6)	-0,37975(3)	0,16570(2)	0,02491(18)
W3	-0,46551(6)	-0,41226(3)	0,11073(2)	0,02697(18)
W4	-0,37163(6)	-0,30353(3)	0,27737(2)	0,02403(17)
W5	-0,55135(6)	-0,24740(3)	0,23524(2)	0,02230(17)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
W6	-0,57162(6)	-0,23257(3)	0,13093(2)	0,02174(17)
W7	-0,39976(6)	-0,26195(3)	0,08017(2)	0,02295(17)
W8	-0,19990(6)	-0,31943(3)	0,12719(2)	0,02206(17)
W9	-0,17838(6)	-0,33202(3)	0,22251(2)	0,02335(17)
W10	-0,20146(6)	-0,15032(3)	0,30094(2)	0,02020(16)
W11	-0,38228(5)	-0,09410(3)	0,26004(2)	0,02018(16)
W12	-0,40899(6)	-0,07754(3)	0,15653(2)	0,02031(16)
W13	-0,23873(6)	-0,10692(3)	0,10463(2)	0,02104(16)
W14	-0,03441(5)	-0,16474(3)	0,14992(2)	0,01922(16)
W15	-0,01062(5)	-0,17788(3)	0,24466(2)	0,02020(16)
W16	-0,01334(5)	-0,02582(3)	0,26912(2)	0,01997(16)
W17	-0,19708(5)	0,02512(3)	0,22310(2)	0,02015(16)
W18	-0,02638(5)	-0,01000(3)	0,17266(2)	0,01929(16)
P1	-0,3833(3)	-0,28687(19)	0,17844(13)	0,0159(9)
P2	-0,2068(3)	-0,12382(18)	0,20354(12)	0,0128(8)
O1	-0,4484(11)	-0,4947(6)	0,2276(5)	0,038(4)
O2	-0,5818(9)	-0,4340(6)	0,1938(4)	0,026(3)
O3	-0,7594(10)	-0,4120(6)	0,1592(4)	0,027(3)
O4	-0,6010(10)	-0,4188(6)	0,1189(4)	0,028(3)
O5	-0,4888(12)	-0,4640(6)	0,0729(4)	0,039(4)
O6	-0,4443(14)	-0,4552(8)	0,1523(4)	0,051(5)
O7	-0,4339(10)	-0,3758(5)	0,2482(4)	0,028(3)
O8	-0,6096(9)	-0,3274(5)	0,2084(4)	0,022(3)
O9	-0,6203(10)	-0,3145(5)	0,1348(4)	0,023(3)
O10	-0,4622(10)	-0,3425(5)	0,0869(4)	0,023(3)
O11	-0,3203(9)	-0,3823(5)	0,1198(4)	0,021(3)
O12	-0,3009(10)	-0,3991(5)	0,2090(4)	0,027(3)
O13	-0,4530(10)	-0,3523(6)	0,1687(4)	0,023(3)
O14	-0,3606(11)	-0,3296(6)	0,3214(4)	0,033(3)
O15	-0,4975(10)	-0,2847(6)	0,2764(4)	0,029(3)
O16	-0,6594(10)	-0,2427(6)	0,2523(4)	0,025(3)
O17	-0,5685(9)	-0,2231(5)	0,1854(4)	0,023(3)
O18	-0,6847(10)	-0,2205(5)	0,1141(4)	0,025(3)
O19	-0,5263(10)	-0,2464(5)	0,0830(4)	0,024(3)
O20	-0,4034(11)	-0,2684(6)	0,0313(4)	0,028(3)
O21	-0,2748(8)	-0,2763(5)	0,0984(4)	0,020(3)
O22	-0,1370(10)	-0,3433(6)	0,0938(4)	0,026(3)
O23	-0,1456(10)	-0,3468(6)	0,1719(4)	0,024(3)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
O24	-0,1086(10)	-0,3699(6)	0,2491(4)	0,027(3)
O25	-0,3007(10)	-0,2219(6)	0,2927(4)	0,024(3)
O26	-0,4033(10)	-0,2657(6)	0,2175(4)	0,028(3)
O27	-0,4168(9)	-0,2515(5)	0,1458(4)	0,023(3)
O28	-0,2739(10)	-0,2886(6)	0,1786(4)	0,025(3)
O29	-0,4628(10)	-0,0634(6)	0,2819(4)	0,024(3)
O30	-0,4313(10)	-0,0951(6)	0,2062(3)	0,023(3)
O31	-0,4943(11)	-0,0390(6)	0,1443(4)	0,029(3)
O32	-0,3432(9)	-0,0707(5)	0,1112(3)	0,018(3)
O33	-0,2144(10)	-0,0884(6)	0,0600(4)	0,029(3)
O34	-0,1411(10)	-0,1484(5)	0,1180(4)	0,024(3)
O35	0,0543(10)	-0,1613(6)	0,1204(4)	0,026(3)
O36	0,0441(10)	-0,1733(6)	0,1971(4)	0,028(3)
O37	0,0888(10)	-0,1926(6)	0,2740(4)	0,029(3)
O38	-0,1088(9)	-0,1815(5)	0,2782(4)	0,021(3)
O39	-0,1595(10)	-0,1495(6)	0,3491(4)	0,026(3)
O40	-0,3033(9)	-0,1095(5)	0,3042(4)	0,021(3)
O41	-0,2636(9)	-0,1399(5)	0,2373(4)	0,022(3)
O42	-0,4650(9)	-0,1747(5)	0,2548(4)	0,021(3)
O43	-0,1361(9)	-0,1617(5)	0,1981(3)	0,020(3)
O44	0,0234(8)	-0,0963(5)	0,2542(4)	0,018(3)
O45	-0,1072(9)	-0,0738(6)	0,2947(4)	0,022(3)
O46	-0,2822(9)	-0,0247(6)	0,2537(4)	0,024(3)
O47	-0,0846(9)	-0,2586(5)	0,2278(4)	0,021(3)
O48	-0,1389(10)	-0,0398(6)	0,1336(4)	0,024(3)
O49	0,0062(9)	-0,0794(5)	0,1655(4)	0,020(3)
O50	-0,1372(9)	-0,0584(5)	0,2130(4)	0,022(3)
O51	0,0851(9)	0,0083(6)	0,3050(4)	0,024(3)
O52	-0,0875(10)	0,0306(6)	0,2646(4)	0,024(3)
O53	-0,2214(11)	0,0903(6)	0,2332(4)	0,031(3)
O54	-0,0985(10)	0,0455(6)	0,1902(4)	0,026(3)
O55	0,0591(10)	0,0386(5)	0,1501(4)	0,025(3)
O56	0,0472(9)	0,0054(6)	0,2243(4)	0,025(3)
O57	-0,0998(9)	-0,2446(5)	0,1433(4)	0,020(3)
O58	-0,3346(9)	-0,1803(6)	0,0906(4)	0,023(3)
O59	-0,4879(9)	-0,1536(5)	0,1370(4)	0,022(3)
O60	-0,2499(11)	-0,3092(6)	0,2593(4)	0,031(3)
O61	-0,2778(9)	-0,1257(5)	0,1660(4)	0,021(3)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
O62	-0,2990(9)	-0,0114(5)	0,1815(4)	0,021(3)
Ag1	0,40410(14)	0,91551(9)	0,55945(5)	0,0426(4)
Ag2	0,53545(12)	1,03524(8)	0,58844(5)	0,0347(4)
Ag3	0,35978(12)	1,05743(8)	0,54660(5)	0,0354(4)
Ag4	0,47017(14)	1,12533(8)	0,49052(5)	0,0392(4)
Ag5	0,32186(14)	1,02613(9)	0,44270(5)	0,0417(4)
Ag6	0,26276(13)	0,94290(9)	0,50077(5)	0,0427(4)
Ag7	0,35387(13)	0,86063(8)	0,44768(5)	0,0394(4)
Ag11	0,18073(11)	0,13760(7)	0,22432(4)	0,0258(3)
Ag12	0,23731(11)	0,21362(6)	0,15715(4)	0,0261(3)
Ag13	0,03468(12)	0,23600(7)	0,11389(5)	0,0317(4)
Ag14	0,09208(12)	0,13238(7)	0,09147(5)	0,0343(4)
Ag15	0,20577(11)	0,33030(6)	0,14822(5)	0,0270(3)
Ag16	0,00844(11)	0,14604(6)	0,16887(5)	0,0265(3)
Ag17	0,30586(12)	0,44972(7)	0,18977(5)	0,0327(4)
Ag18	0,10109(12)	0,26748(7)	0,20535(5)	0,0308(3)
Ag19	0,13726(13)	0,50634(7)	0,19205(5)	0,0375(4)
Ag20	0,25009(11)	0,07726(7)	0,15434(5)	0,0291(3)
Ag21	0,12445(13)	0,48980(7)	0,10122(5)	0,0356(4)
Ag22	0,22957(11)	0,02019(7)	0,23566(5)	0,0300(3)
Ag23	0,31363(13)	0,46152(7)	0,10102(5)	0,0370(4)
Ag24	0,11770(13)	0,39415(7)	0,22326(6)	0,0392(4)
Ag25	0,26725(14)	0,59027(7)	0,05752(6)	0,0411(4)
Ag26	0,02041(15)	0,38279(8)	0,14486(6)	0,0430(4)
N1	0,2619(16)	0,7821(9)	0,3984(6)	0,049(5)
N2	0,3313(15)	0,6594(9)	0,0202(6)	0,040(5)
N3	0,1609(17)	0,6383(10)	0,0800(6)	0,049(5)
N4	0,2578(14)	-0,0562(8)	0,2606(5)	0,034(4)
N5	0,0486(15)	0,0417(9)	0,0566(6)	0,042(5)
N6	0,1032(15)	0,1910(9)	0,0337(6)	0,042(5)
N7	0,2534(12)	-0,0178(7)	0,1531(5)	0,027(4)
N8	0,0978(19)	0,5821(12)	0,2239(7)	0,064(7)
C1	0,3846(17)	0,9976(10)	0,5935(7)	0,037(5)
C2	0,3144(15)	0,9721(8)	0,6092(6)	0,025(4)
C3	0,2273(16)	0,9411(9)	0,6273(6)	0,031(5)
C4	0,2731(19)	0,9253(11)	0,6679(7)	0,045(6)
C5	0,1678(18)	0,8862(10)	0,6032(7)	0,040(5)
C6	0,1607(18)	0,9821(10)	0,6319(7)	0,040(5)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
C7	0,4804(16)	1,1502(9)	0,5482(6)	0,032(5)
C8	0,4657(17)	1,1754(10)	0,5770(7)	0,035(5)
C9	0,4465(17)	1,2087(10)	0,6110(6)	0,034(5)
C10	0,4850(19)	1,1841(11)	0,6460(7)	0,043(6)
C11	0,3354(17)	1,2073(10)	0,6063(7)	0,037(5)
C12	0,510(2)	1,2732(11)	0,6105(8)	0,047(6)
C13	0,2283(18)	1,0229(10)	0,4952(7)	0,039(5)
C14	0,1928(19)	1,0613(11)	0,4884(7)	0,042(6)
C15	0,140(3)	1,1064(17)	0,4797(11)	0,080(10)
C16	0,019(3)	1,0735(18)	0,4862(12)	0,099(13)
C17	0,163(5)	1,148(3)	0,5148(17)	0,16(2)
C18	0,127(3)	1,1183(15)	0,4414(10)	0,075(9)
C19	0,4418(18)	1,1091(10)	0,4309(7)	0,038(5)
C20	0,4170(16)	1,1082(9)	0,3961(6)	0,031(5)
C21	0,3929(18)	1,1129(11)	0,3557(7)	0,041(6)
C22	0,389(3)	1,0543(15)	0,3330(10)	0,078(10)
C23	0,473(2)	1,1626(12)	0,3442(8)	0,056(7)
C24	0,289(2)	1,1236(14)	0,3474(9)	0,064(8)
C25	0,3115(15)	0,9349(9)	0,4121(6)	0,028(4)
C26	0,2180(15)	0,9207(9)	0,4047(6)	0,027(4)
C27	0,1054(16)	0,9006(9)	0,3934(6)	0,030(5)
C28	0,0603(17)	0,8550(10)	0,4200(6)	0,035(5)
C29	0,0598(19)	0,9509(11)	0,3963(7)	0,044(6)
C30	0,0862(18)	0,8719(10)	0,3515(6)	0,037(5)
C31	0,2868(19)	0,8610(11)	0,5076(7)	0,042(6)
C32	0,278(2)	0,8105(12)	0,5102(8)	0,051(7)
C33	0,163(4)	0,715(3)	0,4866(17)	0,15(2)
C34	0,336(4)	0,726(2)	0,4973(17)	0,15(2)
C35	0,263(4)	0,747(2)	0,5136(15)	0,108(14)
C36	0,245(6)	0,733(3)	0,550(2)	0,21(3)
C37	0,2142(16)	0,4911(9)	0,0581(6)	0,029(4)
C38	0,2453(16)	0,4877(9)	0,0268(6)	0,030(5)
C39	0,2771(17)	0,4767(10)	-0,0111(6)	0,035(5)
C40	0,299(2)	0,4203(11)	-0,0131(8)	0,047(6)
C41	0,3665(19)	0,5257(11)	-0,0180(8)	0,046(6)
C42	0,184(3)	0,4757(15)	-0,0430(10)	0,073(9)
C43	0,0160(17)	0,4764(10)	0,1382(7)	0,037(5)
C44	-0,0609(17)	0,4699(10)	0,1511(7)	0,036(5)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
C45	-0,1535(19)	0,4687(11)	0,1668(7)	0,045(6)
C46	-0,245(2)	0,4240(13)	0,1402(9)	0,062(8)
C47	-0,170(3)	0,5264(14)	0,1624(10)	0,068(8)
C48	-0,150(3)	0,4530(16)	0,2069(10)	0,079(10)
C49	0,2400(17)	0,4730(10)	0,2371(7)	0,036(5)
C50	0,2753(16)	0,5009(9)	0,2654(6)	0,032(5)
C51	0,326(2)	0,5367(12)	0,3037(8)	0,049(6)
C52	0,268(4)	0,512(2)	0,3351(15)	0,130(18)
C53	0,437(2)	0,5373(13)	0,3124(9)	0,061(8)
C54	0,325(3)	0,6015(16)	0,2979(11)	0,084(11)
C55	0,3604(17)	0,4085(10)	0,1458(6)	0,034(5)
C56	0,3897(17)	0,3806(10)	0,1222(6)	0,034(5)
C57	0,4294(17)	0,3437(10)	0,0972(6)	0,035(5)
C58	0,505(2)	0,3846(12)	0,0756(8)	0,056(7)
C59	0,3407(18)	0,3046(11)	0,0678(7)	0,043(6)
C60	0,4821(17)	0,3079(10)	0,1214(7)	0,037(5)
C61	0,0856(16)	0,3275(9)	0,1022(6)	0,029(4)
C62	0,0259(17)	0,3310(9)	0,0754(6)	0,033(5)
C63	-0,0355(19)	0,3336(11)	0,0384(7)	0,045(6)
C64	-0,114(2)	0,2744(12)	0,0258(8)	0,053(7)
C65	0,035(2)	0,3487(12)	0,0061(8)	0,055(7)
C66	-0,092(2)	0,3803(14)	0,0425(9)	0,067(8)
C67	0,2703(16)	0,2894(9)	0,1975(6)	0,030(5)
C68	0,3408(16)	0,3039(9)	0,2236(6)	0,032(5)
C69	0,4258(17)	0,3255(10)	0,2536(6)	0,034(5)
C70	0,428(2)	0,2746(12)	0,2797(8)	0,052(7)
C71	0,522(2)	0,3432(13)	0,2350(9)	0,062(8)
C72	0,416(2)	0,3792(11)	0,2776(8)	0,049(6)
C73	-0,0053(17)	0,3248(10)	0,1987(7)	0,037(5)
C74	-0,0943(16)	0,2959(9)	0,1876(6)	0,029(4)
C75	-0,2025(18)	0,2568(10)	0,1748(7)	0,037(5)
C76	-0,2064(19)	0,1952(10)	0,1857(7)	0,042(6)
C77	-0,231(2)	0,2545(13)	0,1306(8)	0,055(7)
C78	-0,272(2)	0,2827(13)	0,1966(9)	0,061(8)
C79	0,0580(15)	0,1737(8)	0,2289(6)	0,024(4)
C80	0,0512(16)	0,1929(9)	0,2596(6)	0,030(5)
C81	0,0336(19)	0,2134(11)	0,2990(7)	0,044(6)
C82	0,040(2)	0,1631(13)	0,3244(9)	0,062(8)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
C83	0,116(3)	0,2667(18)	0,3142(12)	0,097(12)
C84	-0,069(2)	0,2223(13)	0,2954(9)	0,059(7)
C85	0,2623(15)	0,1531(9)	0,1160(6)	0,026(4)
C86	0,2992(14)	0,1283(8)	0,0945(5)	0,020(4)
C87	0,3522(16)	0,1051(9)	0,0653(6)	0,032(5)
C88	0,3356(18)	0,0400(10)	0,0668(7)	0,041(6)
C89	0,4663(19)	0,1361(11)	0,0740(7)	0,045(6)
C90	0,3094(19)	0,1203(11)	0,0264(7)	0,044(6)
C91	-0,0550(16)	0,1461(9)	0,1105(6)	0,032(5)
C92	-0,1350(15)	0,1222(8)	0,0909(6)	0,024(4)
C93	-0,2327(14)	0,0919(8)	0,0680(6)	0,024(4)
C94	-0,220(2)	0,0414(11)	0,0419(8)	0,048(6)
C95	-0,3030(18)	0,0670(11)	0,0993(7)	0,043(6)
C96	-0,277(2)	0,1344(11)	0,0463(8)	0,049(6)
C97	0,3112(15)	0,1105(9)	0,2221(6)	0,026(4)
C98	0,3913(15)	0,1012(8)	0,2230(6)	0,026(4)
C99	0,4967(16)	0,0957(9)	0,2207(6)	0,029(4)
C100	0,5001(18)	0,0374(10)	0,2356(7)	0,040(5)
C101	0,5760(19)	0,1467(11)	0,2478(7)	0,044(6)
C102	0,5179(17)	0,0978(10)	0,1798(6)	0,036(5)
C103	0,3638(18)	0,7018(10)	0,0067(7)	0,038(5)
C104	0,399(2)	0,7556(12)	-0,0112(8)	0,055(7)
C105	0,130(3)	0,6679(15)	0,0966(10)	0,067(8)
C106	0,101(5)	0,697(3)	0,128(2)	0,18(3)
C107	0,2839(15)	-0,0868(9)	0,2795(6)	0,028(4)
C108	0,3220(16)	-0,1270(9)	0,3046(6)	0,033(5)
C109	0,0367(17)	-0,0076(10)	0,0524(6)	0,033(5)
C110	0,023(2)	-0,0696(12)	0,0503(8)	0,052(7)
C111	0,1218(16)	0,2069(9)	0,0067(6)	0,029(4)
C112	0,147(2)	0,2247(12)	-0,0307(8)	0,050(6)
C113	0,2661(17)	-0,0620(10)	0,1614(7)	0,036(5)
C114	0,2793(18)	-0,1171(10)	0,1710(7)	0,038(5)
C115	0,106(2)	0,6298(14)	0,2234(9)	0,062(8)
C116	0,103(4)	0,689(2)	0,2262(14)	0,117(16)
C117	0,2373(17)	0,7565(10)	0,3691(7)	0,036(5)
C118	0,208(2)	0,7252(13)	0,3303(8)	0,059(7)

Tabelle A.16.: Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für **7**.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
W1	0,0244(4)	0,0204(4)	0,0343(5)	0,0004(3)	0,0053(3)	0,0023(3)
W2	0,0205(4)	0,0220(4)	0,0292(4)	-0,0031(3)	0,0060(3)	0,0008(3)
W3	0,0248(4)	0,0216(4)	0,0312(4)	-0,0063(3)	0,0074(3)	0,0011(3)
W4	0,0239(4)	0,0219(4)	0,0257(4)	0,0016(3)	0,0075(3)	0,0038(3)
W5	0,0165(4)	0,0233(4)	0,0248(4)	-0,0040(3)	0,0056(3)	0,0017(3)
W6	0,0161(4)	0,0230(4)	0,0242(4)	-0,0042(3)	0,0014(3)	0,0043(3)
W7	0,0193(4)	0,0269(4)	0,0209(4)	-0,0051(3)	0,0018(3)	0,0056(3)
W8	0,0189(4)	0,0203(4)	0,0267(4)	-0,0039(3)	0,0049(3)	0,0056(3)
W9	0,0206(4)	0,0211(4)	0,0282(4)	-0,0002(3)	0,0038(3)	0,0061(3)
W10	0,0181(4)	0,0224(4)	0,0189(4)	-0,0005(3)	0,0028(3)	0,0043(3)
W11	0,0160(3)	0,0224(4)	0,0215(4)	-0,0032(3)	0,0047(3)	0,0044(3)
W12	0,0173(4)	0,0223(4)	0,0217(4)	-0,0015(3)	0,0015(3)	0,0076(3)
W13	0,0196(4)	0,0260(4)	0,0182(4)	-0,0002(3)	0,0026(3)	0,0080(3)
W14	0,0164(3)	0,0206(4)	0,0213(4)	-0,0018(3)	0,0047(3)	0,0061(3)
W15	0,0160(3)	0,0223(4)	0,0220(4)	-0,0007(3)	0,0015(3)	0,0060(3)
W16	0,0161(3)	0,0202(4)	0,0208(4)	-0,0027(3)	0,0010(3)	0,0021(3)
W17	0,0165(4)	0,0194(4)	0,0245(4)	-0,0025(3)	0,0044(3)	0,0052(3)
W18	0,0174(4)	0,0184(4)	0,0221(4)	-0,0001(3)	0,0049(3)	0,0045(3)
P1	0,013(2)	0,014(2)	0,019(2)	-0,0018(17)	0,0018(17)	0,0011(17)
P2	0,013(2)	0,011(2)	0,016(2)	-0,0025(16)	0,0063(16)	0,0039(16)
O1	0,031(8)	0,024(8)	0,059(11)	0,006(7)	0,012(7)	0,004(6)
O2	0,017(6)	0,046(9)	0,017(6)	0,009(6)	0,005(5)	0,010(6)
O3	0,017(7)	0,035(8)	0,024(7)	0,000(6)	0,000(5)	0,001(6)
O4	0,022(7)	0,036(8)	0,025(7)	-0,014(6)	0,002(6)	0,007(6)
O5	0,053(10)	0,022(7)	0,035(9)	-0,022(6)	0,009(7)	0,001(7)
O6	0,083(13)	0,082(13)	0,015(7)	-0,019(8)	-0,006(8)	0,078(11)
O7	0,026(7)	0,015(6)	0,032(8)	-0,013(6)	0,007(6)	-0,010(5)
O8	0,011(6)	0,024(7)	0,031(7)	-0,003(6)	0,008(5)	0,003(5)
O9	0,024(7)	0,021(7)	0,024(7)	-0,001(5)	0,007(5)	0,006(5)
O10	0,023(7)	0,018(6)	0,023(7)	-0,004(5)	0,005(5)	-0,001(5)
O11	0,017(6)	0,009(6)	0,031(7)	-0,005(5)	0,001(5)	-0,006(5)
O12	0,028(7)	0,013(6)	0,037(8)	0,001(6)	0,007(6)	0,000(5)
O13	0,024(7)	0,023(7)	0,023(7)	-0,004(5)	0,008(5)	0,007(6)
O14	0,034(8)	0,032(8)	0,030(8)	0,010(6)	0,004(6)	0,002(6)
O15	0,026(7)	0,032(8)	0,029(8)	-0,009(6)	0,010(6)	0,010(6)
O16	0,019(7)	0,032(7)	0,023(7)	-0,001(6)	0,008(5)	0,004(6)
O17	0,022(7)	0,021(7)	0,023(7)	-0,004(5)	0,007(5)	0,004(5)
O18	0,019(7)	0,019(6)	0,032(8)	0,000(6)	0,008(6)	-0,004(5)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
O19	0,023(7)	0,020(7)	0,028(7)	-0,006(6)	0,002(6)	0,004(5)
O20	0,033(8)	0,039(8)	0,016(7)	-0,002(6)	-0,004(6)	0,019(6)
O21	0,007(6)	0,021(6)	0,028(7)	-0,001(5)	0,001(5)	0,000(5)
O22	0,023(7)	0,023(7)	0,034(8)	0,003(6)	0,017(6)	0,003(6)
O23	0,024(7)	0,027(7)	0,021(7)	0,006(6)	0,002(5)	0,007(6)
O24	0,024(7)	0,031(7)	0,030(8)	0,007(6)	0,012(6)	0,008(6)
O25	0,029(7)	0,020(7)	0,021(7)	0,006(5)	0,002(6)	0,001(6)
O26	0,021(7)	0,027(7)	0,032(8)	-0,014(6)	-0,005(6)	0,006(6)
O27	0,013(6)	0,023(7)	0,032(7)	-0,006(6)	-0,002(5)	0,007(5)
O28	0,018(7)	0,024(7)	0,033(8)	-0,005(6)	0,008(6)	0,005(5)
O29	0,031(7)	0,026(7)	0,017(7)	0,002(5)	-0,001(5)	0,012(6)
O30	0,021(7)	0,035(8)	0,014(6)	0,001(5)	0,002(5)	0,008(6)
O31	0,034(8)	0,028(7)	0,028(7)	-0,003(6)	0,008(6)	0,014(6)
O32	0,027(7)	0,019(6)	0,011(6)	0,002(5)	0,004(5)	0,010(5)
O33	0,023(7)	0,042(8)	0,018(7)	0,000(6)	0,002(5)	0,006(6)
O34	0,029(7)	0,022(7)	0,024(7)	-0,004(5)	0,012(6)	0,011(6)
O35	0,020(7)	0,022(7)	0,035(8)	-0,011(6)	0,005(6)	0,005(5)
O36	0,027(7)	0,025(7)	0,029(8)	-0,002(6)	-0,003(6)	0,008(6)
O37	0,019(7)	0,035(8)	0,031(8)	-0,001(6)	0,001(6)	0,008(6)
O38	0,012(6)	0,018(6)	0,035(8)	-0,001(5)	0,001(5)	0,008(5)
O39	0,026(7)	0,025(7)	0,028(7)	0,001(6)	0,007(6)	0,007(6)
O40	0,018(6)	0,016(6)	0,022(7)	-0,006(5)	0,001(5)	-0,004(5)
O41	0,016(6)	0,025(7)	0,022(7)	-0,007(5)	0,001(5)	0,003(5)
O42	0,018(6)	0,020(6)	0,021(7)	-0,013(5)	0,002(5)	0,002(5)
O43	0,023(7)	0,020(6)	0,010(6)	-0,004(5)	0,001(5)	-0,004(5)
O44	0,007(5)	0,018(6)	0,029(7)	0,001(5)	0,005(5)	0,002(5)
O45	0,017(6)	0,027(7)	0,022(7)	-0,005(5)	0,000(5)	0,009(5)
O46	0,017(6)	0,031(7)	0,023(7)	-0,007(6)	0,003(5)	0,006(6)
O47	0,019(6)	0,019(6)	0,024(7)	0,006(5)	0,003(5)	0,003(5)
O48	0,027(7)	0,030(7)	0,020(7)	0,003(6)	0,007(5)	0,014(6)
O49	0,014(6)	0,022(6)	0,025(7)	0,000(5)	0,006(5)	0,005(5)
O50	0,019(6)	0,014(6)	0,032(7)	0,000(5)	0,004(5)	0,002(5)
O51	0,020(7)	0,028(7)	0,025(7)	0,006(6)	0,005(5)	0,008(6)
O52	0,020(7)	0,032(7)	0,020(7)	-0,004(6)	-0,008(5)	0,013(6)
O53	0,030(8)	0,019(7)	0,050(9)	0,002(6)	0,014(7)	0,014(6)
O54	0,027(7)	0,025(7)	0,034(8)	0,006(6)	0,011(6)	0,019(6)
O55	0,034(8)	0,019(6)	0,026(7)	-0,006(5)	0,007(6)	0,013(6)
O56	0,017(6)	0,023(7)	0,038(8)	-0,003(6)	0,010(6)	0,010(5)

Weiter auf der nächsten Seite

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
O57	0,017(6)	0,014(6)	0,031(7)	0,002(5)	0,007(5)	0,005(5)
O58	0,020(7)	0,031(7)	0,027(7)	0,004(6)	0,007(5)	0,022(6)
O59	0,021(7)	0,018(6)	0,023(7)	0,000(5)	0,000(5)	0,005(5)
O60	0,033(8)	0,022(7)	0,032(8)	-0,005(6)	0,007(6)	-0,004(6)
O61	0,011(6)	0,025(7)	0,027(7)	-0,001(5)	-0,004(5)	0,010(5)
O62	0,018(6)	0,013(6)	0,028(7)	-0,009(5)	0,005(5)	0,000(5)
Ag1	0,0420(10)	0,0523(11)	0,0341(9)	-0,0046(8)	0,0085(8)	0,0146(8)
Ag2	0,0241(8)	0,0477(10)	0,0300(8)	0,0016(7)	0,0024(6)	0,0075(7)
Ag3	0,0269(8)	0,0493(10)	0,0284(8)	-0,0009(7)	0,0007(6)	0,0102(7)
Ag4	0,0469(10)	0,0520(11)	0,0200(8)	-0,0051(7)	0,0022(7)	0,0191(8)
Ag5	0,0363(9)	0,0526(11)	0,0352(9)	-0,0070(8)	0,0022(7)	0,0144(8)
Ag6	0,0331(9)	0,0606(12)	0,0313(9)	-0,0060(8)	0,0022(7)	0,0109(8)
Ag7	0,0346(9)	0,0480(10)	0,0352(9)	0,0040(8)	0,0021(7)	0,0127(8)
Ag11	0,0215(7)	0,0299(8)	0,0287(8)	0,0020(6)	0,0033(6)	0,0122(6)
Ag12	0,0257(7)	0,0255(7)	0,0295(8)	0,0003(6)	0,0080(6)	0,0100(6)
Ag13	0,0260(8)	0,0233(8)	0,0433(10)	0,0054(7)	0,0013(7)	0,0041(6)
Ag14	0,0260(8)	0,0339(9)	0,0421(10)	-0,0057(7)	0,0031(7)	0,0097(7)
Ag15	0,0246(7)	0,0235(7)	0,0317(8)	0,0021(6)	0,0044(6)	0,0047(6)
Ag16	0,0214(7)	0,0238(7)	0,0333(8)	0,0022(6)	0,0016(6)	0,0057(6)
Ag17	0,0303(8)	0,0272(8)	0,0386(9)	-0,0047(7)	0,0071(7)	0,0051(6)
Ag18	0,0317(8)	0,0243(8)	0,0373(9)	0,0026(7)	0,0090(7)	0,0075(6)
Ag19	0,0322(9)	0,0330(9)	0,0466(10)	0,0062(8)	0,0102(8)	0,0058(7)
Ag20	0,0242(8)	0,0310(8)	0,0321(8)	0,0053(7)	0,0050(6)	0,0069(6)
Ag21	0,0308(9)	0,0336(9)	0,0403(9)	0,0007(7)	0,0070(7)	0,0053(7)
Ag22	0,0230(8)	0,0324(8)	0,0366(9)	0,0090(7)	0,0061(6)	0,0091(6)
Ag23	0,0359(9)	0,0323(9)	0,0448(10)	0,0088(8)	0,0087(8)	0,0107(7)
Ag24	0,0352(9)	0,0256(8)	0,0524(11)	0,0004(8)	0,0024(8)	0,0038(7)
Ag25	0,0442(10)	0,0291(9)	0,0509(11)	0,0051(8)	0,0061(8)	0,0122(8)
Ag26	0,0485(11)	0,0345(9)	0,0491(11)	0,0001(8)	0,0091(9)	0,0167(8)

A.8. $[\text{Ag}_3(\text{C}\equiv\text{C}^t\text{Bu})_2]_4[\text{SiMo}_{12}\text{O}_{40}] \cdot 8$

Kristallzustand	nass
Summenformel	$\text{C}_{97}\text{H}_{146}\text{Ag}_{24}\text{Cl}_2\text{Mo}_{24}\text{O}_{80}\text{Si}_2$
Kristall	dunkelgrüne Kristalle (0,10 x 0,15 x 0,10 mm ³)
Kristallsystem, Raumgruppe	monoklin, C2/c (Nr. 15)
Gitterkonstanten/Å, °	$a = 21,732(3)$, $b = 18,896(3)$, $c = 23,320(3)$ $\beta = 103,026(2)$
Volumen/Å ³	8813(2)
Formeleinheiten	2
Röntgendichte/g cm ⁻³	2,868
Temperatur	100 K
$2\theta_{max}$	36,0 °
<i>hkl</i> -Bereich	$-18 \leq h \leq 18$, $-16 \leq k \leq 16$, $-20 \leq l \leq 20$
F(000)	7132
Absorptionskoeffizient μ/mm^{-1}	4,357
Zahl der gemessenen Reflexe	15688
davon symmetrieunabhängig	3042 ($R_{int} = 0,0772$)
Anzahl der Parameter	416
Restelektronendichte/e·Å ⁻³ (max/min)	3,02/-1,49
R_1 ($I > 2\sigma(I)$)	0,0595
wR_2 ($I > 2\sigma(I)$)	0,1587
R_1 (alle Daten)	0,0898
wR_2 (alle Daten)	0,1900
Datenbank	-
freies Volumen	8,0 %
freies Volumen mit Lösungsmittel	2,5 %
Lösungsmittel pro Formeleinheit	1 DCM
Besonderheiten	

Tabelle A.17.: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsfaktoren (Å²) von **8**. U_{eq} ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U_{eq}
Mo1	0,82763(13)	0,19586(16)	0,21588(12)	0,0447(10)
Mo2	0,90427(14)	0,05102(16)	0,16007(12)	0,0491(10)
Mo3	0,89626(13)	0,32885(16)	0,16687(12)	0,0406(9)
Mo4	0,92665(13)	0,31369(16)	0,31816(12)	0,0419(9)
Mo5	0,93835(14)	0,06692(17)	0,32890(12)	0,0495(10)
Mo8	0,94665(13)	0,18499(15)	0,08683(11)	0,0383(9)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
Si1	1,0000	0,1898(6)	0,2500	0,033(3)
O1	0,9740(9)	0,2468(10)	0,3747(8)	0,047(6)
O2	0,9355(8)	0,2396(9)	0,2413(7)	0,028(5)
O3	0,9140(9)	0,3742(10)	0,3629(8)	0,045(6)
O4	0,8174(9)	0,2718(10)	0,1653(8)	0,041(5)
O5	0,8534(9)	0,3891(11)	0,1136(8)	0,051(6)
O6	0,7478(10)	0,1777(11)	0,2052(9)	0,053(6)
O7	0,9818(9)	0,3454(11)	0,1767(8)	0,046(6)
O8	0,8475(8)	0,2676(11)	0,2875(8)	0,044(6)
O9	0,8984(9)	0,3684(10)	0,2398(8)	0,041(5)
O10	0,8984(9)	0,2497(10)	0,1081(8)	0,040(5)
O11	0,8763(9)	0,1306(10)	0,2879(8)	0,044(6)
O12	0,9823(8)	0,1405(11)	0,1886(8)	0,039(6)
O13	0,8441(10)	-0,0087(11)	0,1212(9)	0,055(6)
O14	0,9803(9)	0,1123(10)	0,4032(9)	0,045(6)
O15	0,8941(9)	0,0042(12)	0,3463(9)	0,062(7)
O16	0,8927(9)	0,1068(11)	0,0820(8)	0,046(6)
O17	0,9233(10)	0,0331(11)	0,2414(8)	0,050(6)
O18	0,9279(9)	0,2016(11)	0,0090(8)	0,046(6)
O19	0,8453(9)	0,1294(11)	0,1698(8)	0,049(6)
O20	0,9766(10)	0,0115(11)	0,1531(9)	0,056(6)
Ag1	0,26210(12)	0,59457(14)	1,01016(11)	0,0497(8)
Ag2	0,30337(14)	0,59087(17)	0,90276(13)	0,0729(10)
Ag3	0,18551(12)	0,76026(16)	1,08980(11)	0,0615(10)
Ag4	0,2500	0,7500	1,0000	0,0459(11)
Ag5	0,5000	0,5000	1,0000	0,0491(11)
Ag6	0,37766(12)	0,48817(15)	1,01703(12)	0,0577(9)
Ag7	0,43964(14)	0,61886(16)	0,90669(13)	0,0691(10)
C1	0,1980(16)	0,6763(17)	1,0334(14)	0,046(9)
C2	0,1699(16)	0,6266(17)	1,0427(14)	0,048(9)
C3	0,1287(18)	0,5740(19)	1,0550(16)	0,065(11)
C4	0,078(2)	0,604(3)	1,072(2)	0,132(18)
C5	0,168(2)	0,526(2)	1,105(2)	0,112(15)
C6	0,094(2)	0,530(2)	0,995(2)	0,112(16)
C7	0,278(2)	0,510(2)	0,9562(19)	0,082(12)
C8	0,2537(19)	0,474(2)	0,9115(19)	0,079(12)
C9	0,221(2)	0,432(2)	0,855(2)	0,091(13)
C10	0,210(2)	0,468(2)	0,7935(19)	0,105(15)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
C11	0,268(2)	0,368(2)	0,861(2)	0,125(17)
C12	0,156(2)	0,400(2)	0,8607(19)	0,096(14)
C13	0,1576(18)	0,8321(18)	1,1451(18)	0,066(11)
C14	0,3471(18)	0,6667(19)	0,8074(18)	0,067(11)
C15	0,3479(19)	0,662(2)	0,7447(18)	0,070(11)
C16	0,291(3)	0,605(3)	0,705(2)	0,15(2)
C17	0,4103(19)	0,643(2)	0,7437(18)	0,083(12)
C18	0,318(3)	0,717(4)	0,712(3)	0,19(3)
C19	0,5421(15)	0,5852(17)	0,9719(14)	0,045(9)
C20	0,5590(14)	0,6444(16)	0,9628(13)	0,035(8)
C21	0,5890(16)	0,7137(17)	0,9598(15)	0,054(10)
C22	0,5427(19)	0,756(2)	0,9004(17)	0,084(12)
C23	0,6559(17)	0,7015(18)	0,9584(16)	0,071(11)
C24	0,5935(18)	0,7602(19)	1,0135(16)	0,074(11)
C100	0,5000	0,953(4)	0,7500	0,03(2)
Cl1	0,4808(12)	0,9442(19)	0,7978(13)	0,149(12)

Tabelle A.18.: Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für **6**.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Mo1	0,0190(19)	0,080(3)	0,0283(18)	0,0039(16)	0,0024(14)	-0,0029(15)
Mo2	0,036(2)	0,068(2)	0,0299(19)	-0,0028(16)	-0,0023(15)	-0,0087(17)
Mo3	0,0271(19)	0,067(2)	0,0208(17)	0,0046(15)	0,0016(15)	0,0062(15)
Mo4	0,0261(19)	0,073(2)	0,0217(17)	0,0003(15)	0,0036(14)	0,0080(15)
Mo5	0,033(2)	0,074(2)	0,0296(18)	0,0102(16)	-0,0009(15)	-0,0095(17)
Mo8	0,0236(18)	0,067(2)	0,0178(17)	-0,0034(14)	0,0011(14)	-0,0031(15)
Si1	0,023(8)	0,053(9)	0,013(8)	0,000	-0,002(6)	0,000
O1	0,040(13)	0,060(15)	0,026(12)	-0,002(11)	-0,002(10)	-0,004(11)
O2	0,009(11)	0,045(13)	0,022(11)	-0,011(9)	-0,003(9)	-0,006(9)
O3	0,032(13)	0,075(16)	0,016(11)	-0,012(11)	-0,003(10)	0,031(11)
O4	0,020(12)	0,072(16)	0,026(12)	-0,007(11)	0,005(9)	0,000(11)
O5	0,037(13)	0,095(18)	0,015(11)	0,014(11)	0,005(10)	0,029(12)
O6	0,039(15)	0,088(18)	0,030(13)	0,004(11)	0,012(11)	-0,013(12)
O7	0,042(14)	0,075(16)	0,019(12)	0,000(11)	0,008(10)	0,001(11)
O8	0,021(13)	0,076(16)	0,028(12)	0,006(11)	0,003(10)	0,011(11)
O9	0,034(13)	0,061(15)	0,024(12)	0,008(10)	0,007(10)	0,033(11)
O10	0,031(13)	0,069(15)	0,020(11)	0,006(10)	0,010(9)	0,006(11)
O11	0,025(13)	0,061(15)	0,033(12)	0,015(11)	-0,002(10)	-0,004(11)
O12	0,012(12)	0,079(16)	0,023(11)	0,015(11)	0,004(9)	0,012(10)

Weiter auf der nächsten Seite

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
O13	0,046(14)	0,073(16)	0,037(13)	-0,006(12)	0,006(11)	-0,020(12)
O14	0,027(13)	0,054(15)	0,041(13)	0,008(11)	0,000(10)	-0,003(10)
O15	0,036(14)	0,078(17)	0,042(14)	0,038(12)	-0,015(11)	-0,015(12)
O16	0,027(13)	0,088(17)	0,015(11)	0,011(11)	-0,002(10)	0,012(11)
O17	0,055(15)	0,061(15)	0,013(11)	0,023(10)	-0,011(10)	-0,016(11)
O18	0,030(13)	0,082(17)	0,018(12)	0,000(11)	0,000(10)	0,002(11)
O19	0,028(13)	0,073(16)	0,030(12)	0,019(11)	-0,006(10)	-0,011(11)
O20	0,063(16)	0,051(15)	0,044(14)	-0,011(11)	0,013(12)	0,005(12)
Ag1	0,0346(17)	0,067(2)	0,0451(17)	0,0023(14)	0,0126(14)	0,0022(13)
Ag2	0,062(2)	0,099(3)	0,056(2)	0,0048(17)	0,0219(17)	-0,0115(18)
Ag3	0,0344(18)	0,110(3)	0,0321(16)	-0,0115(15)	0,0044(13)	0,0133(16)
Ag4	0,042(2)	0,061(3)	0,032(2)	-0,0023(18)	0,0127(18)	-0,0028(19)
Ag5	0,035(2)	0,076(3)	0,035(2)	0,005(2)	0,0117(18)	0,011(2)
Ag6	0,0362(17)	0,089(2)	0,0487(18)	0,0007(15)	0,0171(14)	0,0083(15)
Ag7	0,058(2)	0,081(2)	0,0522(19)	0,0018(16)	0,0041(16)	0,0098(16)
Cl1	0,063(17)	0,24(4)	0,13(2)	0,07(2)	0,019(16)	-0,003(18)

A.9. $[\text{Ag}_5(\text{bipy})_4(\text{C}\equiv\text{C}^t\text{Bu})_2](\text{PW}_{12}\text{O}_{40})$ 9

Kristallzustand	nass	trocken
Summenformel	C₅₂H₅₀Ag₅N₈O₄₀PW₁₂	C₅₂H₅₀Ag₅N₈O₄₀PW₁₂
Kristall	farblose Nadeln (1,0 x 0,03 x 0,01 mm ³)	farblose Nadeln (0,01 x 0,05 x 0,10 mm ³)
Kristallsystem, Raumgruppe	monokin, P2 ₁ /n (Nr. 14)	monokin, P2 ₁ /n (Nr. 14)
Gitterkonstanten/Å, °	<i>a</i> = 13,712(2), <i>b</i> = 19,777(2), <i>c</i> = 15,242(2), <i>β</i> = 110,943(1)	<i>a</i> = 13,694(1), <i>b</i> = 19,824(2), <i>c</i> = 15,273(2), <i>β</i> = 110,967(1)
Volumen/Å ³	3860(1)	3872(1)
Formeleinheiten	2	2
Röntgendichte/g cm ⁻³	3,616	3,606
Temperatur	100 K	100K
2 θ_{max}	43,76 °	52,98 °
<i>hkl</i> -Bereich	-14 ≤ <i>h</i> ≤ 14, -20 ≤ <i>k</i> ≤ 20, -15 ≤ <i>l</i> ≤ 15	-17 ≤ <i>h</i> ≤ 17, -24 ≤ <i>k</i> ≤ 24, -18 ≤ <i>l</i> ≤ 19
F(000)	3752	3752
Absorptionskoeffizient μ /mm ⁻¹	19,143	19,087
Zahl der gemessenen Reflexe	20909	26705
davon symmetrieunabhängig	4606 (<i>R_{int}</i> = 0,0844)	7989 (<i>R_{int}</i> = 0,0760)
Anzahl der Parameter	406	406
Restelektronendichte/e·Å ⁻³ (max/min)	1,74/-1,91	2,35/-2,52
<i>R</i> ₁ (<i>I</i> > 2 σ (<i>I</i>))	0,0829	0,0954
<i>wR</i> ₂ (<i>I</i> > 2 σ (<i>I</i>))	0,1680	0,2016
<i>R</i> ₁ (alle Daten)	0,0962	0,1180
<i>wR</i> ₂ (alle Daten)	0,1723	0,2095
Datenbank	CCDC 771101	
freies Volumen	1,6 %	1,7 %
freies Volumen mit Lösungsmittel	-	-
Lösungsmittel pro Formeleinheit	-	-
Besonderheiten	Polyoxometallat fehlgeordnet	Polyoxometallat fehlgeordnet

A. Kristallographische Daten

Tabelle A.19.: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsfaktoren (\AA^2) von **9** in „nasser“ Form. U_{eq} ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U_{eq}
W1	0,07826(13)	0,11689(9)	0,85994(12)	0,0203(4)
W2	0,01111(12)	-0,05181(9)	0,78131(11)	0,0206(4)
W3	-0,19138(13)	0,12017(9)	1,00569(11)	0,0198(4)
W4	0,26536(12)	0,04860(9)	1,06742(11)	0,0183(4)
W5	0,07699(12)	0,16693(8)	1,08397(11)	0,0186(4)
W6	-0,18686(13)	0,06273(8)	0,78637(11)	0,0196(4)
P1	0,0000	0,0000	1,0000	0,023(4)
O1	0,110(2)	0,2439(14)	1,1229(16)	0,028(8)
O2	0,015(2)	-0,0782(16)	0,6779(18)	0,031(8)
O3	-0,274(2)	0,0931(14)	0,6866(18)	0,029(7)
O4	0,389(2)	0,0773(16)	1,0995(19)	0,034(8)
O5	0,113(2)	0,1696(15)	0,793(2)	0,036(8)
O6	0,073(3)	0,1740(17)	0,9553(19)	0,048(10)
O7	-0,067(2)	0,1186(15)	0,801(3)	0,058(11)
O8	0,206(3)	0,1224(17)	1,1119(19)	0,051(10)
O9	-0,280(2)	0,1743(14)	1,010(2)	0,030(7)
O10	-0,262(3)	-0,0013(15)	0,823(2)	0,047(9)
O11	-0,073(3)	0,1748(18)	1,0335(18)	0,047(10)
O12	0,207(3)	0,0828(17)	0,945(2)	0,053(11)
O13	-0,062(2)	-0,124(2)	0,812(2)	0,057(11)
O14	-0,209(3)	0,1203(14)	0,878(2)	0,047(10)
O15	0,270(3)	-0,0388(15)	1,018(2)	0,057(11)
O16	-0,120(2)	-0,0036(17)	0,745(3)	0,064(12)
O17	0,135(2)	-0,0911(17)	0,867(2)	0,049(9)
O18	0,078(2)	0,0312(19)	0,800(3)	0,071(13)
O19	-0,117(3)	0,023(2)	0,952(4)	0,013(12)
O20	0,072(4)	0,056(2)	1,000(4)	0,018(13)
O21	-0,017(4)	0,026(2)	0,900(4)	0,015(12)
O22	-0,023(4)	0,063(3)	1,059(5)	0,034(17)
Ag1	1,1454(2)	0,08086(16)	0,6356(2)	0,0223(8)
Ag2	0,8111(2)	0,06776(15)	0,5261(2)	0,0197(7)
Ag3	1,0000	0,0000	0,5000	0,0207(10)
N1	1,298(3)	0,1429(17)	0,714(2)	0,025(8)
N2	1,275(2)	0,0075(16)	0,710(2)	0,022(8)
N3	0,723(2)	-0,0299(15)	0,503(2)	0,013(7)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
N4	0,635(3)	0,0920(17)	0,453(2)	0,025(8)
C1	1,313(3)	0,2063(18)	0,698(2)	0,010(8)
C2	1,409(3)	0,235(2)	0,735(3)	0,033(11)
C3	1,490(4)	0,200(2)	0,786(3)	0,040(13)
C4	1,472(3)	0,133(2)	0,806(3)	0,021(10)
C5	1,373(3)	0,1081(19)	0,768(2)	0,014(9)
C6	1,350(3)	0,0337(19)	0,785(3)	0,017(9)
C7	1,409(4)	-0,001(2)	0,866(3)	0,042(13)
C8	1,389(3)	-0,068(2)	0,876(3)	0,035(12)
C9	1,313(3)	-0,100(2)	0,799(3)	0,038(12)
C10	1,256(3)	-0,060(2)	0,722(3)	0,031(11)
C11	0,757(3)	-0,091(2)	0,537(3)	0,021(10)
C12	0,711(3)	-0,152(2)	0,518(3)	0,028(11)
C13	0,601(3)	-0,149(2)	0,467(3)	0,033(11)
C14	0,556(3)	-0,082(2)	0,432(3)	0,024(10)
C15	0,618(3)	-0,031(2)	0,452(3)	0,026(10)
C16	0,572(3)	0,043(2)	0,416(3)	0,020(9)
C17	0,474(3)	0,046(2)	0,354(3)	0,021(10)
C18	0,437(3)	0,112(2)	0,323(3)	0,024(10)
C19	0,498(3)	0,1691(19)	0,366(2)	0,014(9)
C20	0,596(3)	0,156(2)	0,425(3)	0,022(10)
C21	0,985(3)	0,0974(18)	0,553(2)	0,010(8)
C22	0,942(3)	0,1509(17)	0,552(2)	0,004(8)
C23	0,914(3)	0,222(2)	0,551(3)	0,020(9)
C24	0,847(3)	0,244(2)	0,455(3)	0,030(11)
C25	0,853(4)	0,235(2)	0,620(3)	0,038(12)
C26	1,014(3)	0,266(2)	0,594(3)	0,030(11)

Tabelle A.20.: Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für **9** in „nasser“ Form.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
W1	0,0199(10)	0,0218(10)	0,0233(10)	0,0043(8)	0,0128(8)	0,0008(8)
W2	0,0155(9)	0,0335(11)	0,0139(9)	-0,0077(8)	0,0065(7)	-0,0031(8)
W3	0,0180(9)	0,0222(10)	0,0216(10)	0,0034(8)	0,0099(8)	0,0053(8)
W4	0,0112(9)	0,0245(10)	0,0190(9)	-0,0027(8)	0,0051(7)	-0,0022(8)
W5	0,0175(9)	0,0175(9)	0,0169(9)	-0,0001(7)	0,0015(7)	-0,0026(8)
W6	0,0178(9)	0,0202(10)	0,0142(9)	0,0001(7)	-0,0025(7)	0,0017(8)
P1	0,021(9)	0,025(9)	0,022(9)	-0,001(7)	0,006(7)	-0,007(8)
O1	0,032(17)	0,038(18)	0,000(13)	-0,001(12)	-0,012(12)	0,032(15)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
O2	0,019(15)	0,06(2)	0,020(16)	-0,005(15)	0,013(13)	-0,012(15)
O3	0,047(19)	0,029(17)	0,018(16)	0,015(13)	0,021(14)	0,018(15)
O4	0,022(16)	0,06(2)	0,024(17)	-0,022(15)	0,012(14)	-0,020(15)
O5	0,019(16)	0,028(18)	0,06(2)	0,008(16)	0,018(16)	0,013(14)
O6	0,06(2)	0,06(2)	0,017(17)	-0,012(16)	0,007(16)	0,039(19)
O7	0,013(17)	0,022(18)	0,12(3)	-0,03(2)	0,005(19)	-0,007(14)
O8	0,08(3)	0,06(2)	0,014(16)	0,028(16)	0,009(16)	0,05(2)
O9	0,034(18)	0,026(17)	0,039(19)	0,005(14)	0,024(15)	-0,003(14)
O10	0,08(3)	0,028(19)	0,037(19)	-0,020(16)	0,033(19)	0,015(18)
O11	0,06(2)	0,07(2)	0,000(15)	0,023(15)	0,002(15)	-0,01(2)
O12	0,06(2)	0,06(2)	0,027(18)	0,006(17)	0,000(16)	0,06(2)
O13	0,014(16)	0,10(3)	0,04(2)	0,05(2)	-0,004(15)	-0,020(18)
O14	0,08(3)	0,016(17)	0,05(2)	-0,029(16)	0,022(19)	-0,043(18)
O15	0,14(4)	0,028(19)	0,024(18)	-0,003(15)	0,05(2)	-0,02(2)
O16	0,004(15)	0,04(2)	0,13(3)	-0,02(2)	0,003(19)	-0,025(15)
O17	0,04(2)	0,05(2)	0,05(2)	0,026(18)	0,012(17)	-0,021(18)
O18	0,012(17)	0,06(3)	0,13(4)	-0,04(2)	0,02(2)	-0,010(17)
O19	0,00(2)	0,00(3)	0,04(3)	-0,02(2)	0,01(2)	0,00(2)
O20	0,01(3)	0,00(3)	0,05(4)	0,00(2)	0,02(3)	0,01(2)
O21	0,01(3)	0,00(3)	0,03(3)	0,01(2)	0,00(2)	-0,02(2)
O22	0,03(3)	0,01(3)	0,10(5)	0,02(3)	0,06(4)	0,02(3)
Ag1	0,0143(16)	0,0308(19)	0,0202(17)	-0,0026(14)	0,0040(14)	-0,0014(14)
Ag2	0,0137(16)	0,0210(18)	0,0230(17)	-0,0033(14)	0,0049(13)	-0,0021(14)
Ag3	0,015(2)	0,021(3)	0,028(3)	-0,009(2)	0,010(2)	-0,004(2)

Tabelle A.21.: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsfaktoren (\AA^2) von **9** in „trockener“ Form. U_{eq} ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U_{eq}
W1	0,07899(10)	0,11698(7)	0,86055(9)	0,0201(3)
W2	0,01140(10)	-0,05141(7)	0,78126(9)	0,0209(3)
W3	-0,19190(10)	0,11995(7)	1,00583(9)	0,0196(3)
W4	0,26613(9)	0,04862(7)	1,06800(9)	0,0176(3)
W5	0,07713(10)	0,16668(6)	1,08459(9)	0,0179(3)
W6	-0,18699(10)	0,06326(6)	0,78664(9)	0,0195(3)
P1	0,0000	0,0000	1,0000	0,016(2)
O1	0,1093(18)	0,2454(12)	1,1232(16)	0,031(6)
O2	0,015(2)	-0,0774(14)	0,6764(16)	0,034(6)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
O3	-0,275(2)	0,0918(12)	0,6866(16)	0,031(6)
O4	0,3900(17)	0,0736(14)	1,1011(15)	0,031(6)
O5	0,1168(19)	0,1717(14)	0,795(2)	0,039(7)
O6	0,074(2)	0,174(2)	0,955(2)	0,068(11)
O7	-0,0665(19)	0,1184(14)	0,804(3)	0,060(11)
O8	0,209(2)	0,1239(16)	1,1137(18)	0,048(8)
O9	-0,2834(19)	0,1756(12)	1,0095(18)	0,029(6)
O10	-0,265(3)	-0,0021(13)	0,822(2)	0,052(9)
O11	-0,0734(18)	0,1759(16)	1,0335(17)	0,042(8)
O12	0,209(2)	0,0849(16)	0,9450(18)	0,051(9)
O13	-0,0612(17)	-0,1236(18)	0,809(2)	0,059(11)
O14	-0,209(3)	0,1209(11)	0,877(2)	0,050(9)
O15	0,274(3)	-0,0398(13)	1,018(2)	0,062(11)
O16	-0,1197(19)	-0,0061(14)	0,743(3)	0,058(10)
O17	0,1354(19)	-0,0919(17)	0,8666(19)	0,051(9)
O18	0,078(2)	0,0335(14)	0,794(3)	0,066(12)
O19	-0,115(3)	0,024(2)	0,950(3)	0,015(9)
O20	0,067(3)	0,059(2)	0,999(3)	0,027(12)
O21	-0,014(3)	0,0233(19)	0,900(3)	0,019(10)
O22	-0,020(3)	0,063(2)	1,059(4)	0,030(12)
Ag1	1,14586(18)	0,08121(13)	0,63526(17)	0,0219(5)
Ag2	0,81069(18)	0,06774(12)	0,52633(17)	0,0200(5)
Ag3	1,0000	0,0000	0,5000	0,0208(7)
N1	1,297(2)	0,1429(13)	0,7146(18)	0,020(6)
N2	1,275(2)	0,0066(14)	0,7129(19)	0,024(6)
N3	0,7219(18)	-0,0307(12)	0,5022(16)	0,012(5)
N4	0,636(2)	0,0923(14)	0,4519(19)	0,024(6)
C1	1,315(3)	0,2082(18)	0,699(2)	0,029(8)
C2	1,414(3)	0,2372(19)	0,738(2)	0,029(8)
C3	1,492(3)	0,2022(17)	0,791(2)	0,025(7)
C4	1,474(3)	0,1315(19)	0,810(3)	0,032(8)
C5	1,373(2)	0,1059(15)	0,769(2)	0,016(6)
C6	1,352(3)	0,0346(17)	0,784(2)	0,024(7)
C7	1,405(3)	-0,002(2)	0,866(3)	0,034(9)
C8	1,388(3)	-0,0681(18)	0,873(3)	0,030(8)
C9	1,312(3)	-0,1004(19)	0,799(3)	0,031(8)
C10	1,255(2)	-0,0600(15)	0,722(2)	0,016(6)
C11	0,761(3)	-0,0920(16)	0,536(2)	0,022(7)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
C12	0,709(3)	-0,152(2)	0,516(3)	0,033(9)
C13	0,602(3)	-0,1481(17)	0,466(2)	0,022(7)
C14	0,557(3)	-0,0847(18)	0,431(2)	0,028(8)
C15	0,617(2)	-0,0296(17)	0,453(2)	0,022(7)
C16	0,573(3)	0,0425(19)	0,417(3)	0,030(8)
C17	0,473(3)	0,0475(18)	0,353(2)	0,025(7)
C18	0,437(3)	0,1121(19)	0,324(3)	0,031(8)
C19	0,498(2)	0,1682(17)	0,366(2)	0,022(7)
C20	0,595(3)	0,1566(17)	0,427(2)	0,024(7)
C21	0,983(2)	0,0962(14)	0,5523(19)	0,012(6)
C22	0,943(2)	0,1517(15)	0,552(2)	0,014(6)
C23	0,916(2)	0,2206(15)	0,551(2)	0,016(6)
C24	0,847(3)	0,2480(18)	0,450(2)	0,027(8)
C25	0,854(3)	0,2321(18)	0,617(2)	0,029(8)
C26	1,017(3)	0,2634(19)	0,590(3)	0,032(8)

Tabelle A.22.: Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für **9** in „trockener“ Form.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
W1	0,0216(7)	0,0189(7)	0,0243(7)	0,0024(5)	0,0138(6)	-0,0005(5)
W2	0,0177(6)	0,0320(8)	0,0141(6)	-0,0069(5)	0,0071(5)	-0,0028(6)
W3	0,0203(6)	0,0209(7)	0,0213(7)	0,0039(5)	0,0118(5)	0,0059(5)
W4	0,0137(6)	0,0223(7)	0,0174(6)	-0,0029(5)	0,0061(5)	-0,0021(5)
W5	0,0196(6)	0,0154(6)	0,0159(6)	-0,0001(5)	0,0028(5)	-0,0024(5)
W6	0,0201(6)	0,0184(6)	0,0137(6)	-0,0006(5)	-0,0014(5)	0,0016(5)
P1	0,015(5)	0,016(6)	0,016(5)	-0,005(4)	0,005(4)	-0,004(4)
O1	0,028(13)	0,022(12)	0,023(12)	0,005(10)	-0,018(10)	0,018(10)
O2	0,041(15)	0,049(17)	0,018(12)	-0,011(11)	0,015(11)	-0,023(13)
O3	0,042(15)	0,030(14)	0,023(13)	0,012(11)	0,015(11)	0,006(12)
O4	0,024(12)	0,065(18)	0,013(11)	-0,024(11)	0,017(10)	-0,022(12)
O5	0,026(13)	0,049(17)	0,046(17)	0,006(14)	0,016(12)	0,012(12)
O6	0,050(19)	0,10(3)	0,031(17)	-0,013(18)	-0,011(15)	0,039(19)
O7	0,017(13)	0,030(16)	0,13(3)	-0,042(18)	0,020(16)	-0,015(12)
O8	0,059(19)	0,06(2)	0,023(14)	0,003(13)	0,012(13)	0,034(16)
O9	0,036(14)	0,019(12)	0,054(17)	0,006(11)	0,040(13)	0,005(10)
O10	0,11(3)	0,022(14)	0,048(18)	-0,010(13)	0,062(19)	-0,008(16)
O11	0,017(12)	0,09(2)	0,019(13)	0,020(14)	0,001(10)	-0,007(13)
O12	0,047(17)	0,07(2)	0,020(14)	0,003(14)	-0,003(12)	0,041(16)
O13	0,002(11)	0,10(3)	0,06(2)	0,060(19)	-0,003(11)	-0,012(13)

Weiter auf der nächsten Seite

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
O14	0,12(3)	0,000(10)	0,050(17)	-0,008(11)	0,061(19)	-0,030(14)
O15	0,15(3)	0,017(14)	0,041(17)	-0,013(12)	0,06(2)	-0,019(17)
O16	0,016(13)	0,030(16)	0,12(3)	-0,035(17)	0,016(16)	-0,006(11)
O17	0,023(13)	0,08(2)	0,043(17)	0,052(16)	0,008(12)	0,004(14)
O18	0,023(14)	0,036(17)	0,12(3)	-0,048(19)	0,006(16)	0,020(12)
O19	0,000(17)	0,03(2)	0,03(2)	-0,012(19)	0,024(17)	-0,001(16)
O20	0,02(2)	0,01(2)	0,03(2)	0,019(19)	-0,01(2)	-0,007(19)
O21	0,02(2)	0,001(18)	0,02(2)	0,002(16)	-0,013(17)	0,023(16)
O22	0,02(2)	0,03(3)	0,05(3)	0,03(2)	0,04(2)	0,01(2)
Ag1	0,0159(11)	0,0287(14)	0,0196(12)	-0,0013(10)	0,0046(9)	0,0001(10)
Ag2	0,0166(11)	0,0219(13)	0,0212(12)	-0,0039(10)	0,0064(9)	-0,0028(9)
Ag3	0,0183(16)	0,0206(17)	0,0251(18)	-0,0106(14)	0,0096(14)	-0,0027(13)

A.10. $[\text{Ag}_5(\text{bipy})_4(\text{C}\equiv\text{C}^t\text{Bu})_2][\text{PMo}_{12}\text{O}_{40}] \mathbf{10}$

Kristallzustand	nass
Summenformel	$\text{C}_{52}\text{H}_{50}\text{Ag}_5\text{Mo}_{12}\text{N}_8\text{O}_{40}\text{P}$
Kristall	farblose Nadeln (0,12 x 0,02 x 0,01 mm ³)
Kristallsystem, Raumgruppe	monoklin, $P2_1/n$ (Nr. 14)
Gitterkonstanten/Å, °	$a = 13,660(2)$, $b = 19,730(3)$, $c = 15,135(2)$, $\beta = 110,454(2)$
Volumen/Å ³	3822(1)
Formeleinheiten	2
Röntgendichte/g cm ⁻³	2,736
Temperatur	100 K
$2\theta_{max}$	42,02 °
hkl -Bereich	$-13 \leq h \leq 13$, $-19 \leq k \leq 19$, $-15 \leq l \leq 15$
F(000)	2984
Absorptionskoeffizient μ/mm^{-1}	3,260
Zahl der gemessenen Reflexe	19113
davon symmetrieunabhängig	4098 ($R_{int} = 0,0700$)
Anzahl der Parameter	406
Restelektronendichte/e·Å ⁻³ (max/min)	0,76/-0,74
R_1 ($I > 2\sigma(I)$)	0,0617
wR_2 ($I > 2\sigma(I)$)	0,1253
R_1 (alle Daten)	0,0718
wR_2 (alle Daten)	0,1289
Datenbank	CCDC 771100
freies Volumen	1,0 %
freies Volumen mit Lösungsmittel	-
Lösungsmittel pro Formeleinheit	-
Besonderheiten	Polyoxometallat fehlgeordnet

Tabelle A.23.: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsfaktoren (Å²) von **10**. U_{eq} ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U_{eq}
Mo1	0,18716(13)	-0,12433(9)	0,99625(12)	0,0247(4)
Mo2	0,02072(12)	-0,04784(9)	0,78229(11)	0,0252(4)
Mo3	0,26399(12)	0,04689(8)	1,05371(11)	0,0200(4)
Mo4	0,06723(12)	0,12348(8)	0,85943(11)	0,0217(4)
Mo5	-0,19143(13)	0,05614(8)	0,78484(11)	0,0247(4)
Mo6	0,08506(12)	0,16325(8)	1,09455(11)	0,0212(4)
P1	0,0000	0,0000	1,0000	0,0169(16)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
O1	-0,2790(10)	0,0858(6)	0,6869(9)	0,033(3)
O2	0,0216(9)	-0,0723(7)	0,6769(9)	0,035(4)
O3	0,2106(14)	-0,1208(6)	1,1212(10)	0,057(5)
O4	0,1036(10)	0,1781(7)	0,7938(10)	0,041(4)
O5	0,2751(9)	-0,1789(6)	0,9893(9)	0,032(3)
O6	0,0685(10)	0,1740(8)	0,9594(9)	0,046(4)
O7	0,0679(11)	-0,1754(9)	0,9620(10)	0,065(5)
O8	-0,2663(14)	-0,0051(7)	0,8253(10)	0,059(5)
O9	-0,0723(10)	0,1195(7)	0,8034(13)	0,064(5)
O10	-0,1202(11)	-0,0057(7)	0,7422(13)	0,065(5)
O11	0,2038(11)	0,0876(8)	0,9410(9)	0,050(4)
O12	0,2084(11)	0,1230(7)	1,1101(9)	0,046(4)
O13	0,0630(10)	0,1238(9)	1,1930(11)	0,069(6)
O14	0,3871(10)	0,0715(8)	1,0853(9)	0,044(4)
O15	0,1178(11)	0,2412(6)	1,1314(9)	0,039(4)
O16	0,2673(15)	-0,0394(7)	1,0120(10)	0,065(5)
O17	0,0743(10)	0,0360(7)	0,7931(13)	0,064(5)
O18	0,1335(11)	-0,0891(10)	0,8634(10)	0,076(6)
O19	-0,1165(15)	0,0209(11)	0,9527(13)	0,009(5)
O20	-0,0155(17)	0,0256(10)	0,8984(15)	0,016(6)
O21	0,0702(17)	0,0572(12)	1,0003(14)	0,019(6)
O22	-0,0194(15)	0,0619(11)	1,0574(16)	0,018(6)
Ag1	1,14549(11)	0,07977(7)	0,63595(10)	0,0255(4)
Ag2	1,0000	0,0000	0,5000	0,0226(5)
Ag3	0,81249(10)	0,06604(7)	0,53018(10)	0,0225(4)
N1	0,6366(11)	0,0911(7)	0,4565(10)	0,023(4)
N2	0,7241(11)	-0,0327(7)	0,5075(10)	0,022(4)
N3	1,2754(11)	0,0041(7)	0,7142(10)	0,023(4)
N4	1,2943(11)	0,1418(7)	0,7134(10)	0,021(4)
C1	0,5949(14)	0,1519(10)	0,4281(13)	0,029(5)
C2	0,4987(14)	0,1631(10)	0,3617(12)	0,026(5)
C3	0,4421(15)	0,1097(10)	0,3184(14)	0,032(5)
C4	0,4797(14)	0,0440(10)	0,3488(12)	0,027(5)
C5	0,5788(14)	0,0377(9)	0,4180(12)	0,024(5)
C6	0,6206(13)	-0,0307(9)	0,4538(12)	0,018(4)
C7	0,5609(15)	-0,0880(9)	0,4366(13)	0,029(5)
C8	0,6046(15)	-0,1508(10)	0,4718(13)	0,032(5)
C9	0,7077(15)	-0,1537(10)	0,5247(13)	0,031(5)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
C10	0,7631(15)	-0,0943(9)	0,5421(13)	0,027(5)
C11	0,9835(14)	0,0968(9)	0,5537(12)	0,022(5)
C12	0,9388(13)	0,1513(9)	0,5501(12)	0,018(4)
C13	0,9082(14)	0,2234(9)	0,5510(13)	0,024(5)
C14	0,8505(15)	0,2327(10)	0,6171(14)	0,036(5)
C15	0,8439(16)	0,2423(11)	0,4505(14)	0,043(6)
C16	1,0099(15)	0,2645(11)	0,5845(15)	0,041(6)
C17	1,2604(15)	-0,0641(10)	0,7202(14)	0,034(5)
C18	1,3152(14)	-0,1006(10)	0,7987(13)	0,031(5)
C19	1,3878(16)	-0,0701(10)	0,8734(15)	0,038(5)
C20	1,4068(16)	-0,0022(10)	0,8664(14)	0,037(5)
C21	1,3515(14)	0,0339(9)	0,7847(12)	0,023(5)
C22	1,3736(15)	0,1058(10)	0,7692(13)	0,029(5)
C23	1,4722(15)	0,1320(10)	0,8070(13)	0,031(5)
C24	1,4900(16)	0,1981(10)	0,7883(13)	0,033(5)
C25	1,4092(14)	0,2370(10)	0,7326(13)	0,029(5)
C26	1,3133(14)	0,2081(9)	0,6976(12)	0,024(5)

Tabelle A.24.: Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 10.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Mo1	0,0261(10)	0,0263(10)	0,0281(10)	0,0063(8)	0,0173(8)	0,0093(8)
Mo2	0,0167(9)	0,0426(12)	0,0184(9)	-0,0075(8)	0,0088(7)	-0,0019(9)
Mo3	0,0173(9)	0,0239(10)	0,0215(9)	-0,0028(8)	0,0101(7)	-0,0032(8)
Mo4	0,0212(10)	0,0199(9)	0,0288(10)	0,0008(8)	0,0147(8)	-0,0002(8)
Mo5	0,0259(10)	0,0227(10)	0,0199(10)	-0,0010(8)	0,0008(8)	0,0039(8)
Mo6	0,0212(10)	0,0189(10)	0,0219(10)	0,0003(7)	0,0054(8)	-0,0037(8)
P1	0,023(4)	0,014(4)	0,017(4)	-0,001(3)	0,013(3)	-0,002(3)
O1	0,033(8)	0,023(8)	0,033(8)	-0,007(6)	0,001(6)	-0,002(6)
O2	0,025(8)	0,057(10)	0,027(8)	-0,017(7)	0,013(6)	-0,018(7)
O3	0,131(15)	0,010(7)	0,054(10)	-0,009(7)	0,064(10)	-0,016(9)
O4	0,034(8)	0,044(9)	0,052(10)	0,029(7)	0,025(7)	0,015(7)
O5	0,030(8)	0,038(9)	0,035(8)	0,012(6)	0,020(6)	0,004(7)
O6	0,036(9)	0,075(11)	0,018(8)	-0,006(7)	0,000(6)	0,036(8)
O7	0,031(9)	0,127(16)	0,027(9)	0,046(9)	-0,004(7)	-0,015(10)
O8	0,146(16)	0,019(8)	0,047(10)	-0,003(7)	0,076(11)	0,000(9)
O9	0,019(8)	0,034(9)	0,141(16)	-0,051(10)	0,030(9)	-0,008(7)
O10	0,029(9)	0,027(9)	0,137(16)	-0,036(10)	0,027(9)	-0,011(7)
O11	0,052(10)	0,077(11)	0,016(8)	-0,006(7)	0,005(7)	0,044(9)

Weiter auf der nächsten Seite

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
O12	0,058(10)	0,049(10)	0,031(8)	0,016(7)	0,017(7)	0,042(8)
O13	0,009(8)	0,125(15)	0,058(11)	0,059(11)	-0,007(7)	-0,010(9)
O14	0,022(8)	0,086(12)	0,025(8)	-0,023(8)	0,010(6)	-0,009(8)
O15	0,048(9)	0,025(8)	0,034(8)	-0,005(7)	0,002(7)	0,001(7)
O16	0,156(17)	0,032(9)	0,035(9)	-0,009(7)	0,070(11)	-0,026(10)
O17	0,008(7)	0,041(10)	0,131(15)	-0,040(10)	0,009(8)	0,007(7)
O18	0,025(8)	0,161(18)	0,038(10)	0,060(11)	0,007(7)	-0,020(10)
O19	0,001(12)	0,021(13)	0,000(11)	-0,016(10)	-0,007(9)	-0,012(10)
O20	0,025(14)	0,004(12)	0,016(14)	-0,009(10)	0,004(11)	-0,003(11)
O21	0,019(14)	0,027(15)	0,002(12)	0,001(11)	-0,008(10)	-0,002(13)
O22	0,000(12)	0,015(14)	0,035(15)	0,006(11)	0,001(11)	-0,004(11)
Ag1	0,0196(8)	0,0326(9)	0,0246(9)	-0,0001(7)	0,0079(7)	0,0002(7)
Ag2	0,0207(11)	0,0219(12)	0,0265(12)	-0,0037(9)	0,0097(9)	-0,0007(10)
Ag3	0,0181(8)	0,0247(9)	0,0246(8)	-0,0041(7)	0,0075(6)	-0,0028(7)

A.11. $[\text{Ag}_8(\text{bipy})_6(\text{C}\equiv\text{C}^t\text{Bu})_4(\text{C}_3\text{H}_7\text{NO})_2][\text{SiW}_{12}\text{O}_{40}]$ 11

Kristallzustand	nass	trocken
Summenformel	$C_{102}H_{126}Ag_8N_{18}O_{46}SiW_{12}$	$C_{93}H_{104}Ag_8N_{15}O_{43}SiW_{12}$
Kristall	gelbe Plättchen (mm ³)	gelbe Plättchen (0,05 x 0,03 x 0,03 mm ³)
Kristallsystem, Raumgruppe	trikin, $P\bar{1}$ (Nr. 2)	trikin, $P1$ (Nr. 1)
Gitterkonstanten/Å, °	$a = 13,906(1)$, $b = 16,424(1)$, $c = 16,976(1)$, $\alpha = 73,944(1)$, $\beta = 68,502(1)$, $\gamma = 66,647(1)$	$a = 13,891(2)$, $b = 16,349(2)$, $c = 16,945(2)$, $\alpha = 73,992(2)$, $\beta = 68,509(2)$, $\gamma = 66,657(2)$
Volumen/Å ³	3272(0)	3249(1)
Formeleinheiten	1	1
Röntgengichte/g cm ⁻³	2,759	2,666
Temperatur	100 K	100K
$2\theta_{max}$	49,42 °	40,30 °
hkl -Bereich	$-16 \leq h \leq 16$, $-19 \leq k \leq 19$, $-19 \leq l \leq 19$	$-13 \leq h \leq 13$, $-15 \leq k \leq 15$, $-16 \leq l \leq 16$
F(000)	2510	2389
Absorptionskoeffizient μ/mm^{-1}	11,755	11,832
Zahl der gemessenen Reflexe	23604	14958
davon symmetrieunabhängig	11137 ($R_{int} = 0,0361$)	11943 ($R_{int} = 0,0368$)
Anzahl der Parameter	594	970
Restelektronendichte/e-Å ⁻³ (max/min)	2,28/-2,38	3,63/-1,46
R_1 ($I > 2\sigma(I)$)	0,0563	0,0648
wR_2 ($I > 2\sigma(I)$)	0,1322	0,1562
R_1 (alle Daten)	0,0718	0,0884
wR_2 (alle Daten)	0,1528	0,1895
Datenbank	CCDC 771103	
freies Volumen	16,6 %	16,3 %
freies Volumen mit Lösungsmittel	0 %	12,3 %
Lösungsmittel pro Formeleinheit	2 DMF	1 DMF
Besonderheiten		

A. Kristallographische Daten

Tabelle A.25.: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsfaktoren (\AA^2) von **11** in „nasser“ Form. U_{eq} ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U_{eq}
W1	0.23188(5)	0.65565(4)	0.04970(4)	0.02647(16)
W2	0.42032(6)	0.68673(4)	-0.15257(4)	0.03735(18)
W3	0.31032(5)	0.46739(4)	0.20199(4)	0.03004(16)
W6	0.27613(5)	0.43994(4)	0.01591(4)	0.03321(17)
W8	0.45734(6)	0.71731(4)	0.03020(5)	0.0430(2)
W9	0.53194(6)	0.53103(5)	0.18579(4)	0.0457(2)
Si1	0.5000	0.5000	0.0000	0.0164(10)
O1	0.1711(11)	0.4110(7)	0.0227(8)	0.053(3)
O2	0.2094(11)	0.5647(7)	0.0189(7)	0.052(3)
O3	0.1067(10)	0.7313(8)	0.0711(8)	0.057(4)
O4	0.5491(9)	0.5440(8)	0.2735(8)	0.050(3)
O5	0.2657(12)	0.4248(7)	0.1331(8)	0.056(3)
O6	0.2334(11)	0.5859(8)	0.1573(7)	0.053(3)
O7	0.4362(8)	0.8210(7)	0.0444(8)	0.044(3)
O8	0.2199(12)	0.4524(8)	0.2986(7)	0.069(4)
O9	0.3819(8)	0.7738(8)	-0.2255(7)	0.053(4)
O10	0.4519(13)	0.7417(13)	-0.0846(8)	0.090(6)
O11	0.4095(9)	0.5952(8)	-0.1905(12)	0.084(5)
O12	0.2852(15)	0.6929(12)	-0.0687(8)	0.097(7)
O13	0.3114(15)	0.7170(12)	0.0662(8)	0.092(6)
O14	0.3887(13)	0.3259(11)	0.0118(9)	0.116(8)
O15	0.3897(11)	0.5210(9)	0.2297(13)	0.093(6)
O16	0.5739(10)	0.6431(9)	-0.2046(13)	0.089(6)
O17	0.4701(12)	0.6503(11)	0.1381(10)	0.126(9)
O18	0.3295(13)	0.4658(10)	-0.1028(9)	0.113(8)
O19	0.4216(13)	0.6023(11)	-0.0130(12)	0.023(4)
O20	0.4787(14)	0.4629(11)	0.1045(12)	0.026(4)
O21	0.4550(16)	0.4430(12)	-0.0366(13)	0.031(5)
O22	0.3795(14)	0.5120(11)	0.0494(12)	0.023(4)
Ag1	0.18215(9)	0.95777(7)	0.37537(7)	0.0303(3)
Ag2	0.36508(9)	0.91933(7)	0.46454(7)	0.0312(3)
Ag3	-0.10110(9)	1.03974(7)	0.44470(7)	0.0275(3)
Ag4	0.03786(9)	1.01951(8)	0.25576(7)	0.0310(3)
N1	0.5271(10)	0.9403(9)	0.4004(7)	0.036(3)
N2	0.3325(10)	1.0692(8)	0.4590(8)	0.034(3)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
N3	0.3400(10)	0.9806(9)	0.2735(8)	0.034(3)
N4	0.1569(10)	1.1133(9)	0.3426(8)	0.035(3)
N5	0.1658(9)	1.0612(8)	0.1357(7)	0.026(3)
N6	-0.0336(9)	1.1721(8)	0.2143(8)	0.029(3)
N13	-0.1329(11)	1.0119(8)	0.0754(8)	0.036(3)
O100	-0.0437(9)	0.9780(8)	0.1748(7)	0.044(3)
C1	0.6229(14)	0.8746(12)	0.3761(11)	0.044(4)
C2	0.7225(15)	0.8919(13)	0.3343(11)	0.051(5)
C3	0.7213(15)	0.9749(12)	0.3226(11)	0.051(5)
C4	0.6226(14)	1.0464(12)	0.3468(11)	0.044(4)
C5	0.5271(13)	1.0248(11)	0.3869(10)	0.036(4)
C6	0.4196(12)	1.0972(10)	0.4103(9)	0.031(3)
C7	0.4104(13)	1.1854(11)	0.3831(10)	0.038(4)
C8	0.3062(14)	1.2498(12)	0.4077(11)	0.043(4)
C9	0.2208(14)	1.2242(11)	0.4595(11)	0.043(4)
C10	0.2370(12)	1.1326(9)	0.4821(9)	0.028(3)
C11	0.4323(14)	0.9145(12)	0.2467(11)	0.047(4)
C12	0.5308(16)	0.9289(13)	0.1980(12)	0.053(5)
C13	0.5337(15)	1.0134(12)	0.1789(11)	0.049(4)
C14	0.4396(13)	1.0827(12)	0.2015(10)	0.042(4)
C15	0.3418(13)	1.0647(11)	0.2497(10)	0.037(4)
C16	0.2365(12)	1.1390(10)	0.2787(9)	0.029(3)
C17	0.2212(13)	1.2291(10)	0.2398(10)	0.035(4)
C18	0.1235(14)	1.2907(12)	0.2689(11)	0.046(4)
C19	0.0389(14)	1.2671(11)	0.3339(11)	0.043(4)
C20	0.0611(12)	1.1777(10)	0.3677(10)	0.033(3)
C21	0.2663(12)	1.0084(10)	0.1017(9)	0.032(3)
C22	0.3483(12)	1.0365(10)	0.0413(9)	0.033(4)
C23	0.3260(13)	1.1270(10)	0.0173(10)	0.036(4)
C24	0.2224(12)	1.1861(10)	0.0485(9)	0.032(3)
C25	0.1429(11)	1.1514(9)	0.1085(9)	0.026(3)
C26	0.0302(11)	1.2097(9)	0.1465(8)	0.022(3)
C27	-0.0092(13)	1.2996(10)	0.1125(10)	0.035(4)
C28	-0.1140(14)	1.3526(13)	0.1511(11)	0.049(4)
C29	-0.1760(14)	1.3123(11)	0.2186(11)	0.043(4)
C30	-0.1367(13)	1.2249(11)	0.2502(10)	0.038(4)
C61	0.2351(11)	0.8550(9)	0.5038(9)	0.028(3)
C62	0.3150(12)	0.7881(10)	0.4995(10)	0.033(3)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
C63	0,3973(12)	0,6970(10)	0,5051(10)	0,034(4)
C64	0,4758(15)	0,6784(12)	0,4157(11)	0,051(5)
C65	0,3376(16)	0,6262(13)	0,5419(12)	0,059(5)
C66	0,4643(13)	0,6867(11)	0,5642(10)	0,040(4)
C73	0,0208(13)	0,9351(10)	0,3855(10)	0,036(4)
C74	0,0750(12)	0,8677(10)	0,3514(9)	0,032(3)
C75	0,1276(13)	0,7790(11)	0,3227(10)	0,038(4)
C76	0,0563(19)	0,7651(15)	0,2832(15)	0,074(6)
C77	0,1367(19)	0,7056(15)	0,4002(14)	0,075(6)
C78	0,237(2)	0,773(2)	0,2617(19)	0,118(10)
C85	-0,0949(14)	1,0321(12)	0,1263(11)	0,044(4)
C86	-0,1155(13)	0,9184(10)	0,0749(10)	0,035(4)
C87	-0,1876(14)	1,0804(11)	0,0156(11)	0,044(4)
O101	0,130(2)	0,540(2)	0,6875(19)	0,185(11)
C101	0,195(3)	0,465(2)	0,732(2)	0,117(10)
N102	0,162(2)	0,3976(17)	0,8016(16)	0,105(7)
C103	0,054(2)	0,430(2)	0,8498(19)	0,109(9)
C104	0,217(6)	0,287(5)	0,810(4)	0,34(4)
O105	0,191(4)	0,327(3)	0,629(3)	0,29(2)
N107	0,116(3)	0,454(2)	0,571(2)	0,153(11)
C108	0,018(4)	0,550(4)	0,563(3)	0,25(3)
C109	0,231(3)	0,445(2)	0,513(2)	0,136(12)
C106	0,062(7)	0,391(6)	0,647(5)	0,37(4)

Tabelle A.26.: Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für **11** in „nasser“ Form.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
W1	0,0187(3)	0,0225(3)	0,0343(3)	-0,0085(2)	-0,0013(3)	-0,0059(2)
W2	0,0495(4)	0,0229(3)	0,0405(4)	0,0092(3)	-0,0227(3)	-0,0134(3)
W3	0,0207(3)	0,0294(3)	0,0319(3)	-0,0050(3)	-0,0006(3)	-0,0064(3)
W6	0,0190(3)	0,0258(3)	0,0423(4)	0,0008(3)	-0,0031(3)	-0,0042(2)
W8	0,0549(5)	0,0170(3)	0,0435(4)	-0,0089(3)	0,0016(3)	-0,0100(3)
W9	0,0448(4)	0,0443(4)	0,0374(4)	-0,0199(3)	-0,0199(3)	0,0122(3)
Si1	0,019(3)	0,007(2)	0,019(3)	-0,0002(19)	-0,004(2)	-0,002(2)
O1	0,081(9)	0,035(7)	0,068(8)	0,011(6)	-0,049(8)	-0,032(6)
O2	0,095(10)	0,023(6)	0,051(7)	0,007(5)	-0,045(7)	-0,021(6)
O3	0,049(7)	0,056(8)	0,057(8)	-0,029(6)	-0,036(7)	0,023(6)
O4	0,030(6)	0,072(9)	0,057(8)	-0,027(7)	-0,011(6)	-0,015(6)
O5	0,098(10)	0,026(6)	0,057(8)	0,006(5)	-0,044(8)	-0,022(7)

Weiter auf der nächsten Seite

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
O6	0,096(10)	0,037(7)	0,049(7)	0,004(5)	-0,042(7)	-0,033(7)
O7	0,027(6)	0,046(7)	0,066(8)	-0,027(6)	-0,005(6)	-0,015(5)
O8	0,104(11)	0,039(7)	0,029(7)	-0,002(5)	0,022(7)	-0,028(7)
O9	0,021(6)	0,053(8)	0,051(7)	0,034(6)	-0,010(5)	-0,007(5)
O10	0,111(12)	0,187(17)	0,028(7)	-0,032(9)	0,015(7)	-0,127(13)
O11	0,024(7)	0,040(8)	0,188(18)	-0,049(9)	-0,037(9)	0,015(5)
O12	0,156(15)	0,171(17)	0,027(7)	-0,018(8)	0,011(8)	-0,151(15)
O13	0,143(15)	0,156(16)	0,036(8)	-0,008(8)	-0,013(9)	-0,127(14)
O14	0,073(10)	0,087(12)	0,052(9)	0,021(8)	0,021(8)	0,054(9)
O15	0,055(9)	0,041(8)	0,203(19)	-0,059(10)	-0,075(11)	0,027(7)
O16	0,039(8)	0,057(9)	0,189(18)	-0,051(10)	-0,056(10)	0,008(6)
O17	0,053(9)	0,100(12)	0,069(10)	0,047(9)	0,026(8)	0,051(8)
O18	0,091(12)	0,062(10)	0,054(9)	0,023(7)	0,037(8)	0,033(8)
O19	0,010(9)	0,013(10)	0,039(11)	-0,002(8)	-0,009(8)	0,004(7)
O20	0,011(9)	0,015(9)	0,029(11)	0,002(8)	0,007(8)	0,003(7)
O21	0,032(11)	0,017(10)	0,045(12)	-0,017(9)	0,002(10)	-0,013(9)
O22	0,014(9)	0,018(10)	0,032(11)	-0,004(8)	0,004(8)	-0,008(8)
Ag1	0,0300(6)	0,0284(6)	0,0300(6)	-0,0016(5)	-0,0061(5)	-0,0115(5)
Ag2	0,0327(6)	0,0294(6)	0,0302(6)	-0,0008(5)	-0,0082(5)	-0,0123(5)
Ag3	0,0283(6)	0,0237(6)	0,0272(6)	-0,0035(4)	-0,0032(5)	-0,0100(5)
Ag4	0,0355(6)	0,0334(6)	0,0257(6)	-0,0001(5)	-0,0086(5)	-0,0163(5)
N1	0,023(7)	0,057(9)	0,023(6)	-0,009(6)	-0,003(5)	-0,010(6)
N2	0,039(8)	0,035(8)	0,029(7)	-0,002(6)	-0,010(6)	-0,015(6)
N3	0,024(7)	0,039(8)	0,032(7)	-0,005(6)	-0,008(6)	-0,006(6)
N4	0,033(7)	0,045(8)	0,033(7)	-0,007(6)	-0,013(6)	-0,015(6)
N5	0,028(6)	0,031(7)	0,023(6)	-0,006(5)	-0,008(5)	-0,010(5)
N6	0,020(6)	0,032(7)	0,038(7)	-0,010(6)	-0,006(5)	-0,010(5)
N13	0,051(8)	0,031(7)	0,036(7)	-0,008(6)	-0,015(7)	-0,021(6)

Tabelle A.27.: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsfaktoren (\AA^2) von 11 in „trockener“ Form. U_{eq} ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U_{eq}
W1	0,1393(2)	0,89215(18)	0,47262(17)	0,0313(7)
W2	0,4147(2)	0,73462(18)	0,42123(19)	0,0372(8)
W3	0,5983(2)	0,76544(17)	0,22345(16)	0,0268(7)
W4	0,5187(2)	0,95840(19)	0,06792(17)	0,0338(8)
W5	0,3786(3)	0,70518(18)	0,24214(19)	0,0411(9)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
W6	0,0622(2)	1,07764(18)	0,32387(17)	0,0301(7)
W7	0,5542(2)	0,98613(18)	0,25839(18)	0,0345(8)
W8	0,1061(2)	0,86616(18)	0,28970(18)	0,0339(8)
W9	0,3661(2)	0,9574(2)	0,45578(19)	0,0432(9)
W10	0,3013(3)	0,8975(2)	0,08324(19)	0,0462(9)
W11	0,2936(3)	1,14069(18)	0,3043(2)	0,0419(9)
W12	0,2554(2)	1,11006(18)	0,11705(19)	0,0390(8)
Si1	0,3302(17)	0,9246(13)	0,2711(13)	0,011(2)
O1	0,387(3)	0,602(3)	0,224(3)	0,042(12)
O2	0,263(3)	1,247(3)	0,311(3)	0,035(11)
O3	0,587(4)	0,838(3)	0,114(3)	0,043(12)
O4	0,666(3)	1,010(3)	0,246(3)	0,052(14)
O5	0,011(4)	0,832(3)	0,290(3)	0,052(13)
O6	0,278(3)	0,876(3)	0,003(2)	0,033(11)
O7	0,051(4)	1,010(3)	0,431(3)	0,057(15)
O8	-0,063(3)	1,165(3)	0,338(3)	0,048(13)
O9	0,725(4)	0,700(3)	0,191(3)	0,055(14)
O10	0,063(4)	0,871(3)	0,573(3)	0,050(13)
O11	0,374(4)	0,961(4)	0,554(3)	0,071(16)
O12	0,624(4)	0,963(3)	-0,023(3)	0,066(15)
O13	0,560(4)	1,004(3)	0,130(3)	0,077(18)
O14	0,091(3)	0,853(2)	0,399(2)	0,037(12)
O15	0,030(4)	0,991(3)	0,296(3)	0,053(14)
O16	0,613(4)	0,859(3)	0,256(3)	0,076(18)
O17	0,120(5)	1,117(4)	0,205(3)	0,10(2)
O18	0,447(4)	0,909(2)	0,020(3)	0,061(14)
O19	0,422(3)	0,829(3)	0,440(3)	0,066(15)
O20	0,267(3)	0,778(3)	0,471(3)	0,068(17)
O21	0,550(4)	0,723(4)	0,343(3)	0,068(17)
O22	0,158(5)	0,891(4)	0,172(4)	0,12(3)
O23	0,318(4)	1,085(4)	0,412(3)	0,12(3)
O24	0,156(5)	1,129(4)	0,337(3)	0,066(15)
O25	0,454(3)	1,115(3)	0,271(3)	0,073(16)
O26	0,445(3)	0,658(3)	0,497(2)	0,050(14)
O27	0,390(3)	0,664(3)	0,363(2)	0,053(13)
O28	0,208(3)	1,208(3)	0,046(3)	0,056(14)
O29	0,294(4)	1,147(3)	0,193(3)	0,055(13)
O30	0,375(3)	0,782(3)	0,132(3)	0,082(19)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
O31	0,229(3)	0,763(2)	0,290(2)	0,034(10)
O32	0,532(5)	0,697(4)	0,204(3)	0,075(17)
O33	0,243(3)	1,026(3)	0,063(3)	0,060(15)
O34	0,231(4)	0,952(3)	0,481(3)	0,059(14)
O35	0,500(4)	0,961(3)	0,379(3)	0,09(2)
O36	0,413(4)	1,072(4)	0,060(4)	0,10(2)
O37	0,348(2)	0,965(2)	0,1703(19)	0,043(9)
O38	0,211(2)	0,941(2)	0,3190(17)	0,052(11)
O39	0,411(2)	0,817(2)	0,2840(18)	0,039(9)
O40	0,377(2)	0,983(2)	0,306(2)	0,055(11)
Ag1	0,7249(4)	0,4643(3)	0,7153(3)	0,0300(13)
Ag2	0,4620(4)	0,5036(4)	0,8064(3)	0,0356(13)
Ag3	1,1919(4)	0,3412(4)	0,7347(3)	0,0368(14)
Ag4	0,8634(4)	0,4448(4)	0,5280(3)	0,0353(13)
Ag5	0,9283(4)	0,3837(3)	0,8262(3)	0,0304(13)
Ag6	1,0095(4)	0,3807(3)	0,6460(3)	0,0340(13)
Ag7	0,6474(4)	0,4649(3)	0,8950(3)	0,0352(13)
Ag8	0,7897(4)	0,4057(3)	1,0147(3)	0,0322(13)
O50	0,788(3)	0,401(3)	0,441(3)	0,038(11)
O51	0,876(4)	0,443(3)	1,094(3)	0,062(15)
N1	0,7906(16)	0,5964(15)	0,4897(14)	0,045(15)
N2	0,9905(17)	0,4912(12)	0,4043(15)	0,034(14)
N3	0,982(4)	0,539(3)	0,613(3)	0,032(13)
N4	1,164(4)	0,412(3)	0,546(3)	0,039(14)
N5	1,160(5)	0,493(4)	0,728(3)	0,043(15)
N6	1,355(5)	0,364(4)	0,669(3)	0,043(15)
N7	0,861(3)	0,253(2)	1,058(2)	0,012(11)
N8	0,659(4)	0,366(3)	1,132(3)	0,049(15)
N10	0,674(3)	0,3078(17)	0,926(2)	0,035(14)
N11	0,303(4)	0,479(4)	0,870(3)	0,040(15)
N12	0,495(4)	0,354(4)	0,809(3)	0,036(14)
N13	0,489(4)	0,448(3)	0,998(3)	0,027(13)
N14	0,710(4)	0,431(4)	0,345(3)	0,049(15)
N15	0,973(4)	0,406(3)	1,192(3)	0,029(12)
C1	0,6863(17)	0,6500(18)	0,5300(16)	0,07(3)
C2	0,6496(16)	0,7416(18)	0,4993(18)	0,014(12)
C3	0,7171(19)	0,7795(14)	0,4283(19)	0,05(2)
C4	0,8214(17)	0,7258(13)	0,3881(16)	0,026(15)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
C5	0,8581(15)	0,6343(12)	0,4188(12)	0,045(19)
C6	0,9721(15)	0,5827(12)	0,3748(11)	0,06(2)
C7	1,0569(16)	0,6121(15)	0,3163(16)	0,06(2)
C8	1,1601(16)	0,5501(18)	0,2873(18)	0,019(14)
C9	1,1785(16)	0,4585(17)	0,3168(17)	0,017(14)
C10	1,0937(18)	0,4291(14)	0,3753(18)	0,039(18)
C11	0,896(3)	0,600(3)	0,639(2)	0,008(12)
C12	0,857(5)	0,685(4)	0,623(4)	0,06(2)
C13	0,932(5)	0,711(4)	0,559(4)	0,060(18)
C14	1,051(4)	0,648(3)	0,515(3)	0,041(18)
C15	1,065(3)	0,563(3)	0,550(2)	0,008(12)
C16	1,159(6)	0,501(5)	0,520(5)	0,06(2)
C17	1,255(6)	0,511(5)	0,472(5)	0,07(2)
C18	1,344(6)	0,441(5)	0,449(4)	0,07(2)
C19	1,355(5)	0,344(4)	0,461(4)	0,047(17)
C20	1,254(5)	0,336(4)	0,517(4)	0,035(16)
C21	1,067(5)	0,558(4)	0,751(4)	0,023(15)
C22	1,060(4)	0,636(3)	0,731(3)	0,024(14)
C23	1,139(4)	0,679(4)	0,678(3)	0,020(13)
C24	1,245(5)	0,600(4)	0,653(4)	0,050(19)
C25	1,259(4)	0,525(4)	0,673(3)	0,028(15)
C26	1,356(5)	0,455(4)	0,650(3)	0,029(15)
C27	1,454(5)	0,463(4)	0,621(4)	0,046(17)
C28	1,549(4)	0,389(3)	0,588(3)	0,034(13)
C29	1,543(4)	0,308(3)	0,604(3)	0,026(13)
C30	1,447(6)	0,314(5)	0,644(4)	0,06(2)
C31	0,964(4)	0,207(3)	1,019(3)	0,026(15)
C32	1,010(5)	0,125(4)	1,048(4)	0,06(2)
C33	0,950(5)	0,075(4)	1,121(4)	0,06(2)
C34	0,838(4)	0,128(3)	1,165(4)	0,047(18)
C35	0,798(3)	0,212(2)	1,123(2)	0,011(13)
C36	0,683(3)	0,280(3)	1,159(2)	0,012(12)
C37	0,602(3)	0,242(3)	1,222(2)	0,017(14)
C38	0,502(5)	0,298(5)	1,255(4)	0,07(3)
C39	0,481(5)	0,390(4)	1,232(4)	0,05(2)
C40	0,566(5)	0,420(4)	1,165(4)	0,05(2)
C41	0,389(5)	0,509(4)	1,025(4)	0,036(16)
C42	0,293(4)	0,488(3)	1,070(3)	0,018(12)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
C43	0,291(4)	0,413(4)	1,090(3)	0,031(15)
C44	0,385(4)	0,343(4)	1,064(3)	0,029(15)
C45	0,482(4)	0,365(3)	1,019(3)	0,024(14)
C46	0,587(2)	0,286(2)	0,990(3)	0,06(2)
C47	0,600(2)	0,197(2)	1,029(2)	0,06(2)
C48	0,700(2)	0,1298(17)	1,0035(19)	0,014(11)
C49	0,787(2)	0,1519(19)	0,940(2)	0,011(11)
C50	0,774(3)	0,241(2)	0,901(2)	0,08(3)
C51	0,201(4)	0,557(3)	0,897(3)	0,022(13)
C52	0,105(4)	0,521(3)	0,937(3)	0,022(13)
C53	0,108(6)	0,428(4)	0,946(4)	0,07(2)
C54	0,206(6)	0,365(6)	0,914(5)	0,08(3)
C55	0,303(5)	0,404(4)	0,876(4)	0,036(16)
C56	0,419(5)	0,329(4)	0,857(4)	0,035(16)
C57	0,426(5)	0,227(3)	0,885(3)	0,027(15)
C58	0,515(8)	0,184(6)	0,859(6)	0,09(3)
C59	0,614(5)	0,190(4)	0,807(3)	0,036(16)
C60	0,592(5)	0,293(4)	0,785(4)	0,030(16)
C61	1,063(6)	0,292(4)	0,773(4)	0,05(2)
C62	1,144(4)	0,213(3)	0,774(3)	0,005(12)
C63	1,234(7)	0,118(6)	0,773(5)	0,08(3)
C64	1,159(5)	0,047(4)	0,825(4)	0,051(19)
C65	1,274(6)	0,113(5)	0,849(4)	0,07(2)
C66	1,318(4)	0,113(4)	0,678(3)	0,041(14)
C67	0,811(4)	0,487(3)	0,876(3)	0,020(13)
C68	0,748(4)	0,555(3)	0,921(3)	0,026(15)
C69	0,700(3)	0,652(3)	0,950(2)	0,002(10)
C70	0,713(5)	0,715(4)	0,864(4)	0,06(2)
C71	0,600(5)	0,644(5)	1,016(4)	0,07(2)
C72	0,756(5)	0,654(4)	0,994(4)	0,07(2)
C73	0,847(4)	0,361(3)	0,645(3)	0,012(12)
C74	0,887(5)	0,294(4)	0,635(4)	0,032(16)
C75	0,939(9)	0,214(7)	0,605(7)	0,14(4)
C76	0,983(6)	0,134(5)	0,675(4)	0,08(2)
C77	1,073(6)	0,189(5)	0,563(5)	0,09(2)
C78	0,868(5)	0,183(4)	0,555(4)	0,07(2)
C79	0,591(4)	0,575(3)	0,766(3)	0,012(12)
C80	0,516(7)	0,632(5)	0,781(5)	0,07(2)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
C81	0,434(4)	0,730(3)	0,762(3)	0,005(12)
C82	0,486(4)	0,793(4)	0,742(4)	0,038(16)
C83	0,369(5)	0,755(4)	0,850(3)	0,047(16)
C84	0,359(4)	0,739(3)	0,711(3)	0,010(11)
C85	0,742(4)	0,455(4)	0,399(3)	0,016(13)
C86	0,707(3)	0,345(3)	0,340(3)	0,008(11)
C87	0,658(5)	0,506(4)	0,284(4)	0,054(19)
C88	0,935(5)	0,385(5)	1,147(4)	0,05(2)
C89	0,934(5)	0,502(4)	1,189(4)	0,055(19)
C90	1,029(5)	0,349(4)	1,251(4)	0,044(17)
O105	0,651(5)	1,102(4)	0,627(4)	0,15(2)
C106	0,742(8)	1,036(6)	0,643(6)	0,13(3)
N107	0,722(4)	0,973(3)	0,705(3)	0,070(14)
C108	0,820(8)	0,888(6)	0,720(6)	0,16(4)
C109	0,623(4)	0,976(4)	0,755(3)	0,064(17)

Tabelle A.28.: Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für **11** in „trockener“ Form.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
W1	0,0243(17)	0,0279(17)	0,0337(18)	-0,0090(14)	-0,0004(14)	-0,0049(14)
W2	0,0442(19)	0,0245(17)	0,044(2)	0,0026(15)	-0,0224(16)	-0,0086(15)
W3	0,0196(15)	0,0211(16)	0,0331(18)	-0,0088(13)	-0,0037(13)	-0,0004(13)
W4	0,0185(16)	0,0372(19)	0,0341(18)	-0,0018(15)	-0,0035(14)	-0,0036(15)
W5	0,049(2)	0,0207(17)	0,0429(19)	-0,0106(14)	-0,0015(16)	-0,0077(15)
W6	0,0222(16)	0,0253(16)	0,0405(19)	-0,0087(14)	-0,0036(14)	-0,0081(14)
W7	0,0215(16)	0,0244(17)	0,046(2)	0,0007(14)	-0,0059(15)	-0,0032(14)
W8	0,0181(16)	0,0291(17)	0,0417(19)	-0,0019(14)	-0,0035(14)	-0,0020(14)
W9	0,0400(19)	0,040(2)	0,041(2)	-0,0183(16)	-0,0196(16)	0,0100(16)
W10	0,0416(19)	0,047(2)	0,0366(19)	-0,0184(16)	-0,0142(16)	0,0093(17)
W11	0,0449(19)	0,0172(17)	0,052(2)	-0,0094(15)	-0,0023(16)	-0,0060(15)
W12	0,0449(19)	0,0259(17)	0,0416(19)	0,0093(15)	-0,0189(16)	-0,0108(16)
Si1	0,011(5)	0,005(5)	0,012(5)	-0,002(4)	0,001(4)	0,000(4)
O1	0,01(2)	0,06(3)	0,06(3)	0,01(2)	-0,008(19)	-0,02(2)
O2	0,04(3)	0,05(3)	0,03(2)	-0,03(2)	-0,01(2)	-0,02(2)
O3	0,05(3)	0,02(2)	0,05(3)	0,00(2)	-0,02(2)	-0,01(2)
O4	0,02(2)	0,01(2)	0,12(4)	-0,02(2)	-0,05(3)	0,026(18)
O5	0,08(3)	0,05(3)	0,04(3)	0,01(2)	-0,01(2)	-0,05(3)
O6	0,02(2)	0,05(3)	0,02(2)	-0,040(19)	0,012(16)	0,005(19)
O7	0,10(4)	0,04(3)	0,09(3)	-0,02(2)	-0,08(3)	-0,01(3)

Weiter auf der nächsten Seite

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
O8	0,003(19)	0,04(2)	0,05(3)	-0,03(2)	0,032(17)	0,029(17)
O9	0,07(3)	0,05(3)	0,07(3)	-0,02(2)	-0,07(3)	0,00(2)
O10	0,05(3)	0,02(2)	0,04(3)	-0,010(18)	-0,04(2)	0,049(18)
O11	0,06(3)	0,08(4)	0,07(3)	0,00(3)	-0,01(3)	-0,01(3)
O12	0,07(3)	0,07(3)	0,04(3)	0,04(2)	0,00(2)	-0,05(3)
O13	0,12(4)	0,03(2)	0,09(3)	-0,06(2)	-0,07(3)	0,04(2)
O14	0,07(3)	0,03(2)	0,04(2)	0,046(17)	-0,06(2)	-0,03(2)
O15	0,10(4)	0,06(3)	0,02(2)	0,00(2)	-0,01(2)	-0,06(3)
O16	0,10(4)	0,01(2)	0,11(4)	0,00(2)	-0,09(3)	0,04(2)
O17	0,12(5)	0,18(6)	0,02(3)	0,00(3)	0,06(3)	-0,15(5)
O18	0,06(3)	0,000(18)	0,13(4)	-0,02(2)	-0,06(3)	0,023(18)
O19	0,04(2)	0,03(2)	0,07(3)	0,01(2)	-0,03(2)	0,033(19)
O20	0,01(2)	0,08(3)	0,14(4)	-0,11(3)	-0,02(2)	0,01(2)
O21	0,08(3)	0,13(4)	0,07(3)	-0,05(3)	-0,04(3)	-0,08(3)
O22	0,08(4)	0,10(5)	0,06(4)	-0,04(3)	0,04(3)	0,07(4)
O23	0,06(3)	0,11(4)	0,04(3)	0,03(3)	0,05(3)	0,03(3)
O24	0,11(4)	0,08(3)	0,03(3)	0,01(2)	-0,01(3)	-0,07(3)
O25	0,07(3)	0,03(3)	0,06(3)	0,01(2)	0,03(2)	0,00(2)
O26	0,05(3)	0,04(2)	0,01(2)	0,047(18)	0,004(19)	-0,01(2)
O27	0,07(3)	0,07(3)	0,03(2)	0,01(2)	0,02(2)	-0,06(3)
O28	0,01(2)	0,07(3)	0,11(4)	-0,01(3)	-0,04(2)	-0,02(2)
O29	0,11(4)	0,04(3)	0,04(2)	0,029(19)	-0,03(2)	-0,05(2)
O30	0,00(2)	0,08(3)	0,05(3)	0,03(2)	0,032(18)	0,04(2)
O31	0,018(19)	0,03(2)	0,018(18)	-0,008(16)	0,012(14)	0,012(16)
O32	0,11(4)	0,08(4)	0,07(4)	-0,03(3)	-0,01(3)	-0,07(3)
O33	0,006(19)	0,12(4)	0,09(3)	-0,09(3)	-0,02(2)	0,00(2)
O34	0,07(3)	0,05(3)	0,07(3)	-0,03(2)	-0,06(3)	0,03(2)
O35	0,03(3)	0,07(4)	0,05(3)	0,07(3)	0,01(2)	0,04(3)
O36	0,02(3)	0,07(4)	0,18(6)	-0,01(4)	-0,04(3)	0,01(2)
O37	0,024(18)	0,04(2)	0,04(2)	-0,006(16)	0,017(15)	-0,004(16)
O38	0,03(2)	0,10(3)	0,003(17)	0,000(17)	-0,012(15)	0,00(2)
O39	0,010(16)	0,07(2)	0,033(19)	0,000(17)	0,009(14)	-0,031(17)
O40	0,000(16)	0,05(2)	0,08(3)	0,02(2)	0,005(16)	-0,010(16)
Ag1	0,025(3)	0,027(3)	0,032(3)	-0,002(2)	-0,005(2)	-0,007(2)
Ag2	0,034(3)	0,040(3)	0,030(3)	-0,005(3)	-0,007(2)	-0,011(3)
Ag3	0,032(3)	0,036(3)	0,037(3)	-0,001(3)	-0,009(3)	-0,009(3)
Ag4	0,038(3)	0,043(3)	0,027(3)	-0,002(3)	-0,010(2)	-0,018(3)
Ag5	0,026(3)	0,027(3)	0,030(3)	-0,011(2)	0,000(2)	-0,003(2)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Ag6	0,032(3)	0,031(3)	0,032(3)	0,000(2)	-0,003(3)	-0,011(3)
Ag7	0,031(3)	0,033(3)	0,036(3)	-0,002(3)	-0,007(3)	-0,009(3)
Ag8	0,034(3)	0,032(3)	0,031(3)	-0,003(2)	-0,006(2)	-0,014(3)

A.12. $[\text{Ag}_8(\text{bipy})_6(\text{C}\equiv\text{C}^t\text{Bu})_4(\text{C}_3\text{H}_7\text{NO})_2][\text{SiMo}_{12}\text{O}_{40}]$ 12

Kristallzustand	nass
Summenformel	$\text{C}_{96}\text{H}_{104}\text{Ag}_8\text{Mo}_{12}\text{N}_{16}\text{O}_{44}\text{Si}$
Kristall	gelbe Plättchen (0,05 x 0,05 x 0,05 mm ³)
Kristallsystem, Raumgruppe	trikin, $\text{P}\bar{1}$ (Nr. 2)
Gitterkonstanten/Å, °	$a = 13,895(1)$, $b = 16,377(1)$, $c = 17,018(2)$, $\alpha = 73,589(2)$, $\beta = 68,414(1)$, $\gamma = 66,582(1)$
Volumen/Å ³	3262(0)
Formeleinheiten	1
Röntgendichte/g cm ⁻³	2,152
Temperatur	100 K
$2\theta_{max}$	52,04 °
hkl -Bereich	$-17 \leq h \leq 17$, $-20 \leq k \leq 20$, $-21 \leq l \leq 21$
F(000)	2038
Absorptionskoeffizient μ/mm^{-1}	2,370
Zahl der gemessenen Reflexe	26120
davon symmetrieunabhängig	12764 ($R_{int} = 0,0192$)
Anzahl der Parameter	801
Restelektronendichte/e·Å ⁻³ (max/min)	3,74/-2,59
R_1 ($I > 2\sigma(I)$)	0,0789
wR_2 ($I > 2\sigma(I)$)	0,1929
R_1 (alle Daten)	0,0822
wR_2 (alle Daten)	0,1980
Datenbank	CCDC 771102
freies Volumen	22,9 %
freies Volumen mit Lösungsmittel	7,8 %
Lösungsmittel pro Formeleinheit	1 DMF
Besonderheiten	Polyoxometallate fehlgeordnet, C und N anisotrop verfeinert

Tabelle A.29.: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsfaktoren (Å²) von **12**. U_{eq} ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U_{eq}
Mo1	0,76586(7)	0,34370(6)	0,44332(7)	0,0372(2)
Mo2	0,68758(8)	0,54371(8)	0,30045(6)	0,0402(2)
Mo3	0,72614(8)	0,55223(7)	0,49151(8)	0,0435(3)
Mo4	0,59020(10)	0,31493(7)	0,65136(8)	0,0492(3)
Mo5	0,53481(11)	0,28148(7)	0,47860(9)	0,0563(3)
Mo6	0,51771(11)	0,53702(9)	0,68786(8)	0,0585(3)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
Si1	0,5000	0,5000	0,5000	0,0261(8)
O1	0,7770(10)	0,5573(8)	0,2051(7)	0,079(4)
O2	0,7352(10)	0,5781(6)	0,3676(7)	0,065(3)
O3	0,7671(10)	0,4168(6)	0,3405(7)	0,067(3)
O4	0,8908(8)	0,2696(7)	0,4240(7)	0,067(3)
O5	0,8302(8)	0,5828(6)	0,4835(7)	0,056(3)
O6	0,7921(10)	0,4340(6)	0,4812(6)	0,060(3)
O7	0,5379(8)	0,5468(8)	0,7741(6)	0,064(3)
O8	0,5907(8)	0,4052(8)	0,6918(11)	0,099(5)
O9	0,6259(8)	0,2261(7)	0,7243(7)	0,069(3)
O10	0,5588(7)	0,1797(6)	0,4599(7)	0,056(3)
O11	0,7168(13)	0,3062(11)	0,5682(7)	0,102(5)
O12	0,3870(9)	0,5177(7)	0,7294(11)	0,100(5)
O13	0,4663(10)	0,6516(10)	0,6373(9)	0,133(8)
O14	0,5721(8)	0,6468(7)	0,2941(11)	0,094(5)
O15	0,6672(10)	0,5334(9)	0,6069(8)	0,133(8)
O16	0,5476(12)	0,2578(11)	0,5864(7)	0,100(5)
O17	0,3866(11)	0,3274(9)	0,5114(8)	0,130(8)
O18	0,6867(12)	0,2831(11)	0,4331(6)	0,098(5)
O19	0,4542(10)	0,4399(8)	0,4630(9)	0,026(3)
O20	0,6221(10)	0,4872(8)	0,4500(8)	0,023(3)
O21	0,4210(10)	0,6049(8)	0,4856(8)	0,023(3)
O22	0,5217(10)	0,5380(9)	0,3979(8)	0,025(3)
Ag1	0,89837(6)	0,03968(5)	0,94385(5)	0,03164(19)
Ag2	0,81987(7)	0,04217(6)	1,12312(5)	0,0350(2)
Ag3	1,03912(7)	0,02039(6)	0,75498(5)	0,0354(2)
Ag4	0,63380(7)	0,08174(6)	1,03584(5)	0,0365(2)
O100	0,9574(8)	-0,0207(6)	0,6730(6)	0,049(2)
N1	0,6618(8)	-0,0692(7)	1,0426(6)	0,041(2)
N2	0,4692(8)	0,0621(8)	1,1006(6)	0,046(3)
N3	0,8457(8)	-0,1149(7)	1,1563(6)	0,036(2)
N4	0,6623(8)	0,0190(7)	1,2268(6)	0,037(2)
N5	1,1660(7)	0,0640(6)	0,6342(5)	0,0320(19)
N6	0,9677(7)	0,1741(7)	0,7139(6)	0,035(2)
N102	0,8676(9)	0,0121(7)	0,5760(6)	0,040(2)
C1	0,7600(10)	-0,1321(8)	1,0173(8)	0,042(3)
C2	0,7754(12)	-0,2249(9)	1,0411(8)	0,049(3)
C3	0,6866(14)	-0,2503(10)	1,0925(9)	0,057(4)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
C4	0,5866(13)	-0,1879(10)	1,1177(8)	0,052(4)
C5	0,5766(10)	-0,0961(10)	1,0909(8)	0,049(3)
C6	0,4679(10)	-0,0231(11)	1,1162(8)	0,054(4)
C7	0,3702(12)	-0,0431(14)	1,1554(12)	0,094(8)
C8	0,2756(12)	0,0254(18)	1,1812(12)	0,111(10)
C9	0,2758(11)	0,1123(17)	1,1667(9)	0,090(8)
C10	0,3759(11)	0,1275(12)	1,1240(8)	0,060(4)
C11	0,9412(10)	-0,1797(8)	1,1287(8)	0,038(2)
C12	0,9623(11)	-0,2700(8)	1,1633(9)	0,044(3)
C13	0,8818(13)	-0,2942(9)	1,2307(9)	0,052(3)
C14	0,7817(11)	-0,2297(9)	1,2593(8)	0,047(3)
C15	0,7661(10)	-0,1399(8)	1,2214(7)	0,041(3)
C16	0,6602(10)	-0,0661(9)	1,2495(7)	0,040(3)
C17	0,5633(12)	-0,0842(11)	1,2985(8)	0,054(3)
C18	0,4707(12)	-0,0166(14)	1,3222(9)	0,068(5)
C19	0,4704(12)	0,0723(13)	1,3003(9)	0,067(4)
C20	0,5686(11)	0,0859(10)	1,2522(8)	0,053(3)
C21	1,2670(9)	0,0083(8)	0,6005(7)	0,036(2)
C22	1,3474(9)	0,0377(8)	0,5383(8)	0,040(3)
C23	1,3265(10)	0,1295(9)	0,5120(8)	0,044(3)
C24	1,2250(10)	0,1872(8)	0,5457(7)	0,039(3)
C25	1,1445(8)	0,1526(7)	0,6061(6)	0,029(2)
C26	1,0317(9)	0,2123(8)	0,6450(7)	0,033(2)
C27	0,9923(10)	0,3037(8)	0,6107(8)	0,046(3)
C28	0,8884(11)	0,3561(9)	0,6500(9)	0,052(3)
C29	0,8230(10)	0,3168(9)	0,7200(9)	0,048(3)
C30	0,8658(9)	0,2272(8)	0,7493(7)	0,039(3)
C31	0,7625(9)	0,1439(7)	0,9958(7)	0,035(2)
C32	0,6847(10)	0,2123(8)	0,9985(7)	0,040(3)
C33	0,6026(11)	0,3050(8)	0,9936(8)	0,046(3)
C34	0,5377(11)	0,3154(9)	0,9342(9)	0,050(3)
C35	0,6650(15)	0,3738(9)	0,9553(12)	0,072(5)
C36	0,5246(14)	0,3228(10)	1,0830(9)	0,070(5)
C37	1,0185(9)	-0,0661(8)	0,8854(7)	0,034(2)
C38	1,0742(10)	-0,1315(9)	0,8515(7)	0,043(3)
C39	1,1280(11)	-0,2206(10)	0,8210(9)	0,055(3)
C40	1,0556(17)	-0,2391(12)	0,7851(13)	0,086(6)
C41	1,148(2)	-0,2937(11)	0,8973(14)	0,109(9)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
C42	1,2352(18)	-0,2231(18)	0,756(2)	0,162(15)
C101	0,9046(10)	0,0343(9)	0,6249(8)	0,042(3)
C103	0,8071(13)	0,0809(9)	0,5196(9)	0,052(3)
C104	0,8857(10)	-0,0813(8)	0,5754(9)	0,044(3)
O105	0,773(4)	0,746(3)	0,697(3)	0,32(2)
C106	0,921(13)	0,651(10)	0,672(9)	0,65(10)
N107	0,851(2)	0,6108(16)	0,6915(15)	0,120(7)
C108	0,762(3)	0,593(3)	0,716(2)	0,174(14)
C109	0,955(2)	0,5615(19)	0,6408(18)	0,114(8)

Tabelle A.30.: Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für **12**.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Si1	0,0243(18)	0,0182(17)	0,0315(19)	-0,0035(14)	-0,0066(15)	-0,0045(14)
Mo1	0,0180(4)	0,0283(5)	0,0577(6)	-0,0115(4)	-0,0013(4)	-0,0057(3)
Mo2	0,0210(4)	0,0538(6)	0,0366(5)	-0,0010(4)	-0,0032(4)	-0,0122(4)
Mo3	0,0193(4)	0,0413(6)	0,0594(7)	-0,0049(5)	-0,0039(4)	-0,0084(4)
Mo4	0,0621(7)	0,0312(5)	0,0482(6)	0,0109(4)	-0,0252(6)	-0,0125(5)
Mo5	0,0608(7)	0,0214(5)	0,0763(8)	-0,0147(5)	-0,0085(6)	-0,0088(5)
Mo6	0,0606(8)	0,0672(8)	0,0433(6)	-0,0189(6)	-0,0221(6)	-0,0034(6)
O1	0,094(9)	0,065(7)	0,046(6)	-0,005(5)	0,024(6)	-0,036(6)
O2	0,115(9)	0,027(4)	0,076(7)	0,010(4)	-0,064(7)	-0,025(5)
O3	0,113(9)	0,031(5)	0,083(7)	0,010(5)	-0,067(7)	-0,027(5)
O4	0,052(6)	0,062(6)	0,064(6)	-0,032(5)	-0,026(5)	0,028(5)
O5	0,065(6)	0,039(5)	0,091(7)	0,002(5)	-0,045(6)	-0,032(4)
O6	0,108(8)	0,032(4)	0,058(6)	0,012(4)	-0,051(6)	-0,029(5)
O7	0,058(6)	0,096(8)	0,054(6)	-0,034(6)	-0,014(5)	-0,030(6)
O8	0,030(5)	0,068(7)	0,224(17)	-0,079(9)	-0,057(8)	0,016(5)
O9	0,041(5)	0,064(6)	0,065(6)	0,036(5)	-0,012(5)	-0,014(5)
O10	0,038(5)	0,037(5)	0,098(8)	-0,027(5)	-0,017(5)	-0,008(4)
O11	0,157(13)	0,172(14)	0,040(6)	-0,026(7)	0,009(7)	-0,144(12)
O12	0,052(6)	0,050(6)	0,228(17)	-0,068(8)	-0,078(9)	0,018(5)
O13	0,057(7)	0,109(11)	0,080(9)	0,038(8)	0,034(6)	0,042(7)
O14	0,042(6)	0,062(7)	0,205(15)	-0,074(8)	-0,066(8)	0,018(5)
O15	0,077(8)	0,087(9)	0,067(7)	0,034(6)	0,036(6)	0,059(7)
O16	0,115(10)	0,180(14)	0,054(6)	-0,035(8)	0,023(6)	-0,129(11)
O17	0,079(8)	0,092(9)	0,064(7)	0,029(7)	0,021(6)	0,062(7)
O18	0,136(11)	0,183(14)	0,040(5)	-0,015(7)	0,001(6)	-0,142(12)

Weiter auf der nächsten Seite

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
O19	0,015(6)	0,017(6)	0,037(7)	-0,006(5)	-0,004(5)	0,001(5)
O20	0,019(6)	0,018(6)	0,028(7)	0,000(5)	-0,006(5)	-0,005(5)
O21	0,021(6)	0,020(6)	0,029(7)	-0,004(5)	-0,006(5)	-0,007(5)
O22	0,018(6)	0,025(7)	0,030(7)	-0,010(5)	-0,001(5)	-0,008(5)
Ag1	0,0289(4)	0,0311(4)	0,0311(4)	-0,0025(3)	-0,0039(3)	-0,0121(3)
Ag2	0,0309(4)	0,0357(4)	0,0343(4)	-0,0012(3)	-0,0071(3)	-0,0120(3)
Ag3	0,0374(4)	0,0414(5)	0,0289(4)	-0,0017(3)	-0,0097(3)	-0,0170(4)
Ag4	0,0335(4)	0,0398(5)	0,0325(4)	0,0002(3)	-0,0089(3)	-0,0131(3)
O100	0,052(5)	0,063(6)	0,044(5)	-0,004(4)	-0,023(4)	-0,027(5)
N1	0,040(5)	0,049(6)	0,039(5)	0,008(4)	-0,016(4)	-0,028(5)
N2	0,026(5)	0,074(8)	0,030(5)	0,003(5)	-0,010(4)	-0,014(5)
N3	0,036(5)	0,049(6)	0,030(4)	0,001(4)	-0,012(4)	-0,022(4)
N4	0,036(5)	0,050(6)	0,026(4)	-0,002(4)	-0,011(4)	-0,016(4)
N5	0,030(4)	0,045(5)	0,027(4)	-0,007(4)	-0,009(4)	-0,015(4)
N6	0,025(4)	0,045(5)	0,037(5)	-0,011(4)	-0,006(4)	-0,013(4)
N102	0,050(6)	0,043(5)	0,037(5)	-0,005(4)	-0,018(4)	-0,022(5)
C1	0,036(6)	0,044(7)	0,048(7)	0,001(5)	-0,020(5)	-0,015(5)
C2	0,064(8)	0,042(7)	0,048(7)	0,004(6)	-0,030(6)	-0,018(6)
C3	0,093(12)	0,044(7)	0,043(7)	0,012(6)	-0,036(8)	-0,032(8)
C4	0,071(9)	0,070(9)	0,035(6)	0,018(6)	-0,027(6)	-0,051(8)
C5	0,041(7)	0,069(9)	0,038(6)	0,015(6)	-0,023(5)	-0,024(6)
C6	0,032(6)	0,084(10)	0,037(6)	0,020(6)	-0,020(5)	-0,022(6)
C7	0,044(9)	0,122(15)	0,091(12)	0,073(12)	-0,042(9)	-0,043(10)
C8	0,029(8)	0,17(2)	0,071(11)	0,072(14)	-0,013(7)	-0,036(11)
C9	0,023(7)	0,16(2)	0,036(7)	0,011(10)	-0,004(6)	-0,005(9)
C10	0,041(7)	0,095(11)	0,033(6)	-0,009(7)	-0,015(6)	-0,009(7)
C11	0,038(6)	0,040(6)	0,043(6)	-0,003(5)	-0,018(5)	-0,017(5)
C12	0,049(7)	0,035(6)	0,063(8)	-0,008(6)	-0,032(6)	-0,013(5)
C13	0,079(10)	0,037(6)	0,055(8)	0,012(6)	-0,040(7)	-0,031(7)
C14	0,060(8)	0,055(8)	0,041(6)	0,013(6)	-0,025(6)	-0,040(7)
C15	0,053(7)	0,047(7)	0,038(6)	0,003(5)	-0,028(5)	-0,025(6)
C16	0,038(6)	0,064(8)	0,026(5)	-0,003(5)	-0,010(5)	-0,027(6)
C17	0,056(8)	0,079(10)	0,033(6)	0,001(6)	-0,006(6)	-0,041(8)
C18	0,044(8)	0,121(15)	0,041(7)	-0,017(8)	0,008(6)	-0,045(9)
C19	0,038(7)	0,101(13)	0,043(8)	-0,018(8)	0,002(6)	-0,014(8)
C20	0,044(7)	0,067(9)	0,032(6)	-0,011(6)	-0,008(5)	-0,003(6)
C21	0,035(6)	0,042(6)	0,033(5)	-0,009(5)	-0,009(5)	-0,014(5)
C22	0,028(5)	0,050(7)	0,051(7)	-0,026(6)	-0,007(5)	-0,012(5)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
C23	0,036(6)	0,054(7)	0,047(7)	-0,022(6)	0,007(5)	-0,028(6)
C24	0,047(7)	0,039(6)	0,040(6)	-0,010(5)	-0,010(5)	-0,024(5)
C25	0,031(5)	0,035(5)	0,029(5)	-0,010(4)	-0,010(4)	-0,014(4)
C26	0,032(5)	0,042(6)	0,029(5)	-0,005(4)	-0,014(4)	-0,011(5)
C27	0,044(7)	0,041(7)	0,044(7)	0,007(5)	-0,016(5)	-0,011(5)
C28	0,045(7)	0,047(7)	0,058(8)	0,005(6)	-0,030(6)	-0,003(6)
C29	0,030(6)	0,057(8)	0,054(7)	-0,014(6)	-0,022(6)	0,001(5)
C30	0,024(5)	0,049(7)	0,039(6)	-0,012(5)	-0,006(5)	-0,007(5)
C31	0,038(6)	0,029(5)	0,034(5)	-0,003(4)	-0,006(5)	-0,013(5)
C32	0,044(7)	0,043(7)	0,031(6)	0,000(5)	-0,014(5)	-0,014(5)
C33	0,052(7)	0,032(6)	0,051(7)	-0,006(5)	-0,025(6)	-0,001(5)
C34	0,055(8)	0,043(7)	0,051(7)	-0,005(6)	-0,026(6)	-0,006(6)
C35	0,086(12)	0,037(7)	0,110(14)	-0,002(8)	-0,068(11)	-0,010(7)
C36	0,085(11)	0,055(9)	0,044(8)	-0,019(7)	-0,029(8)	0,021(8)
C37	0,027(5)	0,040(6)	0,030(5)	-0,005(5)	-0,002(4)	-0,010(5)
C38	0,036(6)	0,056(8)	0,031(6)	-0,007(5)	0,000(5)	-0,016(6)
C39	0,041(7)	0,051(8)	0,059(8)	-0,019(7)	-0,006(6)	-0,003(6)
C40	0,108(15)	0,060(10)	0,103(14)	-0,040(10)	-0,061(12)	0,007(10)
C41	0,18(2)	0,043(9)	0,114(16)	-0,021(10)	-0,103(17)	0,018(11)
C42	0,086(15)	0,14(2)	0,23(3)	-0,14(2)	0,092(19)	-0,051(15)
C101	0,046(7)	0,043(6)	0,042(6)	-0,004(5)	-0,011(5)	-0,022(5)
C103	0,082(10)	0,046(7)	0,050(7)	0,008(6)	-0,040(7)	-0,033(7)
C104	0,042(7)	0,036(6)	0,055(7)	-0,011(5)	-0,021(6)	-0,006(5)

A.13. [Ag₆(bipy)₆(C≡C^tBu)₂(CH₃CN)₂][SiW₁₂O₄₀] 13

A. Kristallographische Daten

Kristallzustand	nass	trocken
Summenformel	$C_{76}H_{72}Ag_6Mo_{12}N_{14}O_{40}Si$	$C_{76}H_{66}Ag_6Mo_{12}N_{14}O_{40}Si$
Kristall	gelbe Plättchen (0,01 x 0,05 x 0,05 mm ³)	gelbe Plättchen (0,01 x 0,04 x 0,05 mm ³)
Kristallsystem, Raumgruppe	monokin, P2 ₁ /c (Nr. 14)	monokin, P2 ₁ /c (Nr. 14)
Gitterkonstanten/Å, °	$a = 14,599(1)$, $b = 16,147(1)$, $c = 21,663(2)$, $\beta = 103,439(1)$	$a = 14,359(2)$, $b = 16,352(2)$, $c = 21,558(3)$, $\beta = 102,126(2)$
Volumen/Å ³	4967(1)	4949(1)
Formeleinheiten	2	2
Röntgendichte/g cm ⁻³	2,439	2,444
Temperatur	100 K	100K
$2\theta_{max}$	45,02 °	38,42 °
hkl -Bereich	$-15 \leq h \leq 15$, $-17 \leq k \leq 17$, $-23 \leq l \leq 13$	$-13 \leq h \leq 13$, $-15 \leq k \leq 15$, $-19 \leq l \leq 19$
F(000)	3492	3420
Absorptionskoeffizient μ/mm^{-1}	2,713	2,722
Zahl der gemessenen Reflexe	28599	19944
davon symmetrieunabhängig	6488 ($R_{int} = 0,0592$)	4110 ($R_{int} = 0,0652$)
Anzahl der Parameter	505	499
Restelektronendichte/e·Å ⁻³ (max/min)	1,81/-0,89	2,87/-0,82
R_1 ($I > 2\sigma(I)$)	0,0642	0,0693
wR_2 ($I > 2\sigma(I)$)	0,1455	0,1794
R_1 (alle Daten)	0,0742	0,0783
wR_2 (alle Daten)	0,1570	0,1892
Datenbank	-	-
freies Volumen	1,0 %	-
freies Volumen mit verfeinerten Lösungsmittel	-	-
Lösungsmittelmoleküle verfeinert pro Formeleinheit	-	-
Besonderheiten	Polyoxometallat fehlgeordnet	Polyoxometallat fehlgeordnet, H Atome am AN fehlen

Tabelle A.31.: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsfaktoren (\AA^2) von **13** in „nasser“ Form. U_{eq} ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U_{eq}
Mo1	0,92127(9)	0,30535(8)	0,43500(6)	0,0237(3)
Mo2	0,76363(8)	0,47487(7)	0,41818(6)	0,0211(3)
Mo3	1,14504(9)	0,32457(8)	0,54034(6)	0,0269(3)
Mo4	1,18132(9)	0,46343(8)	0,42092(7)	0,0321(4)
Mo5	0,94550(9)	0,47146(8)	0,33370(6)	0,0286(3)
Mo6	0,93984(9)	0,34528(8)	0,59869(7)	0,0325(4)
Si1	1,0000	0,5000	0,5000	0,0194(12)
O1	1,1847(12)	0,3671(7)	0,4633(6)	0,073(5)
O2	0,9203(7)	0,2737(6)	0,6496(4)	0,030(2)
O3	1,2123(8)	0,2404(7)	0,5517(5)	0,044(3)
O4	1,0811(9)	0,4420(7)	0,3555(10)	0,112(8)
O5	1,2704(7)	0,4523(6)	0,3868(5)	0,033(3)
O6	0,7996(9)	0,3679(7)	0,4236(6)	0,060(4)
O7	0,8967(7)	0,2964(11)	0,5232(5)	0,078(5)
O8	0,6544(7)	0,4690(7)	0,3738(6)	0,048(3)
O9	0,8280(10)	0,4847(7)	0,3456(6)	0,063(4)
O10	0,9391(9)	0,3544(7)	0,3646(6)	0,059(4)
O11	0,7466(12)	0,4865(7)	0,4974(6)	0,074(5)
O12	0,9242(8)	0,4516(7)	0,2568(5)	0,042(3)
O13	0,8760(7)	0,2146(6)	0,4079(6)	0,046(3)
O14	1,0420(8)	0,2794(12)	0,4707(5)	0,086(6)
O15	1,2206(12)	0,4028(7)	0,5850(6)	0,076(5)
O16	1,0710(8)	0,3086(11)	0,5948(5)	0,072(5)
O17	0,9789(8)	0,5788(7)	0,3373(9)	0,102(7)
O18	0,8424(9)	0,4160(7)	0,5970(9)	0,101(7)
O19	0,9978(12)	0,6016(11)	0,4896(8)	0,020(4)
O20	0,8921(12)	0,5343(11)	0,4889(9)	0,023(4)
O21	0,9287(12)	0,4534(11)	0,4436(8)	0,020(4)
O22	1,0354(13)	0,5155(11)	0,4317(9)	0,027(5)
Ag1	0,56284(8)	0,91956(7)	0,48211(5)	0,0280(3)
Ag2	0,75544(8)	0,90618(7)	0,50341(5)	0,0301(3)
Ag3	0,57497(8)	0,82795(7)	0,36552(5)	0,0298(3)
C1	0,3583(10)	0,9674(9)	0,3873(7)	0,027(3)
C2	0,2679(11)	0,9502(10)	0,3531(7)	0,033(4)
C3	0,2178(12)	0,8910(10)	0,3761(8)	0,038(4)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
C4	0,2601(11)	0,8536(10)	0,4341(8)	0,039(4)
C5	0,3502(10)	0,8723(9)	0,4653(7)	0,029(4)
C6	0,3990(11)	0,8324(9)	0,5248(7)	0,030(4)
C7	0,3547(15)	0,7745(13)	0,5555(10)	0,062(6)
C8	0,4065(16)	0,7360(15)	0,6112(11)	0,074(6)
C9	0,4991(15)	0,7537(13)	0,6343(10)	0,067(6)
C10	0,5389(13)	0,8141(11)	0,6007(8)	0,046(4)
C11	0,9171(10)	1,0518(9)	0,5180(7)	0,031(4)
C12	0,9879(11)	1,1034(11)	0,5498(8)	0,041(4)
C13	1,0340(13)	1,0824(11)	0,6093(8)	0,048(5)
C14	1,0097(11)	1,0130(10)	0,6386(8)	0,038(4)
C15	0,9389(11)	0,9637(10)	0,6034(7)	0,034(4)
C16	0,9096(10)	0,8837(9)	0,6292(7)	0,030(4)
C17	0,9628(12)	0,8471(10)	0,6832(8)	0,042(4)
C18	0,9340(12)	0,7728(10)	0,7059(8)	0,041(4)
C19	0,8517(11)	0,7387(10)	0,6736(7)	0,036(4)
C20	0,8004(12)	0,7781(10)	0,6201(8)	0,038(4)
C21	0,3693(11)	0,8291(10)	0,2623(7)	0,033(4)
C22	0,2766(12)	0,8114(11)	0,2340(8)	0,043(4)
C23	0,2326(12)	0,7507(10)	0,2608(8)	0,038(4)
C24	0,2825(11)	0,7123(10)	0,3146(7)	0,035(4)
C25	0,3758(10)	0,7357(9)	0,3411(7)	0,026(3)
C26	0,4309(10)	0,6962(9)	0,3985(7)	0,028(3)
C27	0,3951(12)	0,6371(11)	0,4329(8)	0,043(4)
C28	0,4498(13)	0,6019(12)	0,4872(9)	0,051(5)
C29	0,5426(12)	0,6260(11)	0,5053(9)	0,047(5)
C30	0,5736(11)	0,6851(9)	0,4706(7)	0,031(4)
C31	0,6550(10)	0,9409(9)	0,4205(7)	0,024(3)
C32	0,6490(10)	0,9621(9)	0,3644(7)	0,030(4)
C33	0,6539(12)	1,0042(11)	0,3054(8)	0,042(4)
C34	0,569(2)	1,034(2)	0,2707(16)	0,141(13)
C35	0,736(2)	1,0684(18)	0,3235(14)	0,111(10)
C36	0,703(2)	0,952(2)	0,2661(16)	0,139(12)
C37	0,6843(13)	0,6979(12)	0,2803(9)	0,049(5)
C38	0,7384(13)	0,6288(12)	0,2635(9)	0,056(5)
N1	0,4008(8)	0,9301(7)	0,4413(5)	0,028(3)
N2	0,4902(9)	0,8503(8)	0,5479(6)	0,033(3)
N3	0,8931(8)	0,9829(8)	0,5445(6)	0,032(3)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
N4	0,8293(9)	0,8488(8)	0,5970(6)	0,034(3)
N5	0,4180(8)	0,7937(8)	0,3133(6)	0,030(3)
N6	0,5212(8)	0,7198(7)	0,4187(6)	0,029(3)
N7	0,6402(11)	0,7505(10)	0,2923(7)	0,059(4)

Tabelle A.32.: Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für **13** in „nasser“ Form.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Mo1	0,0264(7)	0,0218(7)	0,0230(7)	-0,0043(6)	0,0063(6)	-0,0086(6)
Mo2	0,0188(7)	0,0229(7)	0,0202(7)	-0,0003(5)	0,0020(5)	-0,0045(5)
Mo3	0,0322(8)	0,0246(7)	0,0257(7)	0,0059(6)	0,0103(6)	0,0106(6)
Mo4	0,0236(7)	0,0209(7)	0,0559(9)	-0,0082(7)	0,0174(7)	-0,0039(6)
Mo5	0,0336(8)	0,0217(7)	0,0237(7)	-0,0050(6)	-0,0070(6)	0,0059(6)
Mo6	0,0209(7)	0,0293(8)	0,0422(9)	0,0184(7)	-0,0034(6)	-0,0069(6)
Si1	0,019(3)	0,016(3)	0,023(3)	0,004(2)	0,004(2)	-0,003(2)
O1	0,157(14)	0,038(7)	0,037(7)	-0,012(6)	0,044(8)	-0,061(8)
O2	0,029(6)	0,035(6)	0,024(6)	0,008(5)	0,002(5)	-0,005(5)
O3	0,046(7)	0,037(7)	0,038(7)	-0,013(5)	-0,010(5)	0,017(5)
O4	0,038(8)	0,015(7)	0,24(2)	-0,008(9)	-0,060(10)	-0,006(6)
O5	0,038(6)	0,036(6)	0,030(6)	-0,009(5)	0,017(5)	-0,010(5)
O6	0,078(9)	0,047(8)	0,075(9)	0,047(7)	0,059(8)	0,045(7)
O7	0,018(6)	0,196(17)	0,018(6)	0,006(8)	0,002(5)	0,006(8)
O8	0,029(6)	0,044(7)	0,063(8)	0,027(6)	-0,007(6)	-0,010(5)
O9	0,090(10)	0,048(8)	0,076(9)	0,043(7)	0,071(8)	0,044(7)
O10	0,078(9)	0,042(7)	0,080(9)	0,037(7)	0,062(8)	0,034(7)
O11	0,160(15)	0,032(7)	0,044(8)	-0,008(6)	0,054(9)	-0,051(8)
O12	0,059(8)	0,044(7)	0,020(6)	0,007(5)	0,007(5)	0,019(6)
O13	0,037(6)	0,021(6)	0,086(9)	-0,019(6)	0,025(6)	-0,008(5)
O14	0,018(6)	0,216(19)	0,020(6)	0,009(9)	-0,004(5)	-0,022(9)
O15	0,177(16)	0,029(7)	0,041(7)	-0,021(6)	0,067(9)	-0,046(8)
O16	0,022(6)	0,176(16)	0,017(6)	-0,013(8)	-0,001(5)	-0,009(8)
O17	0,024(7)	0,028(7)	0,216(19)	-0,030(9)	-0,051(9)	0,007(6)
O18	0,034(7)	0,026(7)	0,199(18)	-0,019(9)	-0,064(9)	0,003(6)
O19	0,022(10)	0,025(10)	0,018(10)	-0,009(8)	0,014(8)	-0,016(8)
O20	0,008(9)	0,028(11)	0,031(11)	0,000(9)	0,000(8)	-0,008(8)
O21	0,013(9)	0,032(11)	0,017(10)	-0,008(9)	0,004(8)	-0,001(8)
O22	0,032(11)	0,021(11)	0,027(11)	0,004(9)	0,005(9)	0,002(9)
Ag1	0,0273(6)	0,0315(7)	0,0258(6)	0,0003(5)	0,0074(5)	-0,0050(5)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Ag2	0,0291(7)	0,0327(7)	0,0267(6)	-0,0022(5)	0,0029(5)	0,0048(5)
Ag3	0,0317(7)	0,0264(6)	0,0325(7)	-0,0038(5)	0,0100(5)	-0,0086(5)
N1	0,036(7)	0,030(7)	0,023(7)	-0,007(6)	0,015(6)	-0,009(6)
N2	0,049(8)	0,031(7)	0,025(7)	0,003(6)	0,017(6)	-0,009(6)
N3	0,026(7)	0,037(8)	0,031(7)	-0,016(6)	0,004(6)	0,008(6)
N4	0,049(8)	0,035(8)	0,022(7)	-0,005(6)	0,013(6)	0,012(7)
N5	0,029(7)	0,031(7)	0,029(7)	-0,006(6)	0,007(6)	-0,002(6)
N6	0,032(7)	0,015(6)	0,040(8)	-0,004(6)	0,010(6)	-0,002(5)
N7	0,062(10)	0,068(11)	0,049(10)	-0,018(9)	0,017(8)	0,019(9)

Tabelle A.33.: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsfaktoren (\AA^2) von **13** in „trockener“ Form. U_{eq} ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U_{eq}
Mo1	0,91494(15)	0,31017(13)	0,43414(10)	0,0310(6)
Mo2	0,75965(14)	0,48017(12)	0,42226(9)	0,0251(6)
Mo3	1,14238(15)	0,32437(13)	0,53551(10)	0,0357(7)
Mo4	1,18149(15)	0,46233(13)	0,41624(11)	0,0369(7)
Mo5	0,94232(16)	0,47489(13)	0,33361(10)	0,0357(7)
Mo6	0,93666(15)	0,34703(14)	0,59890(11)	0,0425(7)
Si1	1,0000	0,5000	0,5000	0,028(2)
O1	1,1836(16)	0,3663(11)	0,4570(8)	0,074(7)
O2	0,9162(10)	0,2755(9)	0,6483(7)	0,031(4)
O3	1,2059(12)	0,2393(9)	0,5452(8)	0,048(5)
O4	1,0825(15)	0,4435(12)	0,3538(15)	0,131(12)
O5	1,2716(11)	0,4507(10)	0,3801(7)	0,040(4)
O6	0,7945(13)	0,3727(10)	0,4266(8)	0,058(6)
O7	0,8895(12)	0,2996(17)	0,5231(8)	0,091(8)
O8	0,6489(11)	0,4748(10)	0,3802(8)	0,055(5)
O9	0,8250(15)	0,4907(11)	0,3485(9)	0,068(6)
O10	0,9339(12)	0,3582(9)	0,3648(9)	0,053(5)
O11	0,7435(16)	0,4908(10)	0,5014(8)	0,068(7)
O12	0,9195(12)	0,4571(10)	0,2560(7)	0,046(5)
O13	0,8660(11)	0,2213(9)	0,4072(9)	0,048(5)
O14	1,0382(12)	0,2833(18)	0,4683(8)	0,095(9)
O15	1,2211(17)	0,3999(10)	0,5793(9)	0,076(7)
O16	1,0677(12)	0,3073(17)	0,5912(8)	0,094(9)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
O17	0,9815(13)	0,5796(10)	0,3380(14)	0,108(10)
O18	0,8407(13)	0,4174(10)	0,5990(14)	0,118(12)
O19	0,9998(18)	0,6025(15)	0,4918(13)	0,019(7)
O20	0,8935(18)	0,5352(16)	0,4904(11)	0,017(7)
O21	0,9279(18)	0,4578(16)	0,4452(13)	0,021(7)
O22	1,0381(17)	0,5133(16)	0,4308(13)	0,021(7)
Ag1	0,56815(13)	0,92494(11)	0,48302(8)	0,0340(6)
Ag2	0,76225(13)	0,90985(11)	0,50265(9)	0,0356(6)
Ag3	0,57663(13)	0,83536(11)	0,36559(9)	0,0359(6)
N1	0,4040(13)	0,9301(11)	0,4414(9)	0,034(5)
N2	0,4957(14)	0,8519(11)	0,5476(9)	0,035(5)
N3	0,8962(12)	0,9911(13)	0,5426(8)	0,037(6)
N4	0,8357(13)	0,8574(12)	0,5973(9)	0,035(5)
N5	0,4261(13)	0,7968(11)	0,3071(9)	0,033(5)
N6	0,5242(13)	0,7251(11)	0,4155(9)	0,033(5)
N100	0,7273(12)	0,7691(10)	0,2926(7)	0,012(4)
C1	0,3613(15)	0,9672(14)	0,3897(11)	0,027(6)
C2	0,2732(17)	0,9478(16)	0,3550(12)	0,044(7)
C3	0,2224(18)	0,8897(15)	0,3780(12)	0,044(7)
C4	0,2664(16)	0,8520(15)	0,4360(11)	0,036(6)
C5	0,3556(16)	0,8713(14)	0,4634(10)	0,028(6)
C6	0,4052(18)	0,8293(15)	0,5229(11)	0,038(7)
C7	0,363(2)	0,7630(18)	0,5516(13)	0,059(8)
C8	0,414(2)	0,727(2)	0,6053(15)	0,075(10)
C9	0,509(2)	0,7501(19)	0,6300(15)	0,068(9)
C10	0,5436(19)	0,8157(16)	0,5986(12)	0,044(7)
C11	0,9181(16)	1,0596(15)	0,5161(11)	0,032(6)
C12	0,9879(17)	1,1131(17)	0,5475(12)	0,046(7)
C13	1,0333(19)	1,0915(17)	0,6068(12)	0,050(8)
C14	1,0087(18)	1,0237(16)	0,6360(13)	0,050(8)
C15	0,9397(18)	0,9711(16)	0,6028(13)	0,045(7)
C16	0,9136(17)	0,8935(15)	0,6282(11)	0,036(6)
C17	0,9700(18)	0,8551(16)	0,6830(12)	0,046(7)
C18	0,9432(19)	0,7798(17)	0,7041(13)	0,053(8)
C19	0,8586(18)	0,7439(18)	0,6720(12)	0,054(8)
C20	0,8092(17)	0,7861(16)	0,6174(11)	0,036(7)
C21	0,3774(17)	0,8339(15)	0,2576(11)	0,034(6)
C22	0,2887(18)	0,8154(15)	0,2322(12)	0,043(7)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
C23	0,2407(18)	0,7569(15)	0,2566(11)	0,040(7)
C24	0,2897(15)	0,7168(13)	0,3096(10)	0,025(6)
C25	0,3830(16)	0,7383(14)	0,3373(11)	0,030(6)
C26	0,4376(17)	0,6976(14)	0,3915(11)	0,031(6)
C27	0,3984(18)	0,6349(16)	0,4228(12)	0,045(7)
C28	0,4531(19)	0,5974(17)	0,4773(13)	0,055(8)
C29	0,5431(18)	0,6283(16)	0,4973(12)	0,047(7)
C30	0,5752(18)	0,6905(14)	0,4679(11)	0,035(6)
C31	0,6636(14)	0,9434(13)	0,4200(10)	0,021(5)
C32	0,6558(17)	0,9652(15)	0,3658(12)	0,038(7)
C33	0,6561(19)	1,0099(16)	0,3045(12)	0,046(7)
C34	0,585(3)	0,986(3)	0,254(2)	0,135(16)
C36	0,742(3)	1,008(3)	0,288(2)	0,127(15)
C35	0,623(3)	1,098(3)	0,311(2)	0,143(17)
C101	0,674(4)	0,743(3)	0,286(2)	0,134(17)
C102	0,6379(13)	0,6102(12)	0,2572(9)	0,013(5)

Tabelle A.34.: Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für **13** in „trockener“ Form.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Mo1	0,0326(14)	0,0313(14)	0,0290(13)	-0,0047(11)	0,0061(10)	-0,0116(11)
Mo2	0,0254(12)	0,0203(13)	0,0285(13)	0,0006(10)	0,0031(10)	-0,0037(10)
Mo3	0,0380(14)	0,0333(14)	0,0379(14)	0,0116(11)	0,0131(11)	0,0141(11)
Mo4	0,0281(13)	0,0202(13)	0,0656(17)	-0,0021(12)	0,0172(12)	-0,0021(10)
Mo5	0,0438(15)	0,0235(14)	0,0327(14)	0,0004(11)	-0,0086(11)	-0,0012(11)
Mo6	0,0260(13)	0,0429(16)	0,0538(16)	0,0255(13)	-0,0024(12)	-0,0095(11)
Si1	0,031(6)	0,027(6)	0,023(6)	0,004(5)	0,002(5)	-0,002(5)
O1	0,15(2)	0,038(12)	0,045(12)	-0,016(10)	0,047(13)	-0,040(12)
O2	0,030(9)	0,029(10)	0,032(9)	0,018(8)	0,008(7)	-0,014(8)
O3	0,059(12)	0,013(9)	0,058(12)	-0,004(8)	-0,019(9)	0,015(8)
O4	0,052(14)	0,033(13)	0,27(3)	0,024(17)	-0,063(18)	-0,009(11)
O5	0,043(11)	0,045(11)	0,041(10)	-0,001(9)	0,027(9)	-0,019(9)
O6	0,089(14)	0,036(11)	0,071(13)	0,032(10)	0,067(12)	0,033(10)
O7	0,033(11)	0,21(3)	0,027(11)	0,019(14)	-0,005(9)	0,011(14)
O8	0,034(10)	0,049(12)	0,068(13)	0,041(10)	-0,017(9)	-0,007(9)
O9	0,123(18)	0,043(12)	0,065(13)	0,030(10)	0,078(13)	0,027(12)
O10	0,065(12)	0,017(10)	0,095(15)	0,030(10)	0,058(11)	0,018(9)
O11	0,16(2)	0,018(10)	0,045(12)	-0,017(9)	0,060(13)	-0,033(11)
O12	0,059(12)	0,058(12)	0,024(10)	0,011(9)	0,017(8)	0,027(10)

Weiter auf der nächsten Seite

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
O13	0,038(10)	0,021(10)	0,092(14)	-0,017(9)	0,030(10)	-0,014(8)
O14	0,030(11)	0,24(3)	0,021(11)	0,003(14)	0,009(9)	-0,023(14)
O15	0,17(2)	0,021(11)	0,056(13)	-0,007(9)	0,075(14)	-0,034(12)
O16	0,027(11)	0,22(3)	0,029(11)	-0,007(14)	-0,004(9)	-0,004(14)
O17	0,033(11)	0,010(10)	0,24(3)	-0,023(14)	-0,053(15)	0,000(9)
O18	0,045(13)	0,004(10)	0,25(3)	0,012(13)	-0,087(16)	0,010(9)
O19	0,024(17)	0,000(16)	0,035(18)	-0,002(14)	0,012(14)	-0,011(13)
O20	0,026(19)	0,018(17)	0,008(15)	-0,006(13)	0,007(13)	-0,029(14)
O21	0,016(16)	0,011(16)	0,031(19)	0,010(15)	-0,009(15)	-0,004(14)
O22	0,008(15)	0,027(18)	0,030(18)	0,004(15)	0,006(13)	-0,010(13)
Ag1	0,0306(11)	0,0407(13)	0,0321(12)	0,0008(9)	0,0101(9)	-0,0068(9)
Ag2	0,0333(12)	0,0367(13)	0,0348(12)	-0,0042(10)	0,0025(9)	0,0061(9)
Ag3	0,0423(13)	0,0270(12)	0,0389(12)	-0,0024(9)	0,0100(10)	-0,0110(9)
N1	0,037(12)	0,023(12)	0,044(13)	-0,005(10)	0,012(11)	-0,014(10)
N2	0,059(14)	0,021(12)	0,024(12)	-0,007(10)	0,008(11)	-0,012(10)
N3	0,022(11)	0,062(16)	0,024(12)	-0,025(11)	-0,001(9)	0,005(10)
N4	0,025(12)	0,036(13)	0,039(13)	-0,009(11)	-0,006(10)	0,010(10)
N5	0,037(12)	0,029(12)	0,030(12)	-0,006(10)	-0,003(10)	-0,017(10)
N6	0,040(13)	0,027(12)	0,036(13)	-0,010(10)	0,016(11)	-0,005(10)

A.14. [Ag₈(bipy)₁₀(C≡C^tBu)₂][S₂Mo₁₈O₆₂] 14

Kristallzustand	nass
Summenformel	C ₁₂₂ H ₁₁₆ Ag ₈ Mo ₁₈ N ₂₄ O ₆₄ S ₂
Kristall	dunkelblaue Rhomben (0,01 x 0,10 x 0,01 mm ³)
Kristallsystem, Raumgruppe	monoklin, C2/c (Nr. 15)
Gitterkonstanten/Å, °	$a = 33,918(6)$, $b = 18,050(3)$, $c = 28,723(5)$, $\beta = 109,110(2)$
Volumen/Å ³	16615(5)
Formeleinheiten	4
Röntgendichte/g cm ⁻³	2,147
Temperatur	100 K
$2\theta_{max}$	33,86 °
hkl -Bereich	$-27 \leq h \leq 27$, $-14 \leq k \leq 14$, $-23 \leq l \leq 23$
F(000)	10280
Absorptionskoeffizient μ/mm^{-1}	2,333
Zahl der gemessenen Reflexe	24156
davon symmetrieunabhängig	4789 ($R_{int} = 0,0885$)
Anzahl der Parameter	723
Restelektronendichte/e·Å ⁻³ (max/min)	3,29/-1,23
R_1 ($I > 2\sigma(I)$)	0,0605
wR_2 ($I > 2\sigma(I)$)	0,1625
R_1 (alle Daten)	0,0831
wR_2 (alle Daten)	0,1881
Datenbank	-
freies Volumen	19,2 %
freies Volumen mit Lösungsmittel	10,3 %
Lösungsmittel pro Formeleinheit	1 DMF, 1 AN
Besonderheiten	N anisotrop verfeinert

Tabelle A.35.: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsfaktoren (Å²) von 14. U_{eq} ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U_{eq}
Mo1	0,42531(8)	0,07683(15)	0,88350(9)	0,0302(9)
Mo2	0,34935(8)	0,06849(15)	0,76870(9)	0,0272(9)
Mo4	0,39095(8)	-0,09294(15)	0,83084(9)	0,0288(9)
Mo5	0,41988(8)	-0,15655(15)	0,72287(9)	0,0282(9)
Mo6	0,50069(8)	0,18621(15)	0,66119(9)	0,0285(9)
Mo7	0,38042(8)	0,01973(15)	0,65878(9)	0,0268(9)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
Mo8	0,50335(8)	-0,15683(15)	0,66083(9)	0,0280(9)
Mo9	0,41414(8)	0,18748(15)	0,71911(9)	0,0286(9)
Mo10	0,46638(8)	0,02027(15)	0,59919(9)	0,0286(9)
S1	0,4557(2)	0,0170(5)	0,7801(3)	0,020(2)
O1	0,4661(6)	-0,0597(11)	0,7722(7)	0,040(6)
O2	0,4587(5)	-0,1597(9)	0,6898(6)	0,027(5)
O3	0,4191(5)	0,0215(11)	0,6281(6)	0,041(6)
O4	0,4574(5)	0,1924(9)	0,6882(6)	0,019(5)
O5	0,2993(6)	0,1004(11)	0,7538(6)	0,040(6)
O6	0,3787(5)	0,1533(9)	0,7554(6)	0,025(5)
O7	0,3516(5)	0,0289(10)	0,7121(6)	0,027(5)
O8	0,5401(5)	-0,1982(10)	0,7194(6)	0,033(5)
O9	0,3655(5)	-0,1600(9)	0,8498(6)	0,022(5)
O10	0,3353(5)	0,0103(9)	0,6104(6)	0,025(5)
O11	0,4530(5)	0,1498(10)	0,8626(6)	0,026(5)
O12	0,4222(5)	0,0164(9)	0,8048(6)	0,022(5)
O13	0,4888(6)	-0,2297(10)	0,6241(7)	0,041(6)
O14	0,3903(5)	-0,1258(10)	0,7694(6)	0,030(5)
O15	0,3733(5)	0,1007(10)	0,8388(6)	0,028(5)
O16	0,3457(5)	-0,0261(9)	0,7980(6)	0,023(5)
O17	0,5191(5)	0,0251(10)	0,5935(6)	0,029(5)
O18	0,4218(5)	0,1097(11)	0,9366(6)	0,034(5)
O19	0,5417(5)	0,2038(10)	0,7213(6)	0,031(5)
O20	0,3927(6)	-0,0766(11)	0,6822(6)	0,039(6)
O21	0,4369(5)	0,0121(9)	0,5406(6)	0,025(5)
O22	0,4744(5)	-0,0753(11)	0,6227(7)	0,048(6)
O23	0,3896(5)	-0,2286(10)	0,6991(6)	0,031(5)
O24	0,4049(5)	-0,0233(10)	0,8835(6)	0,030(5)
O25	0,4477(5)	-0,1280(10)	0,8547(6)	0,024(5)
O26	0,3828(6)	0,1264(11)	0,6664(7)	0,049(6)
O27	0,3931(5)	0,2721(10)	0,7025(7)	0,039(6)
O28	0,4964(5)	0,2709(10)	0,6350(7)	0,039(6)
O29	0,4400(6)	0,0561(12)	0,7330(8)	0,053(7)
O30	0,4929(6)	0,0575(11)	0,8122(8)	0,049(6)
O31	0,4673(5)	0,1249(11)	0,6082(7)	0,050(6)
Ag1	0,30613(7)	0,37971(13)	-0,06300(8)	0,0304(8)
Ag2	0,26610(7)	0,34288(13)	0,00340(8)	0,0296(8)
Ag3	0,30775(7)	0,47776(13)	0,06067(8)	0,0294(8)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
Ag4	0,26713(7)	0,66465(13)	0,01839(8)	0,0352(8)
N1	0,3501(8)	0,3471(16)	-0,1081(9)	0,059(9)
N2	0,2686(7)	0,3717(12)	-0,1413(7)	0,026(6)
N3	0,1975(7)	0,3304(12)	-0,0126(8)	0,026(6)
N4	0,2550(7)	0,2997(12)	0,0770(8)	0,026(6)
N5	0,3034(7)	0,5004(12)	0,1389(8)	0,028(7)
N6	0,2389(6)	0,5059(11)	0,0516(7)	0,014(6)
N7	0,2579(6)	0,7066(12)	0,0871(7)	0,027(7)
N8	0,1951(7)	0,7046(12)	-0,0012(8)	0,032(7)
N9	0,3437(6)	0,6012(13)	0,0520(9)	0,033(7)
N10	0,2833(7)	0,6036(11)	-0,0404(8)	0,025(6)
C1	0,3907(13)	0,335(2)	-0,0903(15)	0,078(12)
C2	0,4164(12)	0,3098(19)	-0,1164(13)	0,068(11)
C3	0,3957(11)	0,2961(19)	-0,1641(13)	0,069(11)
C4	0,3520(10)	0,3075(18)	-0,1848(13)	0,058(11)
C5	0,3312(9)	0,3346(16)	-0,1544(12)	0,030(8)
C6	0,2850(9)	0,3461(15)	-0,1746(11)	0,024(8)
C7	0,2635(9)	0,3377(15)	-0,2230(10)	0,031(8)
C8	0,2207(9)	0,3515(15)	-0,2402(11)	0,034(9)
C9	0,2026(9)	0,3771(15)	-0,2077(9)	0,025(8)
C10	0,2276(9)	0,3857(14)	-0,1577(10)	0,023(8)
C11	0,1698(10)	0,3423(17)	-0,0562(13)	0,051(10)
C12	0,1259(9)	0,3477(15)	-0,0641(11)	0,035(9)
C13	0,1125(9)	0,3366(15)	-0,0236(10)	0,030(8)
C14	0,1417(9)	0,3223(15)	0,0216(11)	0,037(9)
C15	0,1834(9)	0,3214(14)	0,0279(10)	0,023(8)
C16	0,2169(10)	0,3162(15)	0,0764(10)	0,030(9)
C17	0,2077(9)	0,3268(14)	0,1221(10)	0,028(8)
C18	0,2414(9)	0,3248(15)	0,1658(10)	0,030(8)
C19	0,2801(10)	0,3088(16)	0,1660(11)	0,042(9)
C20	0,2865(10)	0,2971(15)	0,1201(11)	0,034(8)
C21	0,3352(10)	0,4948(15)	0,1813(12)	0,038(9)
C22	0,3297(10)	0,4975(15)	0,2256(11)	0,041(9)
C23	0,2907(10)	0,5037(16)	0,2282(12)	0,046(10)
C24	0,2567(9)	0,5115(14)	0,1858(9)	0,022(8)
C25	0,2634(9)	0,5054(14)	0,1407(10)	0,020(8)
C26	0,2289(8)	0,5082(14)	0,0933(10)	0,016(8)
C27	0,1870(8)	0,5099(14)	0,0919(10)	0,022(8)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
C28	0,1552(9)	0,5136(14)	0,0467(10)	0,024(8)
C29	0,1660(8)	0,5091(13)	0,0048(10)	0,016(7)
C30	0,2087(9)	0,5068(14)	0,0083(11)	0,024(8)
C31	0,2888(9)	0,7255(14)	0,1295(10)	0,025(8)
C32	0,2827(8)	0,7595(13)	0,1694(9)	0,017(7)
C33	0,2427(9)	0,7744(16)	0,1683(10)	0,035(9)
C34	0,2104(8)	0,7540(13)	0,1261(9)	0,016(7)
C35	0,2192(9)	0,7220(14)	0,0871(9)	0,020(8)
C36	0,1850(8)	0,7043(15)	0,0405(11)	0,023(8)
C37	0,1439(8)	0,6908(14)	0,0380(10)	0,025(8)
C38	0,1139(9)	0,6748(14)	-0,0064(9)	0,024(8)
C39	0,1243(9)	0,6737(14)	-0,0495(10)	0,026(8)
C40	0,1656(9)	0,6869(14)	-0,0428(11)	0,022(8)
C41	0,3265(8)	0,3882(14)	0,0130(10)	0,022(8)
C42	0,3601(9)	0,3960(15)	0,0477(10)	0,030(8)
C43	0,4033(8)	0,3923(15)	0,0809(10)	0,027(8)
C44	0,4207(9)	0,4653(17)	0,1025(11)	0,050(10)
C45	0,4312(9)	0,3610(16)	0,0515(10)	0,040(9)
C46	0,4045(9)	0,3380(16)	0,1238(10)	0,044(9)
C47	0,2535(10)	0,5889(16)	-0,0842(11)	0,039(9)
C48	0,2632(9)	0,5576(16)	-0,1231(11)	0,039(9)
C49	0,3029(9)	0,5436(15)	-0,1201(10)	0,030(8)
C50	0,3345(10)	0,5558(16)	-0,0730(11)	0,043(9)
C51	0,3231(10)	0,5882(15)	-0,0350(10)	0,021(8)
C52	0,3545(8)	0,6113(14)	0,0125(10)	0,018(8)
C53	0,3934(9)	0,6370(15)	0,0137(11)	0,036(9)
C54	0,4204(9)	0,6589(15)	0,0577(10)	0,028(8)
C55	0,4077(8)	0,6545(14)	0,0992(10)	0,024(8)
C56	0,3691(9)	0,6231(15)	0,0952(11)	0,025(8)
O100	0,0520(10)	0,814(2)	0,0570(12)	0,139(12)
C101	-0,0055(10)	0,7508(19)	-0,0169(12)	0,063(11)
N102	0,0169(9)	0,7062(16)	0,0198(10)	0,063(9)
C103	0,0146(9)	0,6266(16)	0,0250(11)	0,045(9)
C104	0,0463(16)	0,743(3)	0,0597(19)	0,131(18)
N105	0,1698(13)	0,841(2)	0,2056(14)	0,114(13)
C107	0,0912(16)	0,831(3)	0,1771(18)	0,140(19)
C106	0,1364(18)	0,832(3)	0,1933(17)	0,110(17)

Tabelle A.36.: Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 14.

A. Kristallographische Daten

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Mo1	0,0185(19)	0,046(2)	0,025(2)	-0,0061(16)	0,0058(14)	-0,0003(15)
Mo2	0,018(2)	0,041(2)	0,0218(18)	-0,0007(15)	0,0053(14)	0,0033(15)
Mo4	0,0274(19)	0,035(2)	0,0268(19)	0,0009(15)	0,0124(15)	-0,0009(15)
Mo5	0,0200(19)	0,033(2)	0,0286(18)	0,0002(16)	0,0034(15)	0,0004(16)
Mo6	0,0224(19)	0,033(2)	0,0281(19)	0,0025(16)	0,0049(15)	-0,0020(14)
Mo7	0,0168(19)	0,042(2)	0,0206(18)	0,0008(15)	0,0051(16)	-0,0006(14)
Mo8	0,0248(19)	0,028(2)	0,0266(18)	0,0010(17)	0,0016(14)	0,0015(15)
Mo9	0,0278(19)	0,029(2)	0,0266(18)	-0,0034(15)	0,0056(15)	-0,0015(15)
Mo10	0,0189(19)	0,044(2)	0,021(2)	0,0031(15)	0,0045(15)	-0,0007(15)
S1	0,012(6)	0,036(7)	0,013(6)	0,004(5)	0,003(5)	-0,001(5)
O1	0,039(14)	0,029(17)	0,064(16)	-0,002(12)	0,031(12)	-0,003(12)
O2	0,033(13)	0,013(12)	0,040(13)	0,002(10)	0,021(11)	0,017(9)
O3	0,009(12)	0,087(17)	0,022(12)	-0,001(12)	-0,003(10)	-0,007(11)
O4	0,020(12)	0,020(12)	0,022(11)	0,007(9)	0,015(9)	0,005(9)
O5	0,035(14)	0,065(16)	0,022(12)	0,004(11)	0,011(10)	0,011(11)
O6	0,008(11)	0,036(13)	0,033(12)	-0,002(10)	0,009(9)	0,003(9)
O7	0,010(12)	0,044(13)	0,032(13)	0,003(11)	0,015(10)	-0,001(10)
O8	0,022(12)	0,034(13)	0,040(13)	0,013(11)	0,007(10)	0,000(10)
O9	0,019(12)	0,019(12)	0,031(12)	0,002(10)	0,011(9)	-0,005(9)
O10	0,004(12)	0,041(13)	0,027(12)	-0,014(10)	0,002(10)	0,003(9)
O11	0,006(11)	0,043(14)	0,031(12)	-0,007(10)	0,011(9)	-0,014(10)
O12	0,020(13)	0,027(13)	0,013(11)	-0,002(10)	-0,004(11)	-0,001(10)
O13	0,042(14)	0,044(15)	0,040(13)	-0,027(12)	0,018(11)	-0,028(11)
O14	0,010(11)	0,055(14)	0,016(12)	-0,004(11)	-0,006(9)	-0,006(10)
O15	0,017(12)	0,042(14)	0,027(12)	0,002(10)	0,011(10)	0,006(10)
O16	0,012(12)	0,018(12)	0,036(12)	-0,007(10)	0,004(9)	0,005(9)
O17	0,028(13)	0,039(13)	0,021(12)	0,012(10)	0,011(10)	0,003(10)
O18	0,024(13)	0,064(15)	0,012(12)	-0,016(11)	0,005(9)	-0,009(11)
O19	0,027(13)	0,027(13)	0,032(13)	-0,009(10)	0,002(11)	0,001(10)
O20	0,040(14)	0,062(16)	0,019(12)	-0,006(12)	0,014(10)	0,014(12)
O21	0,022(12)	0,044(14)	0,009(12)	0,003(10)	0,007(10)	0,016(10)
O22	0,020(13)	0,075(18)	0,051(14)	0,014(13)	0,016(11)	0,008(12)
O23	0,024(13)	0,033(13)	0,040(13)	-0,012(11)	0,016(10)	-0,027(11)
O24	0,028(13)	0,041(14)	0,024(12)	-0,019(11)	0,012(10)	-0,018(10)
O25	0,015(12)	0,040(13)	0,021(11)	0,004(10)	0,008(9)	0,004(10)
O26	0,044(14)	0,064(17)	0,049(14)	-0,022(13)	0,028(12)	-0,031(12)
O27	0,021(13)	0,049(15)	0,050(14)	0,008(12)	0,017(10)	0,009(11)
O28	0,033(14)	0,032(14)	0,053(14)	0,028(12)	0,015(11)	0,023(10)

Weiter auf der nächsten Seite

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
O29	0,028(14)	0,081(18)	0,053(17)	0,012(15)	0,018(12)	0,008(13)
O30	0,045(16)	0,046(16)	0,075(17)	-0,029(14)	0,045(14)	-0,022(13)
O31	0,005(12)	0,069(17)	0,065(15)	-0,016(13)	-0,002(11)	-0,024(11)
Ag1	0,0230(16)	0,0413(18)	0,0258(16)	-0,0015(13)	0,0066(12)	-0,0007(12)
Ag2	0,0234(16)	0,0367(17)	0,0307(16)	-0,0001(13)	0,0114(12)	-0,0037(12)
Ag3	0,0222(16)	0,0377(17)	0,0267(15)	-0,0051(13)	0,0061(12)	-0,0019(12)
Ag4	0,0240(16)	0,0448(18)	0,0356(16)	-0,0093(14)	0,0080(12)	-0,0051(13)
N1	0,027(19)	0,11(3)	0,030(18)	-0,016(17)	-0,008(14)	0,017(16)
N2	0,015(17)	0,046(18)	0,020(15)	0,005(13)	0,010(13)	0,009(13)
N3	0,027(16)	0,035(17)	0,014(15)	0,012(12)	0,005(13)	0,003(12)
N4	0,017(16)	0,029(16)	0,030(16)	-0,004(13)	0,005(13)	0,007(12)
N5	0,009(16)	0,045(18)	0,014(15)	0,000(12)	-0,018(13)	0,000(12)
N6	0,001(14)	0,038(17)	0,012(15)	0,000(12)	0,016(13)	-0,002(11)
N7	0,000(15)	0,051(18)	0,023(16)	0,020(13)	-0,005(12)	0,011(12)
N8	0,042(18)	0,037(17)	0,012(15)	-0,003(13)	0,002(14)	-0,010(13)
N9	0,013(15)	0,048(18)	0,038(18)	-0,004(14)	0,008(14)	-0,012(13)
N10	0,018(17)	0,018(16)	0,027(16)	-0,002(12)	-0,009(13)	0,003(12)

A.15. $[\text{Ag}_8(\text{bipy})_{10}(\text{C}\equiv\text{C}^t\text{Bu})_2][\text{P}_2\text{W}_{18}\text{O}_{62}]$ 15

Kristallzustand	nass
Summenformel	$\text{C}_{118}\text{H}_{107}\text{Ag}_8\text{N}_{23}\text{O}_{62}\text{P}_2\text{W}_{18}$
Kristall	farblose Prismen (0,10 x 0,02 x 0,02 mm ³)
Kristallsystem, Raumgruppe	monoklin, C2/c (Nr. 15)
Gitterkonstanten/Å, °	$a = 33,841(3)$, $b = 18,068(1)$, $c = 28,347(2)$, $\beta = 109,378(1)$
Volumen/Å ³	16351(2)
Formeleinheiten	4
Röntgendichte/g cm ⁻³	2,873
Temperatur	100 K
$2\theta_{max}$	43,46 °
<i>hkl</i> -Bereich	$-35 \leq h \leq 35$, $-18 \leq k \leq 18$, $-29 \leq l \leq 29$
F(000)	12840
Absorptionskoeffizient μ/mm^{-1}	13,641
Zahl der gemessenen Reflexe	43945
davon symmetrieunabhängig	9662 ($R_{int} = 0,0654$)
Anzahl der Parameter	699
Restelektronendichte/e·Å ⁻³ (max/min)	4,60/-2,18
R_1 ($I > 2\sigma(I)$)	0,0605
wR_2 ($I > 2\sigma(I)$)	0,1625
R_1 (alle Daten)	0,0831
wR_2 (alle Daten)	0,1881
Datenbank	-
freies Volumen	18,6 %
freies Volumen mit Lösungsmittel	10,9 %
Lösungsmittel pro Formeleinheit	2 AN
Besonderheiten	

Tabelle A.37.: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsfaktoren (Å²) von **15**. U_{eq} ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U_{eq}
W1	0,08256(3)	0,34186(5)	0,27991(3)	0,0209(2)
W2	-0,00025(3)	0,34173(5)	0,15808(3)	0,0214(2)
W3	0,08099(3)	0,67950(5)	0,27654(3)	0,0233(2)
W4	0,10680(3)	0,40136(5)	0,16718(3)	0,0246(3)
W5	0,14669(3)	0,56094(5)	0,22713(3)	0,0245(3)
W6	-0,00313(3)	0,67812(5)	0,33596(3)	0,0233(2)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
W7	0,11922(3)	0,50320(5)	0,33841(3)	0,0208(2)
W8	0,07140(3)	0,56535(5)	0,11351(3)	0,0274(3)
W9	-0,03592(3)	0,50407(5)	0,10033(3)	0,0230(2)
P1	0,04375(15)	0,5084(3)	0,21780(17)	0,0131(12)
O1	0,1199(4)	0,5971(6)	0,1606(4)	0,031(4)
O2	0,0780(4)	0,5083(7)	0,1917(5)	0,017(3)
O3	0,1966(4)	0,5927(8)	0,2448(5)	0,035(4)
O4	0,1322(4)	0,3324(8)	0,1469(5)	0,028(4)
O6	0,0887(6)	0,4614(9)	0,1143(5)	0,068(7)
O7	0,1037(4)	0,2562(7)	0,2940(5)	0,025(3)
O8	0,1092(4)	0,3687(8)	0,2321(5)	0,023(3)
O9	0,1171(4)	0,6417(7)	0,2434(5)	0,025(3)
O10	0,1108(4)	0,7515(7)	0,3055(6)	0,033(4)
O11	0,0452(4)	0,6399(8)	0,1378(5)	0,027(3)
O12	0,0352(4)	0,6915(8)	0,3025(5)	0,029(4)
O13	0,0339(4)	0,3237(8)	0,2247(5)	0,030(4)
O14	0,1237(4)	0,3987(8)	0,3299(5)	0,033(4)
O15	0,0619(4)	0,4674(7)	0,2671(5)	0,027(3)
O16	0,1645(4)	0,5153(8)	0,3879(5)	0,028(4)
O17	0,0812(4)	0,4902(8)	0,3727(5)	0,028(4)
O18	0,1450(4)	0,5183(7)	0,2857(5)	0,025(3)
O19	0,0472(4)	0,7247(8)	0,2170(5)	0,029(4)
O20	0,0105(5)	0,7508(8)	0,3761(5)	0,036(4)
O21	0,1523(4)	0,4629(9)	0,2067(8)	0,074(7)
O22	0,0508(4)	0,3678(7)	0,1443(5)	0,026(3)
O23	0,0732(4)	0,6003(8)	0,0591(6)	0,036(4)
O24	0,0173(4)	0,5180(7)	0,0934(5)	0,027(3)
O25	-0,0313(4)	0,5985(8)	0,1276(5)	0,033(4)
O26	-0,0664(4)	0,5176(8)	0,0393(5)	0,029(4)
O27	-0,0301(5)	0,3983(9)	0,1002(5)	0,040(4)
O28	-0,0064(4)	0,2555(7)	0,1329(5)	0,026(3)
O29	-0,0477(4)	0,3421(7)	0,1794(5)	0,026(3)
O30	0,0998(4)	0,6001(8)	0,3220(5)	0,034(4)
O31	0,0054(4)	0,4666(8)	0,1822(5)	0,022(3)
O32	0,0336(4)	0,5882(8)	0,2255(5)	0,028(4)
Ag1	0,73224(5)	0,66106(9)	0,98295(6)	0,0317(4)
Ag2	0,68937(5)	0,47912(9)	0,93801(6)	0,0280(4)
Ag3	0,73043(5)	0,34016(9)	0,99041(6)	0,0261(4)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
Ag4	0,69383(5)	0,37442(10)	1,06094(6)	0,0332(4)
N1	0,8051(5)	0,7014(9)	1,0037(6)	0,027(4)
N2	0,7436(5)	0,7059(9)	0,9135(6)	0,022(4)
N3	0,7594(5)	0,5056(8)	0,9481(6)	0,017(4)
N4	0,6938(5)	0,5048(8)	0,8595(6)	0,021(4)
N5	0,7988(5)	0,3260(8)	1,0033(5)	0,016(4)
N6	0,7385(5)	0,3039(9)	0,9138(6)	0,022(4)
N7	0,6551(5)	0,6045(9)	0,9473(6)	0,028(4)
N8	0,7159(5)	0,6002(9)	1,0414(6)	0,026(4)
N9	0,7295(6)	0,3646(10)	1,1410(6)	0,032(5)
N10	0,6475(6)	0,3419(10)	1,1033(7)	0,039(5)
C1	0,8348(7)	0,6830(12)	1,0463(8)	0,030(5)
C2	0,8754(7)	0,6733(11)	1,0520(8)	0,025(5)
C3	0,8870(7)	0,6778(12)	1,0112(8)	0,037(6)
C4	0,8572(6)	0,6929(11)	0,9648(8)	0,025(5)
C5	0,8162(6)	0,7045(11)	0,9626(7)	0,022(5)
C6	0,7830(6)	0,7217(10)	0,9146(7)	0,018(5)
C7	0,7899(7)	0,7558(11)	0,8749(8)	0,029(5)
C8	0,7578(6)	0,7762(11)	0,8326(7)	0,025(5)
C9	0,7176(7)	0,7604(12)	0,8317(8)	0,033(6)
C10	0,7131(7)	0,7261(11)	0,8722(7)	0,027(5)
C11	0,7900(6)	0,5054(10)	0,9904(7)	0,017(5)
C12	0,8320(6)	0,5088(10)	0,9956(7)	0,016(5)
C13	0,8426(7)	0,5154(11)	0,9543(7)	0,025(5)
C14	0,8105(6)	0,5170(10)	0,9072(7)	0,020(5)
C15	0,7687(6)	0,5105(10)	0,9049(7)	0,017(5)
C16	0,7333(7)	0,5114(11)	0,8561(8)	0,025(5)
C17	0,7404(8)	0,5097(12)	0,8118(9)	0,039(6)
C18	0,7062(7)	0,5040(12)	0,7687(9)	0,038(6)
C19	0,6676(8)	0,5011(13)	0,7704(10)	0,046(7)
C20	0,6623(8)	0,5012(12)	0,8189(9)	0,039(6)
C21	0,8281(6)	0,3331(11)	1,0483(8)	0,026(5)
C22	0,8708(6)	0,3384(11)	1,0567(8)	0,025(5)
C23	0,8823(7)	0,3330(12)	1,0134(8)	0,033(6)
C24	0,8527(7)	0,3271(12)	0,9679(8)	0,030(5)
C25	0,8110(6)	0,3244(10)	0,9632(7)	0,017(4)
C26	0,7773(6)	0,3170(10)	0,9134(7)	0,018(5)
C27	0,7840(7)	0,3326(11)	0,8696(8)	0,030(5)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
C28	0,7516(7)	0,3286(12)	0,8235(8)	0,034(6)
C29	0,7110(7)	0,3131(12)	0,8251(9)	0,037(6)
C30	0,7077(7)	0,3005(11)	0,8714(7)	0,028(5)
C31	0,6271(7)	0,6276(12)	0,9048(8)	0,029(5)
C32	0,5897(7)	0,6544(12)	0,9004(8)	0,033(6)
C33	0,5774(7)	0,6552(12)	0,9423(8)	0,033(6)
C34	0,6054(6)	0,6316(11)	0,9874(8)	0,029(5)
C35	0,6448(7)	0,6072(12)	0,9892(8)	0,028(5)
C36	0,6758(6)	0,5868(11)	1,0373(7)	0,025(5)
C37	0,6646(7)	0,5517(12)	1,0747(8)	0,036(6)
C38	0,6961(7)	0,5366(13)	1,1207(9)	0,038(6)
C39	0,7366(7)	0,5520(12)	1,1250(8)	0,031(5)
C40	0,7444(7)	0,5837(11)	1,0865(8)	0,030(5)
C41	0,7724(6)	0,3783(11)	1,1593(7)	0,024(5)
C42	0,7965(7)	0,3758(12)	1,2088(8)	0,033(6)
C43	0,7750(8)	0,3518(13)	1,2419(9)	0,044(6)
C44	0,7321(7)	0,3381(11)	1,2241(8)	0,029(5)
C45	0,7118(7)	0,3439(12)	1,1734(8)	0,035(6)
C46	0,6662(7)	0,3306(13)	1,1518(9)	0,037(6)
C47	0,6458(15)	0,298(2)	1,1759(17)	0,124(15)
C48	0,6021(16)	0,286(3)	1,1574(18)	0,140(17)
C49	0,5804(11)	0,3035(17)	1,1080(12)	0,075(9)
C50	0,6054(8)	0,3253(14)	1,0811(10)	0,048(7)
C51	0,6699(7)	0,3869(12)	0,9827(8)	0,027(5)
C52	0,6362(7)	0,3973(12)	0,9497(8)	0,028(5)
C53	0,5930(7)	0,3921(12)	0,9155(8)	0,033(6)
C54	0,5747(7)	0,4662(12)	0,8944(8)	0,037(6)
C55	0,5660(8)	0,3626(14)	0,9465(9)	0,045(6)
C56	0,5924(7)	0,3399(12)	0,8744(8)	0,034(6)
C101	0,8708(9)	0,8394(14)	0,8169(9)	0,046(7)
C102	0,9166(10)	0,8201(19)	0,8343(12)	0,088(11)
C104	0,9836(10)	0,6385(17)	0,9798(12)	0,002(7)
C105	0,9812(12)	0,711(2)	0,9803(14)	0,018(9)
N100	0,8360(8)	0,8514(13)	0,8048(8)	0,061(6)
N103	0,9804(12)	0,771(2)	0,9820(14)	0,043(10)
N100	0,8360(8)	0,8514(13)	0,8048(8)	0,061(6)
C101	0,8708(9)	0,8394(14)	0,8169(9)	0,046(7)
C102	0,9166(10)	0,8201(19)	0,8343(12)	0,088(11)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
N103	0,9804(12)	0,771(2)	0,9820(14)	0,043(10)
C104	0,9836(10)	0,6385(17)	0,9798(12)	0,002(7)
C105	0,9812(12)	0,711(2)	0,9803(14)	0,018(9)

Tabelle A.38.: Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für **15**.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
W1	0,0185(5)	0,0223(5)	0,0223(5)	0,0015(4)	0,0071(4)	0,0019(4)
W2	0,0185(5)	0,0243(5)	0,0213(5)	-0,0040(4)	0,0063(4)	-0,0007(4)
W3	0,0197(5)	0,0226(5)	0,0283(5)	-0,0017(4)	0,0086(4)	-0,0020(4)
W4	0,0212(5)	0,0311(6)	0,0229(5)	-0,0008(4)	0,0093(4)	0,0015(4)
W5	0,0198(5)	0,0309(6)	0,0236(5)	0,0009(4)	0,0083(4)	-0,0015(4)
W6	0,0192(5)	0,0237(5)	0,0272(5)	-0,0064(4)	0,0077(4)	-0,0023(4)
W7	0,0146(5)	0,0300(5)	0,0172(5)	-0,0005(4)	0,0045(4)	-0,0002(4)
W8	0,0205(5)	0,0384(6)	0,0240(5)	0,0073(4)	0,0086(4)	0,0031(4)
W9	0,0161(5)	0,0355(6)	0,0166(5)	0,0021(4)	0,0046(4)	0,0011(4)
P1	0,010(3)	0,019(3)	0,010(3)	0,002(2)	0,003(2)	0,001(2)
O1	0,050(10)	0,000(7)	0,002(7)	0,026(5)	-0,046(6)	-0,030(6)
O2	0,007(7)	0,026(8)	0,016(7)	0,001(6)	0,002(6)	0,000(6)
O3	0,023(9)	0,051(10)	0,029(9)	-0,006(7)	0,005(7)	-0,007(7)
O4	0,021(8)	0,032(9)	0,041(9)	0,005(7)	0,022(7)	0,003(7)
O6	0,117(16)	0,052(11)	0,000(7)	-0,019(7)	-0,028(8)	0,092(11)
O7	0,021(8)	0,025(8)	0,029(8)	0,003(6)	0,009(7)	0,003(6)
O8	0,007(7)	0,040(9)	0,020(8)	-0,008(6)	0,003(6)	-0,001(6)
O9	0,025(8)	0,028(9)	0,020(8)	0,006(6)	0,006(6)	-0,005(6)
O10	0,022(9)	0,022(8)	0,051(10)	-0,004(7)	0,008(7)	-0,007(7)
O11	0,016(8)	0,040(9)	0,028(8)	0,008(7)	0,010(7)	0,007(7)
O12	0,035(9)	0,027(9)	0,028(8)	-0,012(7)	0,014(7)	-0,007(7)
O13	0,029(9)	0,030(9)	0,034(9)	-0,001(7)	0,014(7)	-0,008(7)
O14	0,024(9)	0,043(10)	0,036(9)	-0,008(7)	0,017(7)	-0,005(7)
O15	0,033(9)	0,022(8)	0,026(8)	-0,002(6)	0,008(7)	0,002(7)
O16	0,010(8)	0,049(10)	0,020(8)	-0,006(7)	0,000(6)	-0,004(7)
O17	0,002(7)	0,063(11)	0,018(8)	-0,002(7)	0,003(6)	0,008(7)
O18	0,010(8)	0,038(9)	0,022(8)	-0,016(6)	-0,002(6)	0,003(6)
O19	0,023(9)	0,022(9)	0,051(10)	0,004(7)	0,024(8)	0,000(6)
O20	0,038(10)	0,036(10)	0,039(9)	-0,026(7)	0,019(8)	-0,010(7)
O21	0,000(8)	0,025(10)	0,151(19)	-0,055(11)	-0,037(9)	0,024(7)
O22	0,033(9)	0,029(9)	0,019(8)	0,002(6)	0,012(7)	0,003(7)

Weiter auf der nächsten Seite

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
O23	0,017(9)	0,046(10)	0,048(10)	-0,006(8)	0,012(7)	-0,003(7)
O24	0,023(9)	0,034(9)	0,021(8)	0,010(6)	0,004(7)	0,008(7)
O25	0,023(9)	0,037(10)	0,043(10)	0,007(7)	0,015(7)	-0,002(7)
O26	0,021(9)	0,043(10)	0,024(8)	-0,001(7)	0,010(7)	-0,001(7)
O27	0,039(10)	0,046(11)	0,038(10)	-0,003(8)	0,018(8)	-0,010(8)
O28	0,029(9)	0,025(8)	0,022(8)	-0,014(6)	0,006(7)	0,002(7)
O29	0,034(9)	0,027(9)	0,023(8)	-0,009(6)	0,019(7)	-0,003(7)
O30	0,034(10)	0,029(9)	0,042(10)	0,002(7)	0,018(8)	-0,005(7)
O31	0,016(8)	0,036(9)	0,020(8)	0,005(6)	0,013(6)	0,003(6)
O32	0,037(9)	0,032(9)	0,026(8)	0,001(7)	0,023(7)	-0,004(7)
Ag1	0,0252(10)	0,0386(11)	0,0326(10)	0,0067(8)	0,0114(8)	0,0033(8)
Ag2	0,0197(9)	0,0352(11)	0,0289(10)	0,0005(8)	0,0077(8)	0,0003(7)
Ag3	0,0219(10)	0,0301(10)	0,0289(9)	-0,0007(7)	0,0117(7)	0,0009(7)
Ag4	0,0294(11)	0,0450(12)	0,0259(10)	-0,0015(8)	0,0100(8)	0,0049(8)

A.16. $\{[\text{Ag}_6(\text{bipy})_4(\text{C}\equiv\text{C}^t\text{Bu})_2(\text{C}_3\text{H}_7\text{NO})][\text{Mo}_8\text{O}_{26}]\}_n$ 16

Kristallzustand	nass	trocken
Summenformel	$C_{56}H_{50}Ag_6Mo_8N_{10}O_{27}$	$C_{56}H_{50}Ag_6Mo_8N_{10}O_{27}$
Kristall	farblose Rhomben ($0,05 \times 0,02 \times 0,02 \text{ mm}^3$)	farblose Rhomben ($0,10 \times 0,05 \times 0,05 \text{ mm}^3$)
Kristallsystem, Raumgruppe	monokin, $C2/c$ (Nr.)	monokin, $C2/c$ (Nr.)
Gitterkonstanten/ \AA , °	$a = 23,986(2)$, $b = 12,391(1)$, $c = 25,891(2)$, $\beta = 108,593(1)$	$a = 23,987(2)$, $b = 12,389(1)$, $c = 25,889(2)$, $\beta = 108,610(1)$
Volumen/ \AA^3	7394(1)	7291(1)
Formeleinheiten	4	4
Röntgengichte/ g cm^{-3}	2,468	2,469
Temperatur	100 K	100K
$2\theta_{max}$	47,74 °	50,80 °
hkl -Bereich	$-27 \leq h \leq 27$, $-14 \leq k \leq 14$, $-29 \leq l \leq 19$	$-28 \leq h \leq 28$, $-14 \leq k \leq 14$, $-31 \leq l \leq 31$
F(000)	5160	5160
Absorptionskoeffizient μ/mm^{-1}	2,978	2,979
Zahl der gemessenen Reflexe	23702	26968
davon symmetrieunabhängig	5628 ($R_{int} = 0,0524$)	6717 ($R_{int} = 0,0403$)
Anzahl der Parameter	471	471
Restelektronendichte/ $e\text{-\AA}^{-3}$ (max/min)	2,78/-0,91	2,86/-1,21
R_1 ($I > 2\sigma(I)$)	0,0513	0,0502
wR_2 ($I > 2\sigma(I)$)	0,1307	0,1316
R_1 (alle Daten)	0,0653	0,0602
wR_2 (alle Daten)	0,1461	0,1414
Datenbank	-	-
freies Volumen	9,6 %	9,5 %
freies Volumen mit Lösungsmittel	3,3 %	3,2 %
Lösungsmittel pro Formeleinheit	1 DMF	1 DMF
Besonderheiten	DMF ohne H Atome	DMF ohne H Atome

A. Kristallographische Daten

Tabelle A.39.: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsfaktoren (\AA^2) von **16** in „nasser“ Form. U_{eq} ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U_{eq}
Mo1	-0,06557(4)	0,56038(7)	0,07030(4)	0,0276(2)
Mo2	-0,03370(4)	0,37194(7)	-0,00121(4)	0,0269(2)
Mo3	0,10372(4)	0,39265(7)	0,06632(4)	0,0277(2)
Mo4	0,07331(4)	0,58261(7)	0,13833(4)	0,0285(2)
O1	-0,0688(3)	0,4551(6)	0,1131(3)	0,0345(17)
O2	-0,0725(3)	0,3196(5)	-0,0662(3)	0,0277(15)
O3	-0,0430(3)	0,2783(6)	0,0424(3)	0,0309(16)
O4	0,0178(3)	0,4875(5)	0,0556(3)	0,0277(16)
O5	0,1129(3)	0,6736(6)	0,1845(3)	0,0365(18)
O6	-0,0940(3)	0,4769(5)	0,0009(3)	0,0273(15)
O7	-0,1252(3)	0,6374(6)	0,0665(3)	0,0347(17)
O8	0,0611(3)	0,4771(6)	0,1766(3)	0,0355(17)
O9	0,0460(3)	0,3385(5)	-0,0037(3)	0,0315(17)
O10	-0,0044(3)	0,6434(5)	0,1176(3)	0,0297(16)
O11	0,1319(3)	0,5113(6)	0,1146(3)	0,0318(16)
O12	0,1670(3)	0,3481(6)	0,0572(3)	0,0371(18)
O13	0,0889(3)	0,3015(6)	0,1100(3)	0,0353(17)
Ag1	0,05945(3)	0,16939(6)	0,27695(3)	0,0282(2)
Ag2	0,00028(4)	0,32665(6)	0,16822(4)	0,0389(3)
Ag3	0,08649(3)	0,17226(7)	0,39525(3)	0,0351(2)
C1	0,1595(5)	0,3049(9)	0,2510(4)	0,034(3)
C2	0,2137(5)	0,3327(9)	0,2471(5)	0,043(3)
C3	0,2593(5)	0,2608(10)	0,2658(5)	0,042(3)
C4	0,2488(4)	0,1643(8)	0,2879(4)	0,028(2)
C5	0,1932(4)	0,1413(8)	0,2916(4)	0,024(2)
C6	0,1793(4)	0,0387(8)	0,3137(4)	0,025(2)
C7	0,2222(4)	-0,0310(8)	0,3450(4)	0,030(2)
C8	0,2048(5)	-0,1270(8)	0,3627(4)	0,032(2)
C9	0,1460(5)	-0,1505(9)	0,3507(5)	0,038(3)
C10	0,1065(5)	-0,0765(9)	0,3200(4)	0,037(3)
C11	0,1952(5)	0,3326(8)	0,3952(5)	0,035(3)
C12	0,2505(5)	0,3605(9)	0,3967(5)	0,036(3)
C13	0,2960(5)	0,2878(9)	0,4203(5)	0,040(3)
C14	0,2839(4)	0,1916(9)	0,4413(4)	0,034(3)
C15	0,2258(4)	0,1711(8)	0,4391(4)	0,028(2)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
C16	0,2093(4)	0,0703(9)	0,4616(4)	0,029(2)
C17	0,2513(4)	-0,0044(8)	0,4908(4)	0,029(2)
C18	0,2344(5)	-0,0957(9)	0,5104(4)	0,036(3)
C19	0,1748(5)	-0,1161(10)	0,4999(5)	0,042(3)
C20	0,1364(5)	-0,0416(9)	0,4705(5)	0,037(3)
C21	0,0000(4)	0,1532(8)	0,1751(4)	0,026(2)
C22	0,0267(4)	0,0938(8)	0,1534(4)	0,024(2)
C23	0,0607(5)	0,0191(9)	0,1297(4)	0,034(3)
C24	0,0440(5)	0,0404(9)	0,0687(4)	0,037(3)
C25	0,1275(5)	0,0402(12)	0,1565(5)	0,054(4)
C26	0,0445(7)	-0,0964(9)	0,1390(6)	0,062(4)
C100	0,0000	0,508(3)	0,2500	0,119(10)
C102	0,0000	0,716(2)	0,2500	0,076(6)
C103	0,0919(18)	0,588(3)	0,2915(16)	0,226(17)
N1	0,1490(3)	0,2148(6)	0,2733(3)	0,0237(18)
N2	0,1219(3)	0,0143(7)	0,3017(3)	0,0270(19)
N3	0,1817(3)	0,2399(7)	0,4146(3)	0,029(2)
N4	0,1517(4)	0,0498(7)	0,4507(3)	0,033(2)
O100	0,0000	0,4208(10)	0,2500	0,092(6)
C100	0,0000	0,508(3)	0,2500	0,119(10)
N101	0,0278(11)	0,601(2)	0,2634(12)	0,188(11)
C102	0,0000	0,716(2)	0,2500	0,076(6)
C103	0,0919(18)	0,588(3)	0,2915(16)	0,226(17)

Tabelle A.40.: Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für **16** in „nasser“ Form.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Mo1	0,0227(5)	0,0279(5)	0,0317(5)	-0,0011(4)	0,0077(4)	0,0001(4)
Mo2	0,0221(5)	0,0238(5)	0,0332(5)	-0,0006(4)	0,0067(4)	-0,0017(4)
Mo3	0,0213(5)	0,0268(5)	0,0308(5)	-0,0007(4)	0,0024(4)	-0,0017(4)
Mo4	0,0219(5)	0,0272(5)	0,0340(5)	-0,0007(4)	0,0057(4)	0,0006(4)
O1	0,024(4)	0,038(4)	0,041(4)	-0,001(3)	0,011(3)	-0,008(3)
O2	0,021(4)	0,029(4)	0,030(4)	0,003(3)	0,003(3)	-0,002(3)
O3	0,019(4)	0,033(4)	0,044(4)	0,001(3)	0,016(3)	-0,002(3)
O4	0,017(3)	0,025(4)	0,040(4)	-0,004(3)	0,007(3)	0,001(3)
O5	0,028(4)	0,039(4)	0,040(4)	-0,001(3)	0,007(3)	0,000(3)
O6	0,018(3)	0,033(4)	0,031(4)	-0,002(3)	0,009(3)	-0,003(3)
O7	0,028(4)	0,031(4)	0,044(5)	-0,008(3)	0,010(3)	0,000(3)
O8	0,031(4)	0,036(4)	0,037(4)	-0,001(3)	0,006(3)	0,002(3)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
O9	0,035(4)	0,024(4)	0,022(4)	0,000(3)	-0,009(3)	0,005(3)
O10	0,024(4)	0,028(4)	0,039(4)	0,002(3)	0,013(3)	-0,002(3)
O11	0,025(4)	0,035(4)	0,032(4)	-0,005(3)	0,004(3)	0,001(3)
O12	0,031(4)	0,036(4)	0,039(4)	-0,005(3)	0,004(3)	-0,002(3)
O13	0,037(4)	0,033(4)	0,033(4)	0,001(3)	0,006(3)	-0,002(3)
Ag1	0,0181(4)	0,0355(5)	0,0307(4)	0,0055(3)	0,0075(3)	0,0029(3)
Ag2	0,0440(5)	0,0229(4)	0,0411(5)	-0,0008(4)	0,0016(4)	-0,0058(4)
Ag3	0,0218(4)	0,0509(6)	0,0282(5)	-0,0002(4)	0,0017(3)	0,0100(4)
C1	0,025(6)	0,048(7)	0,024(6)	0,008(5)	-0,001(4)	0,001(5)
C2	0,028(6)	0,046(7)	0,058(8)	0,024(6)	0,021(6)	0,005(5)
C3	0,020(6)	0,057(8)	0,052(8)	0,011(6)	0,014(5)	0,004(5)
C4	0,024(5)	0,035(6)	0,028(6)	0,005(4)	0,013(4)	0,009(4)
C5	0,018(5)	0,040(6)	0,016(5)	-0,003(4)	0,008(4)	0,004(4)
C6	0,024(5)	0,039(6)	0,015(5)	-0,006(4)	0,011(4)	-0,002(4)
C7	0,023(5)	0,038(6)	0,027(6)	-0,003(5)	0,007(4)	0,001(5)
C8	0,042(7)	0,026(6)	0,024(6)	0,001(4)	0,004(5)	0,002(5)
C9	0,045(7)	0,027(6)	0,045(7)	-0,003(5)	0,019(6)	-0,005(5)
C10	0,035(6)	0,041(7)	0,038(7)	0,000(5)	0,015(5)	-0,006(5)
C11	0,034(6)	0,030(6)	0,042(7)	-0,004(5)	0,013(5)	0,011(5)
C12	0,031(6)	0,034(6)	0,045(7)	-0,006(5)	0,016(5)	0,001(5)
C13	0,033(6)	0,041(7)	0,047(7)	-0,014(6)	0,013(5)	-0,003(5)
C14	0,025(6)	0,033(6)	0,039(6)	-0,006(5)	0,004(5)	0,000(5)
C15	0,036(6)	0,030(6)	0,018(5)	-0,004(4)	0,007(5)	0,011(5)
C16	0,023(5)	0,040(6)	0,023(5)	-0,005(5)	0,005(4)	0,001(4)
C17	0,025(5)	0,035(6)	0,026(6)	0,002(5)	0,005(4)	0,005(5)
C18	0,040(7)	0,033(6)	0,033(6)	0,003(5)	0,006(5)	0,010(5)
C19	0,042(7)	0,050(7)	0,040(7)	0,016(6)	0,022(6)	0,002(6)
C20	0,029(6)	0,046(7)	0,043(7)	0,004(5)	0,019(5)	0,003(5)
C21	0,021(5)	0,030(6)	0,029(5)	-0,004(4)	0,010(4)	-0,006(4)
C22	0,023(5)	0,025(5)	0,023(5)	0,004(4)	0,004(4)	-0,008(4)
C23	0,034(6)	0,033(6)	0,038(6)	0,001(5)	0,014(5)	0,010(5)
C24	0,042(6)	0,048(7)	0,023(6)	-0,001(5)	0,013(5)	0,000(5)
C25	0,031(6)	0,094(11)	0,034(7)	-0,010(7)	0,005(5)	0,033(7)
C26	0,114(13)	0,025(6)	0,066(9)	-0,008(6)	0,055(9)	-0,001(7)
N1	0,022(4)	0,029(5)	0,020(4)	0,004(4)	0,006(3)	0,001(4)
N2	0,021(4)	0,032(5)	0,030(5)	-0,001(4)	0,011(4)	0,001(4)
N3	0,023(4)	0,038(5)	0,026(5)	-0,003(4)	0,009(4)	0,007(4)
N4	0,031(5)	0,046(6)	0,026(5)	0,003(4)	0,014(4)	0,004(4)

Weiter auf der nächsten Seite

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
O100	0,20(2)	0,013(6)	0,076(11)	0,000	0,070(12)	0,000

Tabelle A.41.: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsfaktoren (\AA^2) von **16** in „trockener“ Form. U_{eq} ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U_{eq}
Mo1	-0,06558(3)	0,56049(5)	0,07027(3)	0,02544(18)
Mo2	-0,03358(3)	0,37188(5)	-0,00118(3)	0,02475(18)
Mo3	0,10367(3)	0,39256(6)	0,06638(3)	0,02596(18)
Mo4	0,07331(3)	0,58285(6)	0,13838(3)	0,02664(18)
O1	-0,0689(2)	0,4551(5)	0,1132(2)	0,0327(13)
O2	-0,0721(2)	0,3198(4)	-0,0656(2)	0,0277(12)
O3	-0,0432(2)	0,2777(5)	0,0426(2)	0,0317(13)
O4	0,0177(2)	0,4874(4)	0,0552(2)	0,0279(12)
O5	0,1133(3)	0,6739(5)	0,1851(3)	0,0347(14)
O6	-0,0939(2)	0,4769(4)	0,0010(2)	0,0257(12)
O7	-0,1253(2)	0,6382(4)	0,0659(2)	0,0303(13)
O8	0,0607(2)	0,4770(4)	0,1766(2)	0,0311(13)
O9	0,0458(2)	0,3391(4)	-0,0035(2)	0,0295(13)
O10	-0,0044(2)	0,6437(4)	0,1175(2)	0,0271(12)
O11	0,1315(2)	0,5116(4)	0,1145(2)	0,0291(12)
O12	0,1670(2)	0,3489(5)	0,0571(2)	0,0316(13)
O13	0,0886(3)	0,3019(5)	0,1094(2)	0,0333(13)
Ag1	0,05944(2)	0,16941(5)	0,27701(2)	0,02712(17)
Ag2	0,00025(3)	0,32670(5)	0,16823(3)	0,03696(19)
Ag3	0,08650(3)	0,17228(6)	0,39519(3)	0,03407(18)
N1	0,1491(3)	0,2154(5)	0,2733(2)	0,0242(14)
N2	0,1220(3)	0,0147(6)	0,3017(3)	0,0271(14)
N3	0,1817(3)	0,2406(6)	0,4150(3)	0,0279(15)
N4	0,1515(3)	0,0489(6)	0,4513(3)	0,0310(16)
C1	0,1598(4)	0,3061(7)	0,2511(3)	0,0323(19)
C2	0,2134(4)	0,3330(8)	0,2469(4)	0,040(2)
C3	0,2591(4)	0,2607(7)	0,2653(4)	0,037(2)
C4	0,2491(4)	0,1649(7)	0,2880(4)	0,0326(19)
C5	0,1934(3)	0,1423(6)	0,2913(3)	0,0228(16)
C6	0,1796(3)	0,0388(6)	0,3134(3)	0,0234(16)
C7	0,2223(3)	-0,0316(6)	0,3450(3)	0,0257(16)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
C8	0,2044(4)	-0,1273(6)	0,3629(3)	0,0305(18)
C9	0,1458(4)	-0,1510(7)	0,3508(4)	0,0343(19)
C10	0,1070(4)	-0,0767(7)	0,3202(4)	0,0339(19)
C11	0,1943(4)	0,3322(6)	0,3955(3)	0,0305(18)
C12	0,2506(4)	0,3611(7)	0,3970(3)	0,0340(19)
C13	0,2960(4)	0,2878(7)	0,4203(4)	0,037(2)
C14	0,2834(4)	0,1936(7)	0,4414(3)	0,0314(18)
C15	0,2258(3)	0,1712(6)	0,4387(3)	0,0252(17)
C16	0,2096(3)	0,0695(7)	0,4616(3)	0,0287(18)
C17	0,2514(4)	-0,0037(7)	0,4911(3)	0,0297(18)
C18	0,2347(4)	-0,0963(7)	0,5107(4)	0,035(2)
C19	0,1749(4)	-0,1166(8)	0,4999(4)	0,041(2)
C20	0,1360(4)	-0,0420(7)	0,4706(4)	0,037(2)
C21	-0,0003(3)	0,1520(6)	0,1744(3)	0,0261(17)
C22	0,0269(3)	0,0927(6)	0,1538(3)	0,0221(16)
C23	0,0611(4)	0,0194(7)	0,1295(3)	0,0343(19)
C24	0,0441(4)	0,0415(7)	0,0686(3)	0,0336(19)
C25	0,1271(4)	0,0407(9)	0,1560(4)	0,050(3)
C26	0,0439(6)	-0,0962(8)	0,1380(5)	0,061(3)
O100	0,0000	0,4217(8)	0,2500	0,082(5)
C100	0,0000	0,513(3)	0,2500	0,118(9)
N101	0,0285(10)	0,604(2)	0,2630(11)	0,189(10)
C102	0,0000	0,7160(17)	0,2500	0,074(5)
C103	0,0924(16)	0,587(3)	0,2942(15)	0,218(14)

Tabelle A.42.: Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für **16** in „trockener“ Form.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Mo1	0,0219(4)	0,0240(4)	0,0296(4)	-0,0015(3)	0,0071(3)	-0,0001(3)
Mo2	0,0215(3)	0,0203(3)	0,0311(4)	-0,0007(3)	0,0066(3)	-0,0017(3)
Mo3	0,0213(4)	0,0237(4)	0,0296(4)	-0,0010(3)	0,0034(3)	-0,0009(3)
Mo4	0,0221(4)	0,0242(4)	0,0315(4)	-0,0011(3)	0,0056(3)	0,0003(3)
O1	0,029(3)	0,037(3)	0,030(3)	-0,001(3)	0,007(2)	-0,003(2)
O2	0,026(3)	0,023(3)	0,034(3)	0,001(2)	0,010(2)	-0,003(2)
O3	0,031(3)	0,027(3)	0,041(3)	0,004(3)	0,017(3)	0,002(2)
O4	0,022(3)	0,026(3)	0,034(3)	-0,004(2)	0,007(2)	-0,003(2)
O5	0,026(3)	0,032(3)	0,043(4)	-0,004(3)	0,008(3)	-0,001(2)
O6	0,019(3)	0,026(3)	0,032(3)	-0,003(2)	0,008(2)	-0,003(2)
O7	0,027(3)	0,025(3)	0,039(3)	-0,006(2)	0,010(3)	0,002(2)

Weiter auf der nächsten Seite

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
O8	0,032(3)	0,024(3)	0,036(3)	-0,003(2)	0,008(3)	0,000(2)
O9	0,031(3)	0,019(3)	0,030(3)	-0,001(2)	-0,001(2)	0,004(2)
O10	0,024(3)	0,025(3)	0,032(3)	-0,002(2)	0,009(2)	0,000(2)
O11	0,022(3)	0,027(3)	0,035(3)	0,000(2)	0,005(2)	0,002(2)
O12	0,025(3)	0,031(3)	0,033(3)	-0,003(2)	0,002(2)	0,001(2)
O13	0,034(3)	0,031(3)	0,033(3)	-0,001(3)	0,007(3)	-0,006(3)
Ag1	0,0190(3)	0,0324(3)	0,0301(3)	0,0053(2)	0,0080(2)	0,0028(2)
Ag2	0,0442(4)	0,0200(3)	0,0389(4)	-0,0008(3)	0,0024(3)	-0,0053(3)
Ag3	0,0228(3)	0,0485(4)	0,0270(3)	0,0000(3)	0,0025(3)	0,0099(3)
N1	0,021(3)	0,031(4)	0,019(3)	0,002(3)	0,003(3)	0,002(3)
N2	0,022(3)	0,033(4)	0,025(3)	0,002(3)	0,007(3)	0,004(3)
N3	0,024(3)	0,035(4)	0,024(3)	-0,001(3)	0,007(3)	0,007(3)
N4	0,029(4)	0,040(4)	0,023(3)	0,005(3)	0,008(3)	0,005(3)
C1	0,026(4)	0,041(5)	0,025(4)	0,008(4)	0,002(3)	0,003(4)
C2	0,032(5)	0,046(6)	0,046(5)	0,015(4)	0,018(4)	0,000(4)
C3	0,021(4)	0,044(5)	0,051(6)	0,012(4)	0,019(4)	0,003(4)
C4	0,022(4)	0,041(5)	0,035(5)	0,005(4)	0,010(4)	0,007(4)
C5	0,018(4)	0,030(4)	0,017(4)	-0,003(3)	0,002(3)	0,003(3)
C6	0,024(4)	0,029(4)	0,018(4)	-0,002(3)	0,009(3)	0,005(3)
C7	0,021(4)	0,032(4)	0,021(4)	-0,004(3)	0,000(3)	0,003(3)
C8	0,038(5)	0,025(4)	0,025(4)	0,002(3)	0,003(4)	0,008(3)
C9	0,037(5)	0,028(4)	0,036(5)	0,001(4)	0,009(4)	-0,001(4)
C10	0,029(4)	0,040(5)	0,035(5)	-0,007(4)	0,014(4)	-0,008(4)
C11	0,032(4)	0,023(4)	0,036(5)	0,000(3)	0,011(4)	0,006(3)
C12	0,043(5)	0,028(4)	0,033(5)	-0,002(4)	0,015(4)	0,003(4)
C13	0,029(5)	0,037(5)	0,047(5)	-0,007(4)	0,013(4)	-0,005(4)
C14	0,024(4)	0,033(5)	0,035(5)	-0,006(4)	0,006(4)	0,004(3)
C15	0,023(4)	0,032(4)	0,019(4)	-0,006(3)	0,004(3)	0,007(3)
C16	0,021(4)	0,038(5)	0,025(4)	-0,005(3)	0,005(3)	0,005(3)
C17	0,027(4)	0,035(5)	0,023(4)	0,002(3)	0,004(3)	0,009(3)
C18	0,036(5)	0,036(5)	0,030(4)	0,001(4)	0,005(4)	0,011(4)
C19	0,038(5)	0,044(5)	0,046(6)	0,013(4)	0,018(4)	0,004(4)
C20	0,031(5)	0,035(5)	0,050(5)	0,007(4)	0,020(4)	0,009(4)
C21	0,023(4)	0,024(4)	0,029(4)	0,006(3)	0,005(3)	0,000(3)
C22	0,021(4)	0,021(4)	0,022(4)	0,002(3)	0,004(3)	-0,005(3)
C23	0,045(5)	0,030(4)	0,032(4)	0,001(4)	0,016(4)	0,010(4)
C24	0,032(5)	0,044(5)	0,028(4)	-0,007(4)	0,013(4)	0,000(4)
C25	0,037(5)	0,074(7)	0,034(5)	-0,010(5)	0,004(4)	0,025(5)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
C26	0,105(10)	0,023(5)	0,074(8)	0,002(5)	0,054(7)	0,009(5)
O100	0,190(15)	0,021(5)	0,049(7)	0,000	0,057(8)	0,000

A.17. $[\text{Au}_2(\text{dppm})_2]_3[\text{SMo}_{12}\text{O}_{40}]$ 17

Kristallzustand	nass
Summenformel	$\text{C}_{77}\text{H}_{69}\text{Au}_3\text{Mo}_{12}\text{NO}_{40}\text{P}_6\text{S}_1$
Kristall	blaue Plättchen (0,10 x 0,03 x 0,01 mm ³)
Kristallsystem, Raumgruppe	triklin, $P\bar{1}$ (Nr. 2)
Gitterkonstanten/Å, °	$a = 16,698(2)$, $b = 16,629(2)$, $c = 21,101(2)$ $\alpha = 93,547(2)$, $\beta = 105,042(2)$, $\gamma = 106,158(2)$
Volumen/Å ³	5313(1)
Formeleinheiten	2
Röntgendichte/g cm ⁻³	2,255
Temperatur	100 K
$2\theta_{max}$	42,06 °
hkl -Bereich	$-16 \leq h \leq 16$, $-16 \leq k \leq 16$, $-21 \leq l \leq 21$
F(000)	3410
Absorptionskoeffizient μ/mm^{-1}	5,674
Zahl der gemessenen Reflexe	26917
davon symmetrieunabhängig	11406 ($R_{int} = 0,0833$)
Anzahl der Parameter	873
Restelektronendichte/e·Å ⁻³ (max/min)	2,76/-1,31
R_1 ($I > 2\sigma(I)$)	0,0801
wR_2 ($I > 2\sigma(I)$)	0,2032
R_1 (alle Daten)	0,1308
wR_2 (alle Daten)	0,2479
Datenbank	CCDC 779214
freies Volumen	17,0 %
freies Volumen mit Lösungsmittel	10,9 %
Lösungsmittel pro Formeleinheit	1 AN
Besonderheiten	

Tabelle A.43.: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsfaktoren (Å²) von **17**. U_{eq} ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U_{eq}
Mo1	0,46483(17)	0,87172(17)	0,91536(13)	0,0478(7)
Mo2	0,42626(18)	0,87389(16)	0,67277(14)	0,0489(7)
Mo3	0,39424(17)	0,65059(17)	0,89866(14)	0,0500(8)
Mo4	0,35728(16)	0,98041(15)	0,78742(13)	0,0410(7)
Mo5	0,20464(17)	0,86269(15)	0,64006(13)	0,0427(7)
Mo6	0,15907(16)	0,63817(15)	0,86071(14)	0,0447(7)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
Mo7	0,23135(16)	0,86041(15)	0,89031(13)	0,0422(7)
Mo8	0,51959(16)	0,75167(17)	0,80013(13)	0,0475(7)
Mo9	0,35242(18)	0,64083(16)	0,64190(13)	0,0459(7)
Mo10	0,13177(17)	0,62823(15)	0,62094(14)	0,0462(7)
Mo11	0,07159(16)	0,75322(16)	0,74328(15)	0,0500(8)
Mo12	0,23551(18)	0,52734(15)	0,74188(14)	0,0489(7)
S1	0,2964(4)	0,7536(4)	0,7679(4)	0,0336(17)
O1	0,2747(11)	0,9378(11)	0,8328(9)	0,043(5)
O2	0,4973(11)	0,8376(11)	0,7409(9)	0,044(5)
O3	0,2634(11)	0,9619(11)	0,7057(9)	0,047(5)
O4	0,4418(11)	0,9442(12)	0,8523(9)	0,046(5)
O5	0,1668(11)	0,5628(11)	0,7941(9)	0,041(5)
O6	0,1471(13)	0,9052(11)	0,5819(9)	0,050(5)
O7	0,3130(12)	0,8808(10)	0,6200(9)	0,048(5)
O8	0,3947(12)	0,5955(12)	0,5896(10)	0,056(6)
O9	0,4479(13)	0,6734(12)	0,7232(9)	0,054(6)
O10	0,3781(11)	0,7554(11)	0,8195(9)	0,046(5)
O11	0,3866(12)	1,0866(11)	0,8069(10)	0,057(6)
O12	0,4907(12)	0,6709(12)	0,8546(8)	0,047(5)
O13	0,2845(12)	0,6504(12)	0,9032(10)	0,054(5)
O14	0,2181(14)	0,9244(12)	0,9487(9)	0,056(6)
O15	0,5395(12)	0,8376(12)	0,8696(9)	0,053(5)
O16	0,1867(12)	0,7499(12)	0,9097(9)	0,051(5)
O17	0,3072(13)	0,5460(11)	0,6862(9)	0,053(6)
O18	0,0685(13)	0,6652(11)	0,8009(10)	0,055(6)
O19	0,3801(12)	0,7548(11)	0,6323(9)	0,047(5)
O20	0,2048(15)	0,4200(11)	0,7398(11)	0,064(6)
O21	0,3298(12)	0,5713(12)	0,8167(11)	0,058(6)
O22	0,1074(12)	0,5780(12)	0,9079(10)	0,057(6)
O23	0,4237(13)	0,5905(12)	0,9547(10)	0,059(6)
O24	0,4491(14)	0,7594(13)	0,9447(11)	0,066(6)
O25	0,3484(12)	0,8634(12)	0,9258(11)	0,060(6)
O26	0,5361(14)	0,9356(12)	0,9833(10)	0,061(6)
O27	0,1197(12)	0,8321(11)	0,8206(10)	0,050(5)
O28	0,4313(12)	0,9682(12)	0,7273(10)	0,059(6)
O29	-0,0332(12)	0,7527(11)	0,7178(10)	0,052(5)
O30	0,0774(11)	0,6659(11)	0,6785(10)	0,050(5)
O31	0,2687(11)	0,6774(12)	0,7204(9)	0,047(5)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
O32	0,0527(13)	0,5848(11)	0,5529(10)	0,054(5)
O33	0,1707(12)	0,7450(10)	0,6062(10)	0,050(5)
O34	0,2265(12)	0,7533(10)	0,7992(9)	0,048(5)
O35	0,3111(12)	0,8290(11)	0,7348(9)	0,046(5)
O36	0,1293(11)	0,8307(10)	0,6959(10)	0,050(5)
O37	0,2345(14)	0,6196(12)	0,5939(9)	0,058(6)
O38	0,4880(14)	0,9157(11)	0,6265(10)	0,059(6)
O39	0,6217(12)	0,7527(13)	0,7995(11)	0,061(6)
O40	0,1432(13)	0,5377(12)	0,6672(10)	0,058(6)
Au1	0,06063(8)	0,02362(8)	0,45833(6)	0,0516(4)
Au2	0,42311(7)	0,42864(8)	0,50734(7)	0,0558(4)
Au3	0,91745(7)	0,50292(9)	0,95225(6)	0,0556(4)
P1	-0,0394(5)	-0,0830(4)	0,3768(4)	0,0408(19)
P2	0,1693(5)	0,1225(5)	0,5397(4)	0,045(2)
P3	0,3490(5)	0,4084(5)	0,3957(5)	0,055(2)
P4	0,5111(5)	0,4339(5)	0,6136(5)	0,057(3)
P5	0,9532(5)	0,6452(6)	0,9882(4)	0,055(2)
P6	0,8703(5)	0,3591(6)	0,9217(4)	0,054(2)
C1	-0,0382(18)	-0,0645(17)	0,2909(14)	0,043(7)
C2	0,036(2)	-0,0630(18)	0,2763(15)	0,056(8)
C3	0,042(2)	-0,0434(19)	0,2140(15)	0,059(9)
C4	-0,026(2)	-0,022(2)	0,1733(19)	0,084(11)
C5	-0,103(3)	-0,030(2)	0,186(2)	0,091(12)
C6	-0,107(3)	-0,045(2)	0,2516(19)	0,083(11)
C7	-0,0081(17)	-0,1764(16)	0,3905(13)	0,036(7)
C8	0,0716(18)	-0,1698(18)	0,4318(14)	0,046(8)
C9	0,100(2)	-0,238(2)	0,4493(16)	0,067(10)
C10	0,036(2)	-0,319(2)	0,4204(16)	0,064(9)
C11	-0,039(2)	-0,328(2)	0,3791(15)	0,056(8)
C12	-0,0644(18)	-0,2581(16)	0,3603(13)	0,037(7)
C13	-0,1512(19)	-0,1025(19)	0,3782(14)	0,051(8)
C14	0,283(2)	0,1214(19)	0,5482(15)	0,056(9)
C15	0,324(2)	0,1613(19)	0,5055(15)	0,055(8)
C16	0,411(2)	0,160(2)	0,5060(19)	0,081(11)
C17	0,454(4)	0,125(4)	0,560(3)	0,16(2)
C18	0,417(4)	0,091(3)	0,608(3)	0,135(18)
C19	0,333(2)	0,092(2)	0,6029(19)	0,082(11)
C20	0,1658(18)	0,2263(17)	0,5279(14)	0,042(7)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
C21	0,2354(18)	0,2979(16)	0,5754(13)	0,041(7)
C22	0,2284(18)	0,3783(17)	0,5696(13)	0,042(7)
C23	0,160(2)	0,390(2)	0,5231(15)	0,056(9)
C24	0,099(2)	0,3228(19)	0,4787(15)	0,056(9)
C25	0,101(2)	0,241(2)	0,4815(16)	0,062(9)
C26	0,3135(18)	0,2980(17)	0,3642(14)	0,043(7)
C27	0,363(2)	0,2517(19)	0,3474(15)	0,057(9)
C28	0,337(2)	0,167(2)	0,3276(17)	0,077(11)
C29	0,247(2)	0,120(2)	0,3228(15)	0,058(9)
C30	0,192(2)	0,161(2)	0,3369(15)	0,060(9)
C31	0,2233(19)	0,2492(18)	0,3585(14)	0,049(8)
C32	0,256(2)	0,444(2)	0,3697(17)	0,065(9)
C33	0,207(2)	0,422(2)	0,3014(19)	0,080(11)
C34	0,123(3)	0,452(2)	0,283(2)	0,086(12)
C35	0,107(2)	0,486(2)	0,3276(17)	0,066(10)
C36	0,152(2)	0,510(2)	0,3933(18)	0,079(11)
C37	0,233(2)	0,4861(19)	0,4166(17)	0,062(9)
C38	0,5751(19)	0,5416(17)	0,6496(15)	0,051(8)
C39	0,5890(19)	0,3785(18)	0,6118(15)	0,050(8)
C40	0,6470(17)	0,3710(16)	0,6710(14)	0,042(7)
C41	0,7079(19)	0,3286(17)	0,6700(15)	0,050(8)
C42	0,710(2)	0,293(2)	0,6093(16)	0,062(9)
C43	0,653(2)	0,299(2)	0,5521(17)	0,066(9)
C44	0,5926(19)	0,3430(18)	0,5521(15)	0,050(8)
C45	0,457(2)	0,3895(19)	0,6757(15)	0,054(8)
C46	0,443(2)	0,300(2)	0,6776(17)	0,072(10)
C47	0,403(2)	0,268(2)	0,7282(16)	0,065(9)
C48	0,388(2)	0,318(2)	0,7720(17)	0,071(10)
C49	0,406(3)	0,403(3)	0,773(2)	0,091(12)
C50	0,444(2)	0,437(2)	0,7200(17)	0,069(10)
C51	0,9084(16)	0,6644(16)	1,0533(12)	0,033(7)
C52	0,9297(18)	0,7377(17)	1,0951(13)	0,043(7)
C53	0,8859(19)	0,7496(19)	1,1409(15)	0,051(8)
C54	0,8197(19)	0,6821(17)	1,1472(14)	0,050(8)
C55	0,7951(18)	0,6046(17)	1,1063(13)	0,041(7)
C56	0,8341(14)	0,5928(14)	1,0601(11)	0,019(5)
C57	0,913(3)	0,704(2)	0,9269(16)	0,098(13)
C58	0,9654(19)	0,765(2)	0,8998(18)	0,137(18)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
C59	0,926(3)	0,807(2)	0,8523(18)	0,16(2)
C60	0,835(3)	0,789(3)	0,8318(19)	0,17(2)
C61	0,783(2)	0,728(4)	0,859(3)	0,9(3)
C62	0,822(3)	0,685(3)	0,907(3)	0,73(18)
C63	0,927(2)	0,303(2)	0,9800(18)	0,074(10)
C64	0,8831(18)	0,3254(18)	0,8425(14)	0,046(8)
C65	0,839(2)	0,242(2)	0,8113(16)	0,067(10)
C66	0,8572(17)	0,2166(17)	0,7555(13)	0,041(7)
C67	0,9168(17)	0,2684(17)	0,7290(14)	0,042(7)
C68	0,964(2)	0,350(2)	0,7587(15)	0,061(9)
C69	0,9468(18)	0,3772(17)	0,8185(13)	0,042(7)
C70	0,752(2)	0,305(2)	0,9164(17)	0,071(10)
C71	0,725(3)	0,229(3)	0,931(2)	0,095(13)
C72	0,627(3)	0,199(3)	0,921(2)	0,127(17)
C73	0,578(3)	0,246(3)	0,896(2)	0,104(14)
C74	0,601(3)	0,318(3)	0,871(2)	0,113(15)
C75	0,700(3)	0,352(3)	0,882(2)	0,106(14)
N100	0,648(3)	0,531(2)	0,823(2)	0,029(10)
C101	0,625(3)	0,533(3)	0,863(3)	0,030(12)
C102	0,595(4)	0,534(3)	0,920(3)	0,043(15)
N103	0,124(3)	0,910(3)	0,079(2)	0,038(11)
C104	0,187(4)	0,964(3)	0,093(3)	0,039(14)
C105	0,277(6)	1,026(6)	0,102(5)	0,12(3)

Tabelle A.44.: Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 17.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Mo1	0,0427(16)	0,0559(18)	0,0474(17)	0,0109(14)	0,0168(14)	0,0151(14)
Mo2	0,0556(18)	0,0421(16)	0,0591(19)	0,0195(14)	0,0314(15)	0,0147(14)
Mo3	0,0471(17)	0,0573(18)	0,0591(19)	0,0307(15)	0,0198(14)	0,0281(15)
Mo4	0,0433(16)	0,0294(14)	0,0508(17)	0,0105(13)	0,0189(13)	0,0059(12)
Mo5	0,0508(17)	0,0281(14)	0,0494(17)	0,0110(13)	0,0111(13)	0,0144(13)
Mo6	0,0425(16)	0,0380(15)	0,0627(19)	0,0237(14)	0,0258(14)	0,0133(13)
Mo7	0,0429(16)	0,0379(15)	0,0565(18)	0,0157(13)	0,0255(14)	0,0168(13)
Mo8	0,0376(16)	0,0581(18)	0,0560(18)	0,0165(15)	0,0201(14)	0,0208(14)
Mo9	0,0577(18)	0,0421(16)	0,0484(17)	0,0155(13)	0,0210(14)	0,0244(14)
Mo10	0,0433(16)	0,0284(14)	0,0643(19)	0,0107(13)	0,0053(14)	0,0155(13)
Mo11	0,0332(15)	0,0437(16)	0,078(2)	0,0201(15)	0,0154(14)	0,0170(13)
Mo12	0,0631(19)	0,0318(15)	0,0631(19)	0,0197(14)	0,0246(15)	0,0236(14)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
S1	0,035(4)	0,030(4)	0,047(5)	0,017(4)	0,022(4)	0,016(3)
O1	0,039(11)	0,043(11)	0,055(13)	0,011(10)	0,022(10)	0,017(10)
O2	0,044(12)	0,051(12)	0,047(12)	0,019(10)	0,026(10)	0,015(10)
O3	0,035(11)	0,038(11)	0,063(14)	0,012(10)	0,012(10)	0,002(9)
O4	0,032(11)	0,064(13)	0,042(12)	0,017(10)	0,023(9)	-0,001(10)
O5	0,038(11)	0,044(11)	0,046(12)	0,017(9)	0,018(9)	0,014(9)
O6	0,082(15)	0,029(11)	0,037(12)	-0,003(9)	0,014(11)	0,017(11)
O7	0,066(13)	0,031(11)	0,052(13)	0,023(10)	0,030(11)	0,006(10)
O8	0,045(12)	0,052(13)	0,078(15)	0,018(11)	0,020(11)	0,019(11)
O9	0,080(15)	0,063(13)	0,052(13)	0,025(11)	0,041(12)	0,048(12)
O10	0,039(12)	0,049(12)	0,058(13)	0,031(10)	0,017(10)	0,017(10)
O11	0,048(13)	0,043(12)	0,078(16)	0,012(11)	0,021(11)	0,008(11)
O12	0,048(12)	0,075(14)	0,031(11)	0,013(10)	0,018(9)	0,032(11)
O13	0,043(12)	0,057(13)	0,056(13)	0,017(11)	0,003(10)	0,018(11)
O14	0,087(16)	0,061(13)	0,034(12)	0,017(10)	0,028(11)	0,032(12)
O15	0,046(12)	0,064(14)	0,056(13)	0,017(11)	0,027(10)	0,015(11)
O16	0,048(12)	0,053(13)	0,054(13)	0,025(11)	0,021(10)	0,008(10)
O17	0,082(15)	0,046(12)	0,055(13)	0,035(11)	0,027(12)	0,045(12)
O18	0,064(14)	0,056(13)	0,078(15)	0,046(12)	0,040(12)	0,044(12)
O19	0,049(12)	0,040(12)	0,053(13)	0,015(10)	0,019(10)	0,009(10)
O20	0,096(17)	0,035(12)	0,086(17)	0,031(11)	0,053(14)	0,031(12)
O21	0,049(13)	0,049(13)	0,090(17)	0,021(12)	0,038(12)	0,021(11)
O22	0,049(13)	0,059(13)	0,083(16)	0,019(12)	0,050(12)	0,017(11)
O23	0,054(13)	0,066(14)	0,073(15)	0,026(12)	0,019(11)	0,041(12)
O24	0,076(15)	0,061(14)	0,075(16)	0,020(12)	0,060(13)	0,005(12)
O25	0,051(13)	0,057(13)	0,088(17)	0,041(12)	0,029(12)	0,024(11)
O26	0,081(16)	0,059(14)	0,057(14)	0,014(12)	0,030(12)	0,037(13)
O27	0,043(12)	0,040(12)	0,072(15)	0,011(11)	0,019(11)	0,018(10)
O28	0,047(12)	0,057(13)	0,064(15)	0,004(11)	0,023(11)	-0,003(11)
O29	0,044(12)	0,041(12)	0,069(14)	0,009(11)	0,004(11)	0,020(10)
O30	0,037(11)	0,035(11)	0,085(15)	0,016(11)	0,022(11)	0,015(10)
O31	0,034(11)	0,054(13)	0,065(14)	0,013(11)	0,027(10)	0,020(10)
O32	0,063(14)	0,036(12)	0,063(14)	0,013(10)	0,013(12)	0,018(11)
O33	0,060(13)	0,021(10)	0,079(15)	0,002(10)	0,034(12)	0,016(10)
O34	0,054(13)	0,029(11)	0,061(13)	0,022(10)	0,013(11)	0,013(10)
O35	0,051(12)	0,057(13)	0,037(12)	0,013(10)	0,020(10)	0,020(11)
O36	0,042(12)	0,021(10)	0,068(14)	0,006(10)	-0,003(10)	-0,003(9)
O37	0,096(16)	0,058(13)	0,041(12)	0,036(11)	0,028(12)	0,045(13)

Weiter auf der nächsten Seite

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
O38	0,093(16)	0,046(12)	0,066(14)	0,020(11)	0,054(13)	0,033(12)
O39	0,038(12)	0,076(15)	0,088(16)	0,031(13)	0,043(12)	0,019(11)
O40	0,065(14)	0,045(12)	0,070(15)	0,020(11)	0,023(12)	0,020(11)
Au1	0,0463(8)	0,0480(8)	0,0519(8)	-0,0099(6)	0,0313(6)	-0,0114(6)
Au2	0,0243(7)	0,0604(9)	0,0801(10)	0,0486(8)	0,0093(6)	0,0058(6)
Au3	0,0287(7)	0,0930(11)	0,0412(8)	0,0009(7)	0,0094(6)	0,0153(7)
P1	0,040(5)	0,032(4)	0,045(5)	-0,003(4)	0,013(4)	0,004(4)
P2	0,032(4)	0,043(5)	0,057(5)	0,001(4)	0,020(4)	0,003(4)
P3	0,019(4)	0,063(6)	0,082(7)	0,049(5)	0,009(4)	0,009(4)
P4	0,026(4)	0,064(6)	0,085(7)	0,051(5)	0,020(4)	0,008(4)
P5	0,040(5)	0,075(6)	0,049(5)	0,027(5)	0,019(4)	0,007(5)
P6	0,028(4)	0,096(7)	0,036(5)	0,005(5)	0,009(4)	0,017(5)

A.18. [Au₂(dppm)₂]₂[SiMo₁₂O₄₀] 18

Kristallzustand	nass
Summenformel	C ₅₃ H ₅₀ Au ₂ Mo ₆ O ₂₁ P ₄ Si _{0,5}
Kristall	schwarzblaue Plättchen (0,10 x 0,10 x 0,05 mm ³)
Kristallsystem, Raumgruppe	triklin, P $\bar{1}$ (Nr. 2)
Gitterkonstanten/Å, °	$a = 14,766(8)$, $b = 16,234(8)$, $c = 16,731(9)$ $\alpha = 89,229(7)$, $\beta = 65,793(7)$, $\gamma = 86,350(7)$
Volumen/Å ³	3650(1)
Formeleinheiten	2
Röntgendichte/g cm ⁻³	1,938
Temperatur	100 K
$2\theta_{max}$	34,16 °
<i>hkl</i> -Bereich	$-12 \leq h \leq 12$, $-13 \leq k \leq 13$, $-13 \leq l \leq 13$
F(000)	2026
Absorptionskoeffizient μ/mm^{-1}	5,157
Zahl der gemessenen Reflexe	10928
davon symmetrieunabhängig	4304 ($R_{int} = 0,0729$)
Anzahl der Parameter	508
Restelektronendichte/e·Å ⁻³ (max/min)	5,04/-2,4
R_1 ($I > 2\sigma(I)$)	0,1147
wR_2 ($I > 2\sigma(I)$)	0,3295
R_1 (alle Daten)	0,1409
wR_2 (alle Daten)	0,3554
Datenbank	-
freies Volumen	21,6 %
freies Volumen mit Lösungsmittel	
Lösungsmittel pro Formeleinheit	1 AC
Besonderheiten	

Tabelle A.45.: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsfaktoren (Å²) von **18**. U_{eq} ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U_{eq}
Mo1	0,7342(3)	0,4387(3)	0,5003(3)	0,0330(16)
Mo2	0,5404(4)	0,3004(3)	0,5723(3)	0,0393(17)
Mo3	0,7166(3)	0,4961(3)	0,3012(3)	0,0351(17)
Mo4	0,5232(4)	0,4783(3)	0,7010(3)	0,0411(17)
Mo5	0,6768(4)	0,6492(3)	0,4642(3)	0,0382(17)
Mo6	0,5604(4)	0,3280(3)	0,3554(3)	0,0410(18)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
Si1	0,5000	0,5000	0,5000	0,019(6)
O1	0,569(2)	0,205(2)	0,600(2)	0,045(10)
O2	0,511(3)	0,364(3)	0,668(2)	0,091(18)
O3	0,525(3)	0,461(2)	0,798(2)	0,050(11)
O4	0,654(2)	0,468(3)	0,623(3)	0,095(19)
O5	0,584(3)	0,280(4)	0,444(2)	0,098(18)
O6	0,578(3)	0,2506(19)	0,286(2)	0,056(12)
O7	0,815(3)	0,4838(18)	0,209(2)	0,044(11)
O8	0,728(3)	0,596(2)	0,348(2)	0,064(12)
O9	0,768(2)	0,4442(19)	0,383(3)	0,044(11)
O10	0,736(3)	0,564(2)	0,498(2)	0,067(13)
O11	0,589(2)	0,684(3)	0,575(2)	0,080(16)
O12	0,760(2)	0,7147(19)	0,4411(19)	0,034(9)
O13	0,841(3)	0,418(3)	0,508(3)	0,078(14)
O14	0,591(3)	0,706(4)	0,413(2)	0,11(2)
O15	0,471(7)	0,551(7)	0,641(11)	1,1(3)
O16	0,618(3)	0,532(2)	0,264(4)	0,11(2)
O17	0,677(3)	0,346(2)	0,521(2)	0,081(16)
O18	0,673(3)	0,383(2)	0,305(4)	0,10(2)
O19	0,584(14)	0,549(10)	0,469(8)	0,7(2)
O20	0,550(6)	0,464(5)	0,548(5)	0,18(3)
Au1	0,44910(15)	0,58051(13)	0,03882(13)	0,0332(10)
Au2	0,02039(15)	-0,00905(13)	0,40571(14)	0,0379(10)
P1	0,6065(10)	0,6275(9)	0,0084(9)	0,037(4)
P2	0,2959(10)	0,5450(9)	0,0501(9)	0,041(5)
P3	0,1680(11)	-0,0781(9)	0,3934(9)	0,036(4)
P4	-0,1150(10)	0,0769(9)	0,4101(9)	0,034(4)
C1	0,612(4)	0,716(3)	0,080(3)	0,029(14)
C2	0,578(4)	0,791(3)	0,060(3)	0,029(14)
C3	0,581(4)	0,853(4)	0,113(3)	0,049(17)
C4	0,609(4)	0,842(4)	0,182(3)	0,049(17)
C5	0,636(4)	0,764(3)	0,199(3)	0,048(17)
C6	0,637(3)	0,695(3)	0,149(3)	0,027(14)
C7	0,672(4)	0,661(3)	-0,105(3)	0,040(16)
C8	0,622(4)	0,661(3)	-0,157(3)	0,046(17)
C9	0,662(4)	0,687(3)	-0,249(3)	0,037(15)
C10	0,758(4)	0,714(3)	-0,274(3)	0,037(15)
C11	0,802(4)	0,713(3)	-0,222(3)	0,028(14)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
C12	0,763(3)	0,692(3)	-0,136(3)	0,016(13)
C13	0,685(4)	0,544(3)	0,024(3)	0,021(13)
C14	0,238(4)	0,627(3)	0,011(3)	0,035(15)
C15	0,263(4)	0,636(3)	-0,081(3)	0,046(16)
C16	0,209(4)	0,706(3)	-0,105(3)	0,037(15)
C17	0,151(4)	0,752(4)	-0,040(4)	0,049(17)
C18	0,128(4)	0,754(4)	0,040(4)	0,053(17)
C19	0,161(4)	0,690(3)	0,075(3)	0,042(16)
C20	0,209(3)	0,521(2)	0,157(2)	0,001(11)
C21	0,112(4)	0,503(3)	0,161(3)	0,034(15)
C22	0,034(4)	0,489(3)	0,247(3)	0,044(16)
C23	0,054(4)	0,482(3)	0,317(4)	0,048(17)
C24	0,162(4)	0,496(3)	0,311(4)	0,054(18)
C25	0,224(3)	0,518(2)	0,227(3)	0,013(12)
C26	0,261(4)	-0,008(3)	0,376(3)	0,022(13)
C27	0,235(4)	0,077(3)	0,409(3)	0,048(17)
C28	0,302(3)	0,133(3)	0,401(3)	0,017(13)
C29	0,404(4)	0,113(4)	0,354(3)	0,053(17)
C30	0,439(5)	0,029(4)	0,319(4)	0,08(2)
C31	0,365(4)	-0,033(4)	0,337(3)	0,054(17)
C32	0,227(4)	-0,148(3)	0,298(3)	0,025(14)
C33	0,275(3)	-0,224(3)	0,297(3)	0,013(12)
C34	0,325(4)	-0,264(3)	0,223(3)	0,037(15)
C35	0,319(4)	-0,232(3)	0,144(3)	0,040(16)
C36	0,272(4)	-0,154(3)	0,141(3)	0,037(15)
C37	0,226(4)	-0,116(4)	0,223(3)	0,049(17)
C38	0,162(4)	-0,140(3)	0,489(3)	0,031(15)
C39	-0,213(4)	0,029(3)	0,404(3)	0,039(15)
C40	-0,308(4)	0,076(3)	0,421(3)	0,041(16)
C41	-0,383(4)	0,037(3)	0,418(3)	0,046(16)
C42	-0,370(6)	-0,050(5)	0,395(4)	0,09(2)
C43	-0,284(4)	-0,094(3)	0,377(3)	0,041(16)
C44	-0,209(5)	-0,055(4)	0,387(4)	0,08(2)
C45	-0,079(4)	0,150(3)	0,323(3)	0,031(15)
C46	-0,004(4)	0,123(4)	0,236(3)	0,050(17)
C47	0,016(4)	0,171(3)	0,167(3)	0,034(15)
C48	-0,025(5)	0,251(4)	0,184(4)	0,066(19)
C49	-0,096(4)	0,285(3)	0,263(3)	0,041(16)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
C50	-0,120(4)	0,234(3)	0,334(4)	0,048(17)
O100	0,973(3)	0,802(2)	0,461(2)	0,064(12)
C101	0,948(4)	0,658(3)	0,485(3)	0,051(17)
C102	0,996(4)	0,721(3)	0,333(3)	0,050(17)
C103	0,974(4)	0,729(3)	0,423(3)	0,032(14)

Tabelle A.46.: Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 18.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Mo1	0,010(3)	0,032(3)	0,044(4)	-0,012(3)	0,002(3)	0,009(3)
Mo2	0,032(4)	0,025(4)	0,036(3)	-0,001(3)	0,008(3)	0,017(3)
Mo3	0,013(3)	0,026(3)	0,045(4)	-0,002(3)	0,009(3)	0,006(3)
Mo4	0,038(4)	0,031(3)	0,044(4)	0,000(3)	-0,007(3)	-0,001(3)
Mo5	0,017(3)	0,046(4)	0,036(4)	-0,004(3)	0,005(3)	-0,001(3)
Mo6	0,022(4)	0,033(4)	0,056(4)	-0,025(3)	-0,007(3)	0,026(3)
Si1	0,000(14)	0,014(14)	0,031(14)	-0,025(11)	0,003(13)	0,032(12)
O1	0,03(2)	0,04(3)	0,04(2)	-0,019(19)	0,015(18)	0,03(2)
O2	0,04(3)	0,14(4)	0,04(3)	-0,04(3)	0,05(2)	-0,08(3)
O3	0,09(3)	0,03(2)	0,01(2)	0,018(18)	-0,01(2)	-0,01(2)
O4	0,00(2)	0,11(4)	0,12(4)	-0,07(3)	0,04(2)	-0,08(3)
O5	0,03(3)	0,22(6)	0,03(3)	0,01(3)	0,00(2)	0,01(3)
O6	0,11(4)	0,02(2)	0,06(3)	0,00(2)	-0,05(3)	-0,02(2)
O7	0,04(3)	0,01(2)	0,04(2)	-0,030(18)	0,02(2)	-0,007(18)
O8	0,06(3)	0,07(3)	0,07(3)	-0,01(2)	-0,04(2)	0,04(2)
O9	0,02(2)	0,02(2)	0,10(3)	-0,01(2)	-0,03(2)	0,004(18)
O10	0,13(4)	0,04(3)	0,08(3)	0,02(2)	-0,08(3)	-0,04(3)
O11	0,00(2)	0,17(5)	0,05(3)	-0,05(3)	0,007(19)	0,06(3)
O12	0,01(2)	0,04(2)	0,04(2)	-0,026(18)	0,006(17)	-0,014(19)
O13	0,01(2)	0,08(3)	0,14(4)	-0,03(3)	-0,03(2)	0,05(2)
O14	0,02(3)	0,23(6)	0,05(3)	0,01(3)	0,00(2)	0,06(3)
O15	0,34(11)	0,53(16)	1,3(4)	0,9(2)	0,77(19)	0,49(13)
O16	0,05(3)	0,00(2)	0,32(7)	0,05(3)	-0,12(4)	-0,03(2)
O17	0,04(3)	0,07(3)	0,09(3)	-0,07(3)	0,03(2)	-0,06(2)
O18	0,07(4)	0,01(2)	0,29(6)	0,05(3)	-0,13(4)	-0,03(2)
O19	1,2(4)	0,9(3)	0,44(16)	0,5(2)	-0,7(3)	-1,0(4)
Au1	0,0109(17)	0,0299(16)	0,0411(17)	-0,0063(12)	0,0059(12)	0,0091(12)
Au2	0,0178(17)	0,0333(17)	0,0496(17)	-0,0095(13)	-0,0030(13)	0,0165(13)
P1	0,007(9)	0,054(11)	0,034(10)	-0,012(8)	0,006(7)	0,016(8)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
P2	0,005(9)	0,052(11)	0,040(10)	-0,009(9)	0,013(8)	0,029(8)
P3	0,020(10)	0,030(10)	0,047(10)	-0,011(8)	-0,007(8)	0,022(8)
P4	0,017(10)	0,032(10)	0,034(10)	-0,007(8)	0,005(8)	0,021(8)

A.19. [Au₂(dppe)₂][W₆O₁₉] 19

Kristallzustand	nass
Summenformel	C ₆₁ H ₆₆ Au ₂ O ₂₂ P ₄ W ₆
Kristall	farblose Kristalle (0,10 x 0,10 x 0,05 mm ³)
Kristallsystem, Raumgruppe	triklin, P $\bar{1}$ (Nr. 2)
Gitterkonstanten/Å, °	$a = 12,599(1)$, $b = 14,607(1)$, $c = 19,351(1)$ $\alpha = 86,002(1)$, $\beta = 83,234(1)$, $\gamma = 82,008(1)$
Volumen/Å ³	3504(1)
Formeleinheiten	2
Röntgendichte/g cm ⁻³	2,627
Temperatur	100 K
$2\theta_{max}$	52,74 °
hkl -Bereich	$-15 \leq h \leq 15$, $-18 \leq k \leq 18$, $-24 \leq l \leq 24$
F(000)	2540
Absorptionskoeffizient μ/mm^{-1}	14,137
Zahl der gemessenen Reflexe	28581
davon symmetrieunabhängig	14222 ($R_{int} = 0,0349$)
Anzahl der Parameter	557
Restelektronendichte/e·Å ⁻³ (max/min)	4,44/-3,07
R_1 ($I > 2\sigma(I)$)	0,0495
wR_2 ($I > 2\sigma(I)$)	0,1059
R_1 (alle Daten)	0,0664
wR_2 (alle Daten)	0,1196
Datenbank	CCDC 779213
freies Volumen	34,7 %
freies Volumen mit Lösungsmittel	21,1 %
Lösungsmittel pro Formeleinheit	3 AC
Besonderheiten	

Tabelle A.47.: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsfaktoren (Å²) von 19. U_{eq} ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U_{eq}
W1	0,55477(4)	0,57619(3)	0,26659(3)	0,03233(13)
W2	0,69743(4)	0,68202(3)	0,35921(2)	0,02600(11)
W3	0,43545(4)	0,74100(3)	0,36615(3)	0,02600(11)
W4	0,45725(4)	0,77696(4)	0,19601(3)	0,03551(13)
W5	0,71899(4)	0,71732(4)	0,18888(3)	0,03685(14)
W6	0,59987(4)	0,88200(3)	0,28909(3)	0,02865(12)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
O1	0,5604(6)	0,7000(5)	0,4141(4)	0,0263(17)
O2	0,4825(6)	0,8614(5)	0,3578(4)	0,0263(17)
O3	0,6564(6)	0,5673(5)	0,3342(4)	0,0272(18)
O4	0,3668(6)	0,7776(6)	0,2828(5)	0,034(2)
O5	0,4989(7)	0,8914(6)	0,2216(4)	0,033(2)
O6	0,6930(6)	0,8141(5)	0,3525(4)	0,0282(18)
O7	0,5780(6)	0,7298(5)	0,2765(4)	0,0251(17)
O8	0,4451(6)	0,6152(5)	0,3398(4)	0,0311(19)
O9	0,7881(6)	0,6802(6)	0,2713(4)	0,034(2)
O10	0,7100(7)	0,8425(6)	0,2152(4)	0,036(2)
O11	0,8235(8)	0,7078(8)	0,1241(5)	0,059(3)
O12	0,6157(8)	0,9947(6)	0,2997(5)	0,045(2)
O13	0,4621(7)	0,6444(6)	0,2026(5)	0,039(2)
O14	0,6714(8)	0,5956(6)	0,1976(5)	0,042(2)
O15	0,3315(7)	0,7518(6)	0,4307(5)	0,042(2)
O16	0,5945(7)	0,7584(7)	0,1414(4)	0,044(2)
O17	0,7880(7)	0,6480(7)	0,4182(5)	0,042(2)
O18	0,5376(8)	0,4625(6)	0,2588(5)	0,046(2)
O19	0,3692(8)	0,8107(7)	0,1361(5)	0,055(3)
Au1	0,10555(3)	0,27553(3)	0,13741(2)	0,02259(10)
Au2	0,06958(3)	0,23865(3)	0,29558(2)	0,02050(10)
P1	0,2797(2)	0,19887(19)	0,12334(14)	0,0220(6)
P2	0,1681(2)	0,09440(19)	0,30516(14)	0,0207(6)
P3	-0,0178(2)	0,38548(19)	0,31379(14)	0,0203(6)
P4	-0,0683(2)	0,35057(19)	0,13304(14)	0,0212(6)
C1	0,3757(9)	0,2768(8)	0,0936(6)	0,026(2)
C2	0,3846(10)	0,3504(8)	0,1334(6)	0,032(3)
C3	0,4568(11)	0,4118(9)	0,1118(7)	0,040(3)
C4	0,5217(11)	0,4034(9)	0,0509(7)	0,041(3)
C5	0,5140(11)	0,3308(9)	0,0100(7)	0,044(3)
C6	0,4393(10)	0,2680(9)	0,0309(7)	0,036(3)
C7	0,2947(9)	0,1127(8)	0,0580(6)	0,028(3)
C8	0,2384(11)	0,1332(10)	0,0018(7)	0,043(3)
C9	0,2494(13)	0,0727(11)	-0,0519(9)	0,058(4)
C10	0,3156(13)	-0,0102(11)	-0,0450(9)	0,057(4)
C11	0,3688(11)	-0,0327(10)	0,0113(7)	0,043(3)
C12	0,3597(11)	0,0285(9)	0,0660(7)	0,042(3)
C13	0,3303(9)	0,1360(7)	0,2005(5)	0,023(2)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
C14	0,2609(9)	0,0608(7)	0,2293(5)	0,022(2)
C15	0,0894(9)	-0,0021(7)	0,3245(5)	0,023(2)
C16	-0,0171(10)	0,0093(9)	0,3106(6)	0,034(3)
C17	-0,0753(11)	-0,0651(9)	0,3224(6)	0,036(3)
C18	-0,0288(10)	-0,1494(9)	0,3506(6)	0,036(3)
C19	0,0776(10)	-0,1581(9)	0,3659(6)	0,034(3)
C20	0,1354(10)	-0,0863(8)	0,3539(6)	0,029(3)
C21	0,2487(9)	0,0952(7)	0,3754(6)	0,023(2)
C22	0,3581(9)	0,0660(8)	0,3716(6)	0,027(2)
C23	0,4172(11)	0,0719(9)	0,4267(6)	0,036(3)
C24	0,3682(10)	0,1093(8)	0,4875(6)	0,033(3)
C25	0,2598(12)	0,1417(10)	0,4916(8)	0,049(4)
C26	0,1995(10)	0,1354(8)	0,4372(6)	0,034(3)
C27	0,0696(8)	0,4747(7)	0,2918(5)	0,020(2)
C28	0,0258(9)	0,5674(8)	0,2855(6)	0,026(2)
C29	0,0929(10)	0,6333(9)	0,2677(6)	0,034(3)
C30	0,2055(10)	0,6089(9)	0,2590(7)	0,037(3)
C31	0,2483(11)	0,5168(9)	0,2655(6)	0,036(3)
C32	0,1815(9)	0,4480(8)	0,2813(6)	0,027(2)
C33	-0,0672(8)	0,3958(7)	0,4045(5)	0,019(2)
C34	-0,1773(9)	0,4141(8)	0,4275(6)	0,026(2)
C35	-0,2114(10)	0,4183(8)	0,4980(6)	0,029(3)
C36	-0,1377(9)	0,4058(8)	0,5465(6)	0,027(2)
C37	-0,0284(9)	0,3865(8)	0,5240(6)	0,027(2)
C38	0,0066(10)	0,3811(8)	0,4534(6)	0,028(3)
C39	-0,1351(8)	0,4229(7)	0,2670(5)	0,018(2)
C40	-0,1100(9)	0,4466(7)	0,1895(5)	0,023(2)
C41	-0,0959(8)	0,4019(7)	0,0478(5)	0,020(2)
C42	-0,0343(9)	0,3650(8)	-0,0101(6)	0,029(3)
C43	-0,0581(10)	0,3963(8)	-0,0771(7)	0,034(3)
C44	-0,1422(10)	0,4668(8)	-0,0859(6)	0,031(3)
C45	-0,2016(10)	0,5075(9)	-0,0285(6)	0,035(3)
C46	-0,1783(10)	0,4735(8)	0,0387(6)	0,031(3)
C47	-0,1678(9)	0,2728(8)	0,1561(6)	0,026(2)
C48	-0,1372(11)	0,1781(9)	0,1655(6)	0,035(3)
C49	-0,2120(11)	0,1195(10)	0,1851(7)	0,040(3)
C50	-0,3192(11)	0,1535(9)	0,1964(7)	0,039(3)
C51	-0,3515(11)	0,2479(9)	0,1901(7)	0,040(3)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
C52	-0,2754(10)	0,3060(9)	0,1685(6)	0,036(3)
O100	-0,1881(7)	0,2119(5)	0,3508(4)	0,032(2)
C100	-0,1938(14)	0,1678(12)	0,4020(9)	0,060(4)
C101	-0,276(2)	0,1019(17)	0,4192(13)	0,116(9)
C102	-0,1225(14)	0,1562(12)	0,4569(9)	0,064(5)
O101	0,3873(10)	0,2874(7)	0,3126(6)	0,067(3)
C104	0,4235(13)	0,3152(11)	0,3623(8)	0,052(4)
C105	0,531(2)	0,289(2)	0,3748(16)	0,145(11)
C106	0,3625(14)	0,3781(12)	0,4139(9)	0,063(4)
O102	0,0736(11)	1,0030(9)	0,1169(7)	0,081(4)
C107	0,0807(16)	0,9230(15)	0,1056(10)	0,073(5)
C108	0,0846(14)	0,8672(11)	0,1600(8)	0,059(4)
C109	0,0724(13)	0,8813(11)	0,0217(8)	0,059(4)

Tabelle A.48.: Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für **19**.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
W1	0,0356(3)	0,0240(2)	0,0394(3)	-0,0130(2)	-0,0147(2)	0,0037(2)
W2	0,0246(2)	0,0283(2)	0,0260(2)	-0,00480(19)	-0,00650(19)	-0,00150(19)
W3	0,0233(2)	0,0198(2)	0,0333(3)	-0,00225(19)	0,00200(19)	-0,00135(18)
W4	0,0371(3)	0,0360(3)	0,0329(3)	-0,0029(2)	-0,0142(2)	0,0064(2)
W5	0,0348(3)	0,0458(3)	0,0251(3)	-0,0060(2)	0,0042(2)	0,0075(2)
W6	0,0324(3)	0,0237(2)	0,0288(3)	-0,00088(19)	0,0036(2)	-0,0062(2)
O1	0,030(4)	0,022(4)	0,028(4)	0,000(3)	-0,005(3)	-0,005(3)
O2	0,032(4)	0,015(4)	0,030(4)	-0,006(3)	0,003(3)	0,001(3)
O3	0,030(4)	0,017(4)	0,036(5)	-0,010(3)	-0,009(4)	-0,001(3)
O4	0,022(4)	0,033(5)	0,046(5)	0,002(4)	-0,008(4)	0,002(4)
O5	0,039(5)	0,031(5)	0,025(4)	0,003(3)	0,000(4)	0,005(4)
O6	0,026(4)	0,028(4)	0,035(4)	-0,007(3)	-0,003(4)	-0,013(3)
O7	0,020(4)	0,030(4)	0,025(4)	-0,006(3)	-0,006(3)	0,006(3)
O8	0,027(4)	0,027(4)	0,041(5)	-0,010(4)	-0,004(4)	-0,006(3)
O9	0,025(4)	0,046(5)	0,028(4)	0,001(4)	-0,004(4)	0,009(4)
O10	0,038(5)	0,046(5)	0,022(4)	-0,001(4)	0,004(4)	-0,006(4)
O11	0,046(6)	0,074(8)	0,049(6)	0,000(5)	0,010(5)	0,009(5)
O12	0,060(6)	0,029(5)	0,047(6)	0,003(4)	0,009(5)	-0,017(4)
O13	0,039(5)	0,036(5)	0,046(5)	-0,014(4)	-0,018(4)	-0,001(4)
O14	0,051(6)	0,037(5)	0,037(5)	-0,015(4)	-0,019(4)	0,008(4)
O15	0,038(5)	0,032(5)	0,052(6)	0,005(4)	0,007(4)	-0,003(4)

Weiter auf der nächsten Seite

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
O16	0,046(6)	0,056(6)	0,026(5)	-0,006(4)	-0,009(4)	0,018(5)
O17	0,035(5)	0,058(6)	0,038(5)	-0,004(4)	-0,020(4)	-0,005(4)
O18	0,064(7)	0,020(4)	0,059(6)	-0,016(4)	-0,020(5)	-0,002(4)
O19	0,052(6)	0,060(7)	0,052(6)	0,003(5)	-0,027(5)	0,006(5)
Au1	0,0220(2)	0,0240(2)	0,0212(2)	-0,00198(16)	-0,00289(16)	-0,00030(17)
Au2	0,0235(2)	0,0165(2)	0,0211(2)	-0,00256(16)	-0,00182(16)	-0,00075(16)
P1	0,0238(15)	0,0222(14)	0,0196(13)	-0,0024(11)	-0,0011(11)	-0,0019(11)
P2	0,0242(15)	0,0163(13)	0,0215(14)	-0,0017(11)	-0,0009(11)	-0,0031(11)
P3	0,0241(15)	0,0174(13)	0,0193(13)	-0,0034(11)	-0,0027(11)	-0,0004(11)
P4	0,0217(14)	0,0212(14)	0,0207(14)	-0,0025(11)	-0,0021(11)	-0,0021(11)
O100	0,045(5)	0,028(4)	0,019(4)	-0,006(3)	-0,007(4)	0,012(4)
O101	0,106(10)	0,029(5)	0,066(7)	0,000(5)	-0,028(7)	0,001(6)
O102	0,080(9)	0,074(9)	0,092(10)	-0,012(7)	-0,015(8)	-0,010(7)

A.20. [Au₂(dppp)₂][Mo₆O₁₉] 20

Kristallzustand	nass
Summenformel	C ₅₈ H ₅₈ Au ₂ Mo ₆ N ₂ O ₁₉ P ₄
Kristall	blaue Nadeln (0,10 x 0,02 x 0,05 mm ³)
Kristallsystem, Raumgruppe	triklin, P $\bar{1}$ (Nr. 2)
Gitterkonstanten/Å, °	$a = 11,697(2)$, $b = 11,761(1)$, $c = 12,812(2)$ $\alpha = 76,312(2)$, $\beta = 73,577(2)$, $\gamma = 82,038(2)$
Volumen/Å ³	1637(1)
Formeleinheiten	1
Röntgendichte/g cm ⁻³	2,211
Temperatur	100 K
$2\theta_{max}$	46,36 °
hkl -Bereich	$-12 \leq h \leq 12$, $-12 \leq k \leq 12$, $-14 \leq l \leq 14$
F(000)	1042
Absorptionskoeffizient μ/mm^{-1}	5,741
Zahl der gemessenen Reflexe	10191
davon symmetrieunabhängig	4636 ($R_{int} = 0,0449$)
Anzahl der Parameter	263
Restelektronendichte/e·Å ⁻³ (max/min)	1,73/-1,04
R_1 ($I > 2\sigma(I)$)	0,0468
wR_2 ($I > 2\sigma(I)$)	0,0971
R_1 (alle Daten)	0,0610
wR_2 (alle Daten)	0,1050
Datenbank	-
freies Volumen	8,7 %
freies Volumen mit Lösungsmittel	0 %
Lösungsmittel pro Formeleinheit	1 AN
Besonderheiten	

Tabelle A.49.: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsfaktoren (Å²) von **20**. U_{eq} ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U_{eq}
Mo1	0,45301(8)	0,18712(8)	0,53484(10)	0,0362(3)
Mo2	0,30875(7)	-0,00359(8)	0,48395(8)	0,0231(2)
Mo3	0,56239(8)	0,07814(10)	0,31133(8)	0,0384(3)
O1	0,5000	0,0000	0,5000	0,0125(19)
O2	0,4182(6)	0,0898(6)	0,6818(6)	0,0360(19)
O3	0,4280(6)	0,3238(7)	0,5583(8)	0,055(3)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
O4	0,3095(5)	0,1538(5)	0,5174(6)	0,0256(17)
O5	0,5204(6)	0,2148(6)	0,3747(7)	0,041(2)
O6	0,1677(6)	0,0047(6)	0,4720(6)	0,0300(18)
O7	0,3943(6)	0,0686(6)	0,3357(6)	0,0324(18)
O8	0,3770(6)	-0,1510(6)	0,4586(6)	0,0314(18)
O9	0,6088(7)	0,1343(9)	0,1738(7)	0,063(3)
O10	0,7074(6)	0,0587(6)	0,3596(6)	0,0287(17)
Au1	0,97475(3)	0,90903(3)	0,72428(3)	0,02101(14)
P1	0,9787(2)	0,7219(2)	0,6945(2)	0,0197(6)
P2	0,9411(2)	1,0954(2)	0,7632(2)	0,0183(6)
C1	0,8532(9)	0,6523(8)	0,7984(8)	0,023(2)
C2	0,8711(9)	0,5567(9)	0,8850(8)	0,028(3)
C3	0,7744(9)	0,5094(9)	0,9668(9)	0,032(3)
C4	0,6599(10)	0,5547(9)	0,9651(9)	0,035(3)
C5	0,6406(9)	0,6487(9)	0,8815(8)	0,030(3)
C6	0,7377(9)	0,6969(9)	0,7998(8)	0,026(2)
C7	1,1101(8)	0,6240(8)	0,7067(8)	0,021(2)
C8	1,1110(9)	0,5058(9)	0,7005(8)	0,027(3)
C9	1,2072(9)	0,4298(9)	0,7165(8)	0,026(2)
C10	1,3030(9)	0,4664(9)	0,7399(9)	0,031(3)
C11	1,3042(9)	0,5812(9)	0,7435(9)	0,030(3)
C12	1,2087(9)	0,6621(9)	0,7262(8)	0,026(2)
C13	0,9518(8)	0,7182(8)	0,5624(7)	0,017(2)
C14	1,0306(8)	0,7951(8)	0,4619(7)	0,018(2)
C15	1,0039(8)	1,2062(8)	0,6431(8)	0,020(2)
C16	1,0122(8)	1,1199(8)	0,8645(8)	0,018(2)
C17	0,9573(10)	1,1842(9)	0,9451(9)	0,030(3)
C18	1,0251(9)	1,2152(9)	1,0081(9)	0,029(3)
C19	1,1456(9)	1,1805(9)	0,9885(9)	0,028(3)
C20	1,1988(9)	1,1135(9)	0,9105(8)	0,027(2)
C21	1,1321(9)	1,0827(9)	0,8495(9)	0,030(3)
C22	0,7820(8)	1,1358(8)	0,8100(8)	0,018(2)
C23	0,7424(8)	1,2527(8)	0,8220(8)	0,022(2)
C24	0,6181(8)	1,2780(9)	0,8602(8)	0,022(2)
C25	0,5378(10)	1,1965(9)	0,8809(9)	0,033(3)
C26	0,5775(9)	1,0853(9)	0,8663(8)	0,030(3)
C27	0,7000(9)	1,0533(9)	0,8300(8)	0,025(2)
C100	0,2432(9)	0,5486(9)	0,4094(9)	0,028(3)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
C101	0,3500(10)	0,5799(10)	0,4289(10)	0,045(3)
N1	0,1595(8)	0,5305(8)	0,3915(7)	0,037(2)

Tabelle A.50.: Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für **20**.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Mo1	0,0187(5)	0,0271(6)	0,0710(8)	-0,0287(6)	-0,0122(5)	0,0050(4)
Mo2	0,0148(5)	0,0237(5)	0,0336(6)	-0,0123(4)	-0,0071(4)	0,0024(4)
Mo3	0,0205(5)	0,0599(7)	0,0273(6)	0,0006(5)	-0,0038(5)	0,0000(5)
O1	0,012(5)	0,009(5)	0,016(5)	-0,009(4)	0,001(4)	0,001(4)
O2	0,017(4)	0,051(5)	0,048(5)	-0,029(4)	-0,010(4)	0,006(3)
O3	0,018(4)	0,042(5)	0,118(8)	-0,045(5)	-0,017(5)	0,006(4)
O4	0,007(3)	0,023(4)	0,046(5)	-0,011(4)	-0,005(3)	0,001(3)
O5	0,022(4)	0,030(4)	0,062(6)	0,004(4)	-0,006(4)	-0,003(3)
O6	0,015(4)	0,030(4)	0,055(5)	-0,017(4)	-0,020(4)	0,004(3)
O7	0,023(4)	0,051(5)	0,030(4)	-0,018(4)	-0,016(3)	0,007(3)
O8	0,016(4)	0,028(4)	0,058(5)	-0,024(4)	-0,010(4)	0,001(3)
O9	0,026(5)	0,108(8)	0,037(5)	0,011(5)	-0,006(4)	0,002(5)
O10	0,016(4)	0,031(4)	0,035(4)	-0,006(4)	-0,001(3)	-0,002(3)
Au1	0,0217(2)	0,0204(2)	0,0215(2)	-0,00737(18)	-0,00439(18)	-0,00091(16)
P1	0,0227(15)	0,0170(14)	0,0191(15)	-0,0061(12)	-0,0044(12)	0,0006(11)
P2	0,0171(14)	0,0176(14)	0,0208(15)	-0,0071(12)	-0,0042(11)	0,0006(11)

A.21. $[\text{Au}_2(\text{dppp})_2]_2[\text{Mo}_8\text{O}_{26}]$ 21

Kristallzustand	nass
Summenformel	$\text{C}_{112}\text{H}_{110}\text{Au}_4\text{Cl}_{3,5}\text{Mo}_8\text{N}_{0,5}\text{O}_{26}\text{P}_8$
Kristall	farblose Platten (0,10 x 0,10 x 0,05 mm ³)
Kristallsystem, Raumgruppe	monoklin, $P2_1/m$ (Nr. 14)
Gitterkonstanten/Å, °	$a = 13,733(2)$, $b = 20,664(1)$, $c = 23,381(1)$ $\beta = 103,731(1)$
Volumen/Å ³	6445(1)
Formeleinheiten	2
Röntgendichte/g cm ⁻³	1,961
Temperatur	100 K
$2\theta_{max}$	54,62 °
hkl -Bereich	$-17 \leq h \leq 17$, $-26 \leq k \leq 26$, $-29 \leq l \leq 30$
F(000)	3650
Absorptionskoeffizient μ/mm^{-1}	5,519
Zahl der gemessenen Reflexe	54509
davon symmetrieunabhängig	14772 ($R_{int} = 0,0451$)
Anzahl der Parameter	785
Restelektronendichte/e·Å ⁻³ (max/min)	7,38/-1,63
R_1 ($I > 2\sigma(I)$)	0,0589
wR_2 ($I > 2\sigma(I)$)	0,1727
R_1 (alle Daten)	0,0707
wR_2 (alle Daten)	0,1865
Datenbank	CCDC 779215
freies Volumen	17,8 %
freies Volumen mit Lösungsmittel	7,8 %
Lösungsmittel pro Formeleinheit	1 AN, 2,5 DCM
Besonderheiten	C anisotrop verfeinert

Tabelle A.51.: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsfaktoren (Å²) von 21. U_{eq} ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U_{eq}
Mo1	-0,23773(8)	0,7500	0,19132(5)	0,0261(2)
Mo2	-0,06931(6)	0,63743(4)	0,19084(4)	0,02369(18)
Mo3	0,13025(6)	0,63729(4)	0,31090(4)	0,02325(18)
Mo4	0,09141(8)	0,7500	0,19195(5)	0,0214(2)
Mo5	-0,03012(8)	0,7500	0,31045(5)	0,0207(2)
Mo6	0,29772(8)	0,7500	0,31237(6)	0,0267(3)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
O1	-0,3520(7)	0,7500	0,2086(5)	0,037(2)
O2	-0,2652(7)	0,7500	0,1161(5)	0,032(2)
O3	-0,1606(7)	0,7500	0,2879(4)	0,027(2)
O4	-0,1961(5)	0,6606(3)	0,2039(3)	0,0264(14)
O5	-0,0547(7)	0,7500	0,2043(4)	0,0226(18)
O6	-0,0070(7)	0,7500	0,3854(4)	0,028(2)
O7	-0,0140(5)	0,6586(3)	0,2933(3)	0,0252(13)
O8	-0,0653(5)	0,5567(3)	0,2060(3)	0,0322(16)
O9	-0,0933(5)	0,6422(4)	0,1164(3)	0,0308(15)
O10	0,0712(7)	0,7500	0,1172(4)	0,028(2)
O11	0,0760(5)	0,6582(3)	0,2093(3)	0,0256(13)
O12	0,1166(6)	0,7500	0,2985(4)	0,0219(18)
O13	0,1536(5)	0,6394(4)	0,3855(3)	0,0320(15)
O14	0,1270(5)	0,5565(3)	0,2945(3)	0,0308(15)
O15	0,2235(7)	0,7500	0,2153(4)	0,027(2)
O16	0,2570(5)	0,6604(3)	0,2982(3)	0,0276(14)
O17	0,3187(7)	0,7500	0,3872(5)	0,033(2)
O18	0,4141(8)	0,7500	0,2973(6)	0,041(3)
Au1	0,53735(2)	0,621597(16)	0,253346(14)	0,01941(10)
Au2	-0,15292(4)	0,2500	0,13768(2)	0,02150(13)
Au3	0,15942(4)	0,2500	0,34078(2)	0,02309(13)
P1	0,63796(16)	0,61621(10)	0,34815(10)	0,0174(4)
P2	0,43267(16)	0,61636(10)	0,15971(10)	0,0175(4)
P3	-0,15372(16)	0,36131(11)	0,13860(10)	0,0195(4)
P4	0,16953(17)	0,36130(11)	0,34130(10)	0,0209(4)
C1	0,7308(7)	0,5512(4)	0,3566(4)	0,0217(17)
C2	0,8142(7)	0,5596(5)	0,3326(4)	0,0248(18)
C3	0,8831(7)	0,5113(5)	0,3362(5)	0,031(2)
C4	0,8692(8)	0,4524(5)	0,3625(4)	0,031(2)
C5	0,7866(8)	0,4423(5)	0,3849(5)	0,033(2)
C6	0,7165(7)	0,4927(4)	0,3821(4)	0,0242(18)
C7	0,5658(6)	0,6016(4)	0,4020(4)	0,0187(16)
C8	0,6154(7)	0,5896(4)	0,4614(4)	0,0218(17)
C9	0,5583(8)	0,5789(5)	0,5027(4)	0,0272(19)
C10	0,4551(8)	0,5819(5)	0,4861(4)	0,028(2)
C11	0,4058(7)	0,5943(5)	0,4282(4)	0,0268(19)
C12	0,4609(7)	0,6034(4)	0,3859(4)	0,0239(18)
C13	0,7103(6)	0,6891(4)	0,3720(4)	0,0207(17)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
C14	0,6459(9)	0,7500	0,3568(6)	0,022(2)
C15	0,4981(7)	0,6028(4)	0,1025(4)	0,0200(17)
C16	0,6010(7)	0,6063(4)	0,1146(4)	0,0228(18)
C17	0,6514(7)	0,5982(5)	0,0700(4)	0,028(2)
C18	0,5982(8)	0,5848(5)	0,0129(5)	0,031(2)
C19	0,4952(8)	0,5813(4)	0,0006(4)	0,0274(19)
C20	0,4449(7)	0,5907(4)	0,0439(4)	0,0231(18)
C21	0,3449(6)	0,5497(4)	0,1546(4)	0,0214(17)
C22	0,2624(7)	0,5557(5)	0,1803(4)	0,0254(19)
C23	0,1969(7)	0,5047(5)	0,1775(4)	0,030(2)
C24	0,2147(8)	0,4463(5)	0,1523(4)	0,032(2)
C25	0,2964(8)	0,4397(5)	0,1280(4)	0,030(2)
C26	0,3611(7)	0,4912(4)	0,1290(4)	0,0240(18)
C27	0,3562(6)	0,6887(4)	0,1384(4)	0,0186(16)
C28	0,4211(10)	0,7500	0,1493(6)	0,024(3)
C29	-0,1530(7)	0,3975(5)	0,0679(4)	0,0257(19)
C30	-0,1332(8)	0,3591(5)	0,0240(4)	0,034(2)
C31	-0,1146(12)	0,3874(7)	-0,0260(6)	0,053(3)
C32	-0,1163(10)	0,4544(7)	-0,0309(5)	0,050(3)
C33	-0,1421(10)	0,4919(6)	0,0115(6)	0,052(3)
C34	-0,1585(9)	0,4645(5)	0,0617(5)	0,038(2)
C35	-0,2583(7)	0,3922(5)	0,1642(4)	0,0269(19)
C36	-0,3461(7)	0,3573(6)	0,1530(5)	0,036(2)
C37	-0,4289(9)	0,3786(7)	0,1729(6)	0,050(3)
C38	-0,4225(9)	0,4356(7)	0,2041(5)	0,049(3)
C39	-0,3366(9)	0,4713(6)	0,2150(5)	0,044(3)
C40	-0,2529(8)	0,4504(5)	0,1952(4)	0,032(2)
C41	-0,0399(6)	0,3956(4)	0,1847(4)	0,0222(17)
C42	-0,0067(7)	0,3700(4)	0,2478(4)	0,0237(18)
C43	0,0962(7)	0,3998(5)	0,2749(4)	0,0249(18)
C44	0,1378(7)	0,3976(5)	0,4051(4)	0,0258(19)
C45	0,1491(7)	0,4646(5)	0,4152(4)	0,028(2)
C46	0,1275(7)	0,4906(5)	0,4651(5)	0,033(2)
C47	0,0948(8)	0,4513(6)	0,5047(5)	0,037(3)
C48	0,0841(7)	0,3861(6)	0,4950(5)	0,034(2)
C49	0,1053(7)	0,3574(5)	0,4451(4)	0,029(2)
C50	0,2978(7)	0,3849(5)	0,3407(4)	0,0262(19)
C51	0,3725(7)	0,3408(5)	0,3610(5)	0,037(2)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
C52	0,4707(8)	0,3536(7)	0,3556(6)	0,046(3)
C53	0,4900(8)	0,4117(6)	0,3299(6)	0,044(3)
C54	0,4153(8)	0,4557(6)	0,3121(5)	0,037(2)
C55	0,3197(8)	0,4434(5)	0,3168(5)	0,029(2)
C100	0,8566(15)	0,7500	1,0157(9)	0,008(4)
C101	0,5222(13)	0,7500	1,0056(7)	0,038(3)
C102	0,260(3)	0,2500	0,172(2)	0,080(16)
C103	0,6272(12)	0,7500	0,5064(7)	0,036(3)
C104	0,5161(12)	0,7500	0,4896(7)	0,039(3)
N100	0,7095(12)	0,7500	0,5173(7)	0,005(3)
Cl1	0,8434(3)	0,67968(16)	0,96983(16)	0,0448(9)
Cl2	0,5636(5)	0,7500	0,9414(3)	0,0235(12)
Cl3	0,3837(4)	0,7500	0,9867(2)	0,0135(9)
Cl4	0,1324(6)	0,2500	0,1811(3)	0,0348(15)
Cl5	0,3396(10)	0,2879(6)	0,2226(5)	0,047(3)

Tabelle A.52.: Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für **21**.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Mo1	0,0194(5)	0,0262(6)	0,0306(6)	0,000	0,0017(4)	0,000
Mo2	0,0222(4)	0,0216(4)	0,0266(4)	-0,0022(3)	0,0045(3)	-0,0044(3)
Mo3	0,0202(4)	0,0202(4)	0,0282(4)	0,0008(3)	0,0034(3)	0,0012(3)
Mo4	0,0189(5)	0,0201(5)	0,0268(6)	0,000	0,0082(4)	0,000
Mo5	0,0174(5)	0,0211(5)	0,0243(5)	0,000	0,0063(4)	0,000
Mo6	0,0184(5)	0,0237(5)	0,0361(6)	0,000	0,0026(5)	0,000
O1	0,020(5)	0,047(6)	0,043(6)	0,000	0,004(4)	0,000
O2	0,028(5)	0,027(5)	0,036(6)	0,000	-0,004(4)	0,000
O3	0,021(4)	0,027(5)	0,035(5)	0,000	0,007(4)	0,000
O4	0,019(3)	0,027(3)	0,031(4)	0,003(3)	0,001(3)	-0,004(3)
O5	0,022(4)	0,020(4)	0,027(5)	0,000	0,009(4)	0,000
O6	0,022(5)	0,040(5)	0,023(5)	0,000	0,003(4)	0,000
O7	0,022(3)	0,024(3)	0,029(3)	0,001(3)	0,005(3)	0,000(3)
O8	0,033(4)	0,016(3)	0,044(4)	-0,003(3)	0,003(3)	-0,006(3)
O9	0,029(4)	0,035(4)	0,026(4)	-0,001(3)	0,002(3)	-0,005(3)
O10	0,027(5)	0,028(5)	0,030(5)	0,000	0,008(4)	0,000
O11	0,021(3)	0,022(3)	0,034(4)	-0,001(3)	0,008(3)	0,000(2)
O12	0,018(4)	0,020(4)	0,029(5)	0,000	0,008(4)	0,000
O13	0,026(3)	0,036(4)	0,031(4)	0,001(3)	0,000(3)	0,001(3)
O14	0,031(4)	0,021(3)	0,039(4)	0,000(3)	0,005(3)	0,002(3)

Weiter auf der nächsten Seite

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
O15	0,022(4)	0,021(4)	0,036(5)	0,000	0,007(4)	0,000
O16	0,023(3)	0,023(3)	0,035(4)	0,000(3)	0,004(3)	0,001(3)
O17	0,024(5)	0,034(5)	0,035(6)	0,000	-0,007(4)	0,000
O18	0,021(5)	0,040(6)	0,063(8)	0,000	0,009(5)	0,000
Au1	0,01911(18)	0,01858(17)	0,01953(18)	-0,00089(12)	0,00257(13)	0,00084(11)
Au2	0,0209(2)	0,0164(2)	0,0263(3)	0,000	0,00386(18)	0,000
Au3	0,0206(2)	0,0221(2)	0,0254(3)	0,000	0,00300(19)	0,000
P1	0,0151(9)	0,0169(10)	0,0191(10)	0,0000(8)	0,0017(8)	-0,0001(8)
P2	0,0163(10)	0,0162(10)	0,0195(10)	-0,0011(8)	0,0033(8)	-0,0005(8)
P3	0,0190(10)	0,0156(10)	0,0231(11)	0,0002(8)	0,0031(8)	0,0008(8)
P4	0,0184(10)	0,0220(11)	0,0211(11)	-0,0012(9)	0,0022(8)	-0,0014(8)
C1	0,022(4)	0,020(4)	0,022(4)	-0,001(3)	0,002(3)	0,000(3)
C2	0,024(4)	0,027(5)	0,025(5)	0,000(4)	0,008(4)	-0,001(4)
C3	0,026(5)	0,033(5)	0,033(5)	-0,008(4)	0,006(4)	0,001(4)
C4	0,029(5)	0,030(5)	0,030(5)	-0,001(4)	0,002(4)	0,014(4)
C5	0,036(5)	0,022(5)	0,040(6)	0,003(4)	0,006(4)	0,005(4)
C6	0,027(4)	0,014(4)	0,034(5)	0,002(4)	0,011(4)	0,002(3)
C7	0,016(4)	0,018(4)	0,025(4)	0,002(3)	0,010(3)	0,003(3)
C8	0,023(4)	0,018(4)	0,023(4)	-0,001(3)	0,004(3)	0,002(3)
C9	0,034(5)	0,025(5)	0,022(4)	0,004(4)	0,006(4)	0,000(4)
C10	0,033(5)	0,024(5)	0,029(5)	0,003(4)	0,015(4)	-0,002(4)
C11	0,018(4)	0,027(5)	0,035(5)	0,006(4)	0,006(4)	0,000(4)
C12	0,021(4)	0,019(4)	0,031(5)	0,001(4)	0,005(4)	0,000(3)
C13	0,019(4)	0,019(4)	0,023(4)	-0,002(3)	0,003(3)	-0,001(3)
C14	0,018(6)	0,019(6)	0,028(6)	0,000	0,006(5)	0,000
C15	0,023(4)	0,017(4)	0,020(4)	0,004(3)	0,006(3)	0,000(3)
C16	0,020(4)	0,021(4)	0,027(5)	-0,002(4)	0,007(4)	0,000(3)
C17	0,025(5)	0,026(5)	0,036(5)	-0,004(4)	0,012(4)	-0,004(4)
C18	0,042(6)	0,025(5)	0,031(5)	-0,008(4)	0,021(4)	-0,009(4)
C19	0,039(5)	0,021(4)	0,023(4)	-0,001(4)	0,008(4)	-0,001(4)
C20	0,021(4)	0,019(4)	0,027(5)	-0,002(3)	0,003(3)	-0,002(3)
C21	0,022(4)	0,019(4)	0,022(4)	0,000(3)	0,005(3)	0,000(3)
C22	0,023(4)	0,024(4)	0,031(5)	0,000(4)	0,010(4)	0,000(4)
C23	0,025(5)	0,038(5)	0,028(5)	0,003(4)	0,010(4)	-0,004(4)
C24	0,040(6)	0,025(5)	0,033(5)	-0,002(4)	0,014(4)	-0,010(4)
C25	0,041(6)	0,021(4)	0,031(5)	-0,005(4)	0,012(4)	-0,012(4)
C26	0,026(4)	0,016(4)	0,033(5)	-0,003(4)	0,012(4)	0,000(3)
C27	0,020(4)	0,017(4)	0,018(4)	-0,003(3)	0,002(3)	0,002(3)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
C28	0,021(6)	0,021(6)	0,027(7)	0,000	-0,001(5)	0,000
C29	0,021(4)	0,026(5)	0,028(5)	0,004(4)	0,002(4)	0,001(4)
C30	0,038(6)	0,036(5)	0,024(5)	0,000(4)	0,000(4)	-0,002(5)
C31	0,069(9)	0,062(8)	0,030(6)	-0,002(6)	0,013(6)	0,002(7)
C32	0,058(8)	0,061(8)	0,027(6)	0,020(6)	0,001(5)	0,001(6)
C33	0,055(8)	0,040(7)	0,058(8)	0,023(6)	0,008(6)	0,004(6)
C34	0,044(6)	0,032(5)	0,038(6)	0,010(5)	0,008(5)	0,004(5)
C35	0,026(5)	0,026(4)	0,028(5)	0,001(4)	0,004(4)	0,006(4)
C36	0,020(5)	0,037(6)	0,048(6)	-0,002(5)	0,004(4)	-0,001(4)
C37	0,025(5)	0,063(8)	0,063(8)	-0,010(7)	0,013(5)	-0,003(5)
C38	0,036(6)	0,082(10)	0,030(6)	0,004(6)	0,009(5)	0,024(6)
C39	0,046(7)	0,050(7)	0,031(6)	-0,011(5)	-0,004(5)	0,025(6)
C40	0,035(5)	0,027(5)	0,029(5)	-0,002(4)	0,001(4)	0,005(4)
C41	0,017(4)	0,020(4)	0,027(5)	0,004(3)	0,000(3)	0,001(3)
C42	0,022(4)	0,020(4)	0,029(5)	-0,004(3)	0,006(4)	-0,002(3)
C43	0,023(4)	0,024(4)	0,025(5)	-0,001(4)	0,001(4)	-0,002(4)
C44	0,019(4)	0,027(5)	0,030(5)	-0,003(4)	0,003(4)	0,004(4)
C45	0,022(4)	0,025(5)	0,033(5)	-0,004(4)	0,000(4)	-0,001(4)
C46	0,024(5)	0,031(5)	0,037(6)	-0,012(4)	-0,005(4)	0,009(4)
C47	0,029(5)	0,059(7)	0,024(5)	-0,005(5)	0,005(4)	0,014(5)
C48	0,021(5)	0,053(7)	0,027(5)	0,004(5)	0,004(4)	0,011(4)
C49	0,026(5)	0,035(5)	0,023(5)	0,002(4)	0,004(4)	0,006(4)
C50	0,019(4)	0,034(5)	0,026(5)	-0,004(4)	0,004(4)	-0,006(4)
C51	0,020(5)	0,036(6)	0,050(7)	0,011(5)	0,002(4)	-0,010(4)
C52	0,022(5)	0,057(8)	0,057(8)	0,002(6)	0,005(5)	0,002(5)
C53	0,022(5)	0,060(8)	0,051(7)	-0,017(6)	0,010(5)	-0,016(5)
C54	0,036(6)	0,034(6)	0,043(6)	-0,011(5)	0,013(5)	-0,012(5)
C55	0,029(5)	0,022(4)	0,036(5)	-0,002(4)	0,005(4)	0,003(4)
C100	0,008(9)	0,002(8)	0,010(9)	0,000	-0,009(7)	0,000
Cl1	0,073(3)	0,0226(15)	0,0332(18)	-0,0025(13)	0,0007(17)	0,0023(16)
C101	0,056(10)	0,023(7)	0,036(8)	0,000	0,015(7)	0,000
Cl4	0,038(4)	0,041(4)	0,033(4)	0,000	0,024(3)	0,000
Cl2	0,023(3)	0,025(3)	0,025(3)	0,000	0,012(2)	0,000
C102	0,027(18)	0,15(5)	0,05(3)	0,000	-0,003(17)	0,000
Cl3	0,019(2)	0,010(2)	0,012(2)	0,000	0,0051(19)	0,000
Cl5	0,055(7)	0,041(6)	0,034(6)	-0,005(5)	-0,010(5)	-0,014(5)

A.22. [Au₂(dppp)₂]₂[PMo₁₂O₄₀] 22

Kristallzustand	nass
Summenformel	C ₁₁₂ H ₁₁₃ Au ₄ Mo ₁₂ NO ₄₁ P ₉
Kristall	blaue Kristalle (0,10 x 0,05 x 0,08 mm ³)
Kristallsystem, Raumgruppe	monoklin, P2 ₁ /n (Nr. 14)
Gitterkonstanten/Å, °	$a = 15,552(2)$, $b = 22,061(2)$, $c = 20,057(2)$ $\beta = 103,716(1)$
Volumen/Å ³	6685(1)
Formeleinheiten	2
Röntgendichte/g cm ⁻³	2,159
Temperatur	100 K
$2\theta_{max}$	52,74 °
<i>hkl</i> -Bereich	$-19 \leq h \leq 19$, $-27 \leq k \leq 27$, $-24 \leq l \leq 24$
F(000)	4150
Absorptionskoeffizient μ/mm^{-1}	5,636
Zahl der gemessenen Reflexe	54900
davon symmetrieunabhängig	13668 ($R_{int} = 0,0256$)
Anzahl der Parameter	560
Restelektronendichte/e·Å ⁻³ (max/min)	2,66/-1,14
R_1 ($I > 2\sigma(I)$)	0,0458
wR_2 ($I > 2\sigma(I)$)	0,1166
R_1 (alle Daten)	0,0513
wR_2 (alle Daten)	0,1208
Datenbank	CCDC 779216
freies Volumen	12,2 %
freies Volumen mit Lösungsmittel	0,7 %
Lösungsmittel pro Formeleinheit	1 AN, 1 EtOH
Besonderheiten	C anisotrop verfeinert, POM fehlgeordnet

Tabelle A.53.: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsfaktoren (Å²) von 22. U_{eq} ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U_{eq}
Mo1	-0,05824(4)	0,85644(3)	0,55771(3)	0,02845(14)
Mo2	0,13642(5)	1,00765(3)	0,37995(4)	0,03530(16)
Mo3	0,22391(4)	0,94787(3)	0,54838(4)	0,03637(16)
Mo4	0,16648(4)	1,08976(3)	0,60915(3)	0,03094(15)
Mo5	0,06088(5)	0,86554(3)	0,42753(3)	0,03566(16)
Mo6	0,09202(5)	0,95325(3)	0,67134(3)	0,03078(14)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
O1	0,0903(4)	0,7999(2)	0,3973(3)	0,0349(12)
O2	0,1973(5)	1,0091(3)	0,3221(4)	0,0571(18)
O3	0,2413(5)	1,1319(3)	0,6619(3)	0,0545(18)
O4	-0,0175(4)	0,9827(3)	0,6786(4)	0,060(2)
O5	-0,0904(5)	0,7915(3)	0,5853(4)	0,060(2)
O6	0,1795(5)	0,9250(3)	0,6210(4)	0,064(2)
O7	0,1334(4)	1,0866(3)	0,4043(4)	0,058(2)
O8	0,2329(5)	1,0316(3)	0,5781(5)	0,073(3)
O9	0,0327(4)	0,8803(3)	0,6305(4)	0,059(2)
O10	0,3279(4)	0,9236(3)	0,5695(4)	0,0537(17)
O11	0,1344(6)	1,0313(3)	0,6708(4)	0,072(3)
O12	0,1360(6)	0,9303(3)	0,7508(3)	0,062(2)
O13	-0,0565(5)	0,8723(5)	0,3807(3)	0,081(3)
O14	0,1501(5)	1,1304(4)	0,5256(3)	0,075(3)
O15	0,1652(7)	0,8819(3)	0,4988(4)	0,094(4)
O16	0,0981(8)	0,9215(4)	0,3742(4)	0,099(4)
O17	0,0173(5)	0,8328(5)	0,5048(3)	0,086(3)
O18	0,2172(7)	0,9865(4)	0,4597(4)	0,097(4)
O19	-0,0817(6)	1,0017(4)	0,4409(5)	0,0208(18)
O20	-0,0142(6)	0,9656(4)	0,5604(5)	0,0212(18)
O21	-0,0326(5)	0,9344(4)	0,4794(5)	0,0201(18)
O22	0,0780(6)	0,9685(4)	0,4728(5)	0,0214(18)
O99	0,1569(10)	0,3076(7)	0,3450(8)	0,059(4)
Au1	0,796953(17)	0,209003(12)	0,702412(14)	0,02631(8)
Au2	0,958835(19)	0,317637(14)	0,524030(14)	0,03178(8)
P1	0,92231(12)	0,21496(8)	0,79036(9)	0,0260(4)
P2	0,66185(12)	0,21284(8)	0,62480(9)	0,0257(4)
P3	1,08378(13)	0,33384(10)	0,61062(11)	0,0359(5)
P4	0,83574(13)	0,30593(9)	0,43506(10)	0,0301(4)
P5	0,0000	1,0000	0,5000	0,0199(5)
C1	0,9360(6)	0,1466(4)	0,8421(4)	0,0388(18)
C2	1,0010(10)	0,1504(7)	0,9074(7)	0,082(4)
C3	1,0136(13)	0,0984(9)	0,9475(10)	0,108(5)
C4	0,9477(15)	0,0501(11)	0,9223(13)	0,140(8)
C5	0,9044(15)	0,0414(11)	0,8579(12)	0,135(7)
C6	0,9013(10)	0,0943(7)	0,8114(9)	0,091(4)
C7	0,9135(5)	0,2774(3)	0,8474(4)	0,0300(15)
C8	0,9848(5)	0,3143(3)	0,8780(4)	0,0332(16)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
C9	0,9726(6)	0,3625(4)	0,9197(4)	0,0401(18)
C10	0,8905(6)	0,3736(4)	0,9308(4)	0,0403(18)
C11	0,8206(6)	0,3376(4)	0,9013(5)	0,0426(19)
C12	0,8319(6)	0,2899(4)	0,8599(4)	0,0394(18)
C13	0,5905(5)	0,1477(3)	0,6243(4)	0,0302(15)
C14	0,5002(6)	0,1527(5)	0,6179(5)	0,048(2)
C15	0,4484(7)	0,1009(5)	0,6144(5)	0,056(2)
C16	0,4849(7)	0,0461(5)	0,6150(5)	0,057(2)
C17	0,5742(8)	0,0397(5)	0,6187(6)	0,062(3)
C18	0,6277(7)	0,0914(5)	0,6248(5)	0,052(2)
C19	0,6060(5)	0,2800(3)	0,6458(4)	0,0310(15)
C20	0,6134(7)	0,2946(5)	0,7133(5)	0,050(2)
C21	0,5785(7)	0,3480(5)	0,7327(6)	0,053(2)
C22	0,5404(9)	0,3853(7)	0,6876(7)	0,078(4)
C23	0,5498(15)	0,3819(11)	0,6226(12)	0,139(7)
C24	0,5645(13)	0,3185(9)	0,5983(11)	0,113(6)
C25	0,6676(5)	0,2178(3)	0,5354(4)	0,0277(14)
C26	0,7310(5)	0,2659(3)	0,5204(4)	0,0292(15)
C27	0,7564(5)	0,2522(3)	0,4535(4)	0,0292(15)
C28	0,8608(6)	0,2804(4)	0,3562(4)	0,0376(17)
C29	0,9225(8)	0,3124(6)	0,3320(7)	0,068(3)
C30	0,9408(10)	0,2974(7)	0,2695(8)	0,084(4)
C31	0,8998(7)	0,2491(5)	0,2323(6)	0,054(2)
C32	0,8453(6)	0,2143(4)	0,2587(5)	0,047(2)
C33	0,8257(6)	0,2293(4)	0,3206(5)	0,046(2)
C34	0,7732(5)	0,3746(4)	0,4134(4)	0,0374(17)
C35	0,7750(7)	0,4174(5)	0,4644(5)	0,051(2)
C36	0,7219(8)	0,4689(6)	0,4489(7)	0,070(3)
C37	0,6662(10)	0,4757(7)	0,3839(7)	0,081(4)
C38	0,6660(8)	0,4338(6)	0,3338(7)	0,071(3)
C39	0,7197(7)	0,3835(5)	0,3481(5)	0,051(2)
C40	1,0869(6)	0,4076(4)	0,6493(4)	0,0402(18)
C41	1,0395(10)	0,4540(7)	0,6135(8)	0,088(4)
C42	1,0443(12)	0,5134(9)	0,6413(10)	0,110(5)
C43	1,0947(10)	0,5229(7)	0,7084(8)	0,087(4)
C44	1,1426(8)	0,4797(6)	0,7402(6)	0,066(3)
C45	1,1396(8)	0,4218(5)	0,7138(6)	0,062(3)
C46	1,1827(6)	0,3251(4)	0,5797(5)	0,045(2)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
C47	1,2444(15)	0,3719(11)	0,5933(12)	0,137(7)
C48	1,3297(17)	0,3588(12)	0,5765(13)	0,150(8)
C49	1,3278(17)	0,3070(11)	0,5281(13)	0,150(8)
C50	1,2815(7)	0,2600(5)	0,5374(6)	0,057(3)
C51	1,2084(7)	0,2706(5)	0,5626(5)	0,055(2)
C52	1,0966(5)	0,2782(4)	0,6793(4)	0,0354(17)
C53	1,0220(5)	0,2804(3)	0,7166(4)	0,0303(15)
C54	1,0248(5)	0,2243(3)	0,7625(4)	0,0280(14)
C99	0,1740(18)	0,3597(12)	0,3762(13)	0,071(6)
C100	0,171(2)	0,4065(15)	0,3288(16)	0,094(9)
C101	0,8237(16)	0,3980(11)	0,6881(13)	0,064(6)
C102	0,8421(17)	0,4278(12)	0,7438(13)	0,071(6)
N1	0,8201(17)	0,3702(12)	0,6460(14)	0,093(7)

Tabelle A.54.: Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für **22**.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Mo1	0,0363(3)	0,0226(3)	0,0295(3)	0,0050(2)	0,0137(3)	0,0019(2)
Mo2	0,0484(4)	0,0299(3)	0,0343(3)	0,0018(3)	0,0232(3)	-0,0063(3)
Mo3	0,0250(3)	0,0268(3)	0,0518(4)	0,0000(3)	-0,0020(3)	0,0028(2)
Mo4	0,0239(3)	0,0337(3)	0,0327(3)	-0,0092(3)	0,0016(2)	-0,0009(2)
Mo5	0,0538(4)	0,0222(3)	0,0272(3)	-0,0056(2)	0,0022(3)	0,0128(3)
Mo6	0,0373(3)	0,0299(3)	0,0235(3)	0,0039(2)	0,0039(3)	0,0005(3)
O1	0,044(3)	0,028(3)	0,035(3)	-0,002(2)	0,014(2)	0,010(2)
O2	0,050(4)	0,075(5)	0,059(4)	-0,010(4)	0,038(3)	0,003(3)
O3	0,056(4)	0,064(4)	0,042(3)	-0,015(3)	0,009(3)	-0,030(3)
O4	0,034(3)	0,050(4)	0,096(6)	-0,038(4)	0,011(3)	0,001(3)
O5	0,050(4)	0,036(3)	0,084(5)	0,025(3)	-0,003(4)	-0,012(3)
O6	0,074(5)	0,032(3)	0,113(6)	0,017(4)	0,074(5)	0,017(3)
O7	0,029(3)	0,052(4)	0,093(5)	-0,039(4)	0,013(3)	0,000(3)
O8	0,080(5)	0,031(3)	0,139(7)	-0,031(4)	0,087(5)	-0,021(3)
O9	0,031(3)	0,050(4)	0,094(5)	-0,042(4)	0,013(3)	-0,005(3)
O10	0,032(3)	0,046(4)	0,088(5)	0,017(3)	0,023(3)	0,017(3)
O11	0,123(7)	0,018(3)	0,098(6)	-0,004(3)	0,070(6)	-0,015(4)
O12	0,103(6)	0,042(4)	0,029(3)	0,002(3)	-0,007(3)	0,020(4)
O13	0,067(5)	0,148(8)	0,033(3)	0,028(4)	0,022(3)	0,070(5)
O14	0,066(5)	0,127(7)	0,034(3)	0,023(4)	0,018(3)	0,063(5)
O15	0,153(9)	0,041(4)	0,051(4)	0,020(3)	-0,047(5)	-0,048(5)

Weiter auf der nächsten Seite

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
O16	0,160(9)	0,047(4)	0,056(5)	0,023(4)	-0,041(5)	-0,053(5)
O17	0,071(5)	0,162(9)	0,033(3)	0,033(5)	0,026(3)	0,078(6)
O18	0,157(9)	0,050(4)	0,053(4)	0,021(4)	-0,037(5)	-0,052(5)
O19	0,021(4)	0,018(4)	0,024(5)	0,001(3)	0,007(4)	0,003(3)
O20	0,029(5)	0,014(4)	0,021(4)	-0,003(3)	0,006(4)	-0,002(4)
O21	0,013(4)	0,022(5)	0,025(5)	0,000(4)	0,004(3)	0,001(3)
O22	0,023(5)	0,016(4)	0,026(5)	-0,001(4)	0,008(4)	-0,003(4)
O99	0,060(9)	0,052(8)	0,060(9)	0,000(7)	0,008(7)	0,002(7)
Au1	0,02263(14)	0,02779(15)	0,02742(14)	0,00226(10)	0,00378(10)	-0,00009(10)
Au2	0,02908(15)	0,03756(17)	0,02657(15)	0,00388(11)	0,00235(11)	-0,00915(12)
P1	0,0255(9)	0,0270(9)	0,0242(9)	0,0044(7)	0,0036(7)	0,0039(7)
P2	0,0224(8)	0,0272(9)	0,0272(9)	-0,0016(7)	0,0052(7)	0,0000(7)
P3	0,0269(10)	0,0455(12)	0,0330(10)	0,0074(9)	0,0023(8)	-0,0103(8)
P4	0,0315(10)	0,0329(10)	0,0240(9)	0,0022(7)	0,0027(7)	-0,0063(8)
P5	0,0227(11)	0,0170(11)	0,0196(11)	-0,0003(9)	0,0044(9)	0,0015(9)

A.23. $[\text{Au}_2(\text{dppp})_2]_2[\text{SiW}_{12}\text{O}_{40}] \cdot 23$

Kristallzustand	nass
Summenformel	$\text{C}_{109}\text{H}_{106}\text{Au}_4\text{Cl}_2\text{O}_{40}\text{P}_8\text{SiW}_{12}$
Kristall	blaue Nadeln (0,05 x 0,05 x 0,02 mm ³)
Kristallsystem, Raumgruppe	monoklin, $P2_1/n$ (Nr. 14)
Gitterkonstanten/Å, °	$a = 15,523(1)$, $b = 22,198(1)$, $c = 20,073(1)$ $\beta = 103,578(1)$
Volumen/Å ³	6725(1)
Formeleinheiten	2
Röntgendichte/g cm ⁻³	2,666
Temperatur	100 K
$2\theta_{max}$	46,52 °
hkl -Bereich	$-17 \leq h \leq 17$, $-24 \leq k \leq 24$, $-22 \leq l \leq 22$
F(000)	4904
Absorptionskoeffizient μ/mm^{-1}	14,777
Zahl der gemessenen Reflexe	42506
davon symmetrieunabhängig	9656 ($R_{int} = 0,0801$)
Anzahl der Parameter	536
Restelektronendichte/e·Å ⁻³ (max/min)	5,22/-1,59
R_1 ($I > 2\sigma(I)$)	0,0526
wR_2 ($I > 2\sigma(I)$)	0,1238
R_1 (alle Daten)	0,0873
wR_2 (alle Daten)	0,1371
Datenbank	-
freies Volumen	12,4 %
freies Volumen mit Lösungsmittel	6,7 %
Lösungsmittel pro Formeleinheit	1 DCM
Besonderheiten	C anisotrop verfeinert

Tabelle A.55.: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsfaktoren (Å²) von **23**. U_{eq} ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U_{eq}
W1	0,83580(5)	0,58787(4)	0,39052(4)	0,0310(2)
W2	1,06340(5)	0,36011(4)	0,44281(4)	0,0280(2)
W3	0,77790(5)	0,44976(4)	0,45484(5)	0,0343(2)
W4	0,90707(5)	0,45131(4)	0,33180(4)	0,0264(2)
W5	0,86878(6)	0,50453(4)	0,62179(4)	0,0344(2)
W6	0,94069(7)	0,36583(4)	0,56939(4)	0,0380(3)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
Si1	1,0000	0,5000	0,5000	0,0201(16)
O1	0,9162(15)	0,4965(11)	0,4384(12)	0,024(6)
O2	0,9185(16)	0,4683(10)	0,5280(11)	0,020(6)
O3	1,0374(15)	0,4308(12)	0,5227(11)	0,023(6)
O4	0,9682(10)	0,3814(7)	0,3693(9)	0,058(5)
O5	0,8641(13)	0,4276(7)	0,2521(7)	0,065(5)
O6	0,8610(11)	0,5297(6)	0,3289(10)	0,067(6)
O7	0,7650(12)	0,5296(7)	0,4207(10)	0,065(5)
O8	0,7606(11)	0,6287(7)	0,3386(7)	0,051(4)
O9	0,7854(15)	0,4856(8)	0,5426(9)	0,093(8)
O10	0,8645(9)	0,5853(7)	0,5957(9)	0,056(5)
O11	0,8065(10)	0,5047(8)	0,6803(9)	0,059(5)
O12	0,9851(10)	0,5174(6)	0,6772(9)	0,058(5)
O13	0,9020(15)	0,4202(8)	0,6272(9)	0,100(8)
O14	0,8184(11)	0,4278(6)	0,3769(10)	0,068(6)
O15	0,8343(15)	0,3832(8)	0,5021(9)	0,094(8)
O16	0,6754(10)	0,4263(7)	0,4343(8)	0,049(4)
O17	0,9845(12)	0,3353(11)	0,4960(8)	0,094(8)
O18	1,0981(10)	0,2950(7)	0,4154(8)	0,055(5)
O19	1,1535(12)	0,3702(10)	0,5270(8)	0,091(8)
O20	1,0577(13)	0,3735(10)	0,6189(8)	0,091(8)
O21	0,9105(9)	0,3003(5)	0,6003(6)	0,031(3)
O22	0,9879(14)	0,5345(11)	0,5648(12)	0,019(6)
Au1	0,29641(5)	0,20811(4)	0,20127(4)	0,0264(2)
Au2	0,46280(6)	0,31851(4)	0,02652(4)	0,0337(2)
P1	0,5872(4)	0,3326(3)	0,1139(3)	0,0387(15)
P2	0,3405(4)	0,3072(2)	-0,0628(3)	0,0305(13)
P3	0,1624(3)	0,2131(2)	0,1234(2)	0,0257(12)
P4	0,4203(3)	0,2136(2)	0,2898(2)	0,0264(12)
C1	0,6007(14)	0,2770(10)	0,1836(11)	0,041(6)
C2	0,5216(12)	0,2792(8)	0,2168(9)	0,023(4)
C3	0,5254(12)	0,2223(8)	0,2621(9)	0,026(5)
C4	0,1687(12)	0,2190(8)	0,0346(9)	0,022(4)
C5	0,2338(13)	0,2654(9)	0,0206(10)	0,031(5)
C6	0,2611(13)	0,2530(9)	-0,0469(10)	0,030(5)
C7	0,6863(14)	0,3236(10)	0,0829(11)	0,038(5)
C8	0,7091(16)	0,2714(11)	0,0615(12)	0,053(7)
C9	0,7815(17)	0,2584(13)	0,0383(13)	0,060(7)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
C10	0,837(3)	0,3013(18)	0,041(2)	0,121(14)
C11	0,836(3)	0,355(2)	0,082(2)	0,138(16)
C12	0,749(2)	0,3692(18)	0,0971(19)	0,110(12)
C13	0,5933(15)	0,4055(10)	0,1529(12)	0,045(6)
C14	0,6393(19)	0,4175(13)	0,2208(15)	0,072(8)
C15	0,6446(19)	0,4785(13)	0,2435(15)	0,068(8)
C16	0,603(2)	0,5200(15)	0,2128(16)	0,080(9)
C17	0,560(3)	0,510(2)	0,141(3)	0,159(18)
C18	0,558(2)	0,4508(17)	0,112(2)	0,106(12)
C19	0,3646(12)	0,2818(8)	-0,1421(9)	0,025(4)
C20	0,3329(15)	0,2324(10)	-0,1759(11)	0,044(6)
C21	0,3503(15)	0,2156(11)	-0,2370(12)	0,050(6)
C22	0,3969(15)	0,2546(10)	-0,2675(12)	0,047(6)
C23	0,436(2)	0,3054(14)	-0,2338(15)	0,077(9)
C24	0,422(2)	0,3183(14)	-0,1697(16)	0,081(9)
C25	0,2760(13)	0,3757(9)	-0,0834(10)	0,035(5)
C26	0,2230(15)	0,3827(11)	-0,1468(12)	0,047(6)
C27	0,1668(17)	0,4333(12)	-0,1628(14)	0,059(7)
C28	0,1698(19)	0,4765(14)	-0,1119(15)	0,073(8)
C29	0,2228(17)	0,4699(13)	-0,0507(14)	0,064(7)
C30	0,2769(16)	0,4196(11)	-0,0317(12)	0,051(6)
C31	0,0896(12)	0,1476(8)	0,1215(9)	0,025(4)
C32	-0,0007(15)	0,1551(11)	0,1140(11)	0,045(6)
C33	-0,0517(17)	0,1025(11)	0,1110(12)	0,055(7)
C34	-0,0158(17)	0,0466(12)	0,1111(12)	0,056(7)
C35	0,0749(18)	0,0411(13)	0,1204(13)	0,066(8)
C36	0,1259(16)	0,0928(10)	0,1243(11)	0,049(6)
C37	0,1083(12)	0,2785(9)	0,1460(9)	0,026(5)
C38	0,1098(15)	0,2922(11)	0,2122(12)	0,049(6)
C39	0,0781(16)	0,3443(11)	0,2329(14)	0,057(7)
C40	0,044(2)	0,3840(14)	0,1887(16)	0,081(9)
C41	0,055(2)	0,3826(18)	0,124(2)	0,112(12)
C42	0,076(2)	0,3245(15)	0,0983(17)	0,091(10)
C43	0,4092(13)	0,2762(9)	0,3460(10)	0,030(5)
C44	0,3300(15)	0,2912(10)	0,3561(11)	0,041(6)
C45	0,3184(16)	0,3387(10)	0,3965(11)	0,048(6)
C46	0,3905(14)	0,3741(10)	0,4272(11)	0,044(6)
C47	0,4727(15)	0,3598(10)	0,4186(11)	0,042(6)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
C48	0,4822(13)	0,3111(9)	0,3782(10)	0,031(5)
C49	0,4370(13)	0,1467(8)	0,3407(10)	0,045(6)
C50	0,4855(16)	0,1469(12)	0,4083(12)	0,164(19)
C51	0,489(2)	0,0955(16)	0,4484(10)	0,22(3)
C52	0,443(2)	0,0440(12)	0,4208(16)	0,17(2)
C53	0,3945(18)	0,0438(8)	0,3531(17)	0,165(19)
C54	0,3915(13)	0,0952(10)	0,3131(10)	0,091(10)
C100	0,167(3)	0,153(2)	0,390(2)	0,059(14)
Cl1	0,1698(7)	0,1392(5)	0,3142(5)	0,040(3)
Cl2	0,1247(10)	0,0897(5)	0,4337(5)	0,060(4)

Tabelle A.56.: Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für **23**.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
W1	0,0265(5)	0,0402(6)	0,0252(4)	0,0108(4)	0,0038(4)	0,0010(4)
W2	0,0340(5)	0,0270(5)	0,0280(5)	-0,0088(4)	0,0174(4)	-0,0053(4)
W3	0,0249(5)	0,0248(5)	0,0489(6)	-0,0007(4)	0,0003(4)	-0,0016(4)
W4	0,0373(5)	0,0258(5)	0,0165(4)	-0,0029(3)	0,0074(4)	-0,0013(4)
W5	0,0525(6)	0,0310(5)	0,0280(5)	-0,0009(4)	0,0259(4)	0,0063(4)
W6	0,0632(7)	0,0275(5)	0,0208(4)	0,0045(4)	0,0053(4)	-0,0195(5)
Si1	0,022(4)	0,021(4)	0,016(4)	0,000(3)	0,001(3)	-0,005(3)
O1	0,020(14)	0,034(16)	0,019(13)	0,007(12)	0,008(11)	0,004(12)
O2	0,037(15)	0,003(12)	0,018(13)	-0,008(10)	0,006(11)	0,006(11)
O3	0,013(13)	0,045(17)	0,009(12)	-0,009(11)	-0,004(10)	0,010(12)
O4	0,033(9)	0,053(11)	0,093(13)	0,037(10)	0,022(9)	-0,003(8)
O5	0,119(16)	0,032(9)	0,033(9)	0,005(7)	-0,006(10)	-0,031(10)
O6	0,080(13)	0,021(8)	0,131(16)	0,021(9)	0,086(12)	0,012(8)
O7	0,085(13)	0,027(9)	0,103(14)	0,004(9)	0,060(12)	0,004(9)
O8	0,065(11)	0,061(11)	0,028(8)	0,014(8)	0,013(8)	0,032(9)
O9	0,15(2)	0,054(12)	0,045(11)	-0,017(9)	-0,043(12)	0,048(12)
O10	0,028(9)	0,047(10)	0,096(13)	0,040(9)	0,025(9)	-0,001(7)
O11	0,047(10)	0,076(13)	0,071(12)	0,010(10)	0,047(9)	0,004(9)
O12	0,051(10)	0,029(9)	0,093(13)	0,036(9)	0,019(10)	-0,008(8)
O13	0,16(2)	0,049(12)	0,058(12)	-0,036(10)	-0,045(13)	0,051(13)
O14	0,079(13)	0,018(8)	0,137(17)	0,015(9)	0,087(13)	0,018(8)
O15	0,146(19)	0,043(11)	0,061(12)	-0,029(9)	-0,042(12)	0,054(12)
O16	0,051(10)	0,045(10)	0,053(10)	-0,015(8)	0,019(8)	-0,009(8)
O17	0,075(13)	0,19(2)	0,031(9)	-0,026(11)	0,038(9)	-0,095(14)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
O18	0,044(10)	0,036(9)	0,075(12)	-0,010(8)	-0,005(9)	0,024(8)
O19	0,075(13)	0,17(2)	0,034(10)	-0,021(11)	0,030(9)	-0,091(14)
O20	0,089(14)	0,16(2)	0,037(10)	-0,022(11)	0,044(10)	-0,070(14)
O21	0,054(9)	0,021(7)	0,024(7)	0,003(6)	0,021(7)	-0,012(7)
O22	0,007(12)	0,029(15)	0,026(14)	-0,002(11)	0,011(11)	-0,013(11)
Au1	0,0266(4)	0,0303(5)	0,0237(4)	0,0003(3)	0,0084(3)	-0,0017(4)
Au2	0,0374(5)	0,0405(5)	0,0243(4)	0,0026(4)	0,0096(4)	-0,0105(4)
P1	0,029(3)	0,054(4)	0,033(3)	0,000(3)	0,009(3)	-0,007(3)
P2	0,039(3)	0,030(3)	0,024(3)	0,003(2)	0,011(2)	-0,004(3)
P3	0,025(3)	0,033(3)	0,021(3)	-0,008(2)	0,010(2)	-0,005(2)
P4	0,031(3)	0,028(3)	0,022(3)	0,003(2)	0,008(2)	0,004(2)
Cl1	0,032(6)	0,050(7)	0,043(6)	0,032(5)	0,022(5)	0,008(5)
Cl2	0,132(13)	0,027(7)	0,026(6)	0,011(5)	0,028(7)	0,000(7)

A.24. $(n\text{Bu}_4\text{N})_2[\text{Au}_3(\text{dppm})_2\text{Cl}_2][\text{PW}_{12}\text{O}_{40}]$ 24

Kristallzustand	nass
Summenformel	$\text{C}_{65}\text{H}_{40}\text{Au}_3\text{Cl}_2\text{N}_2\text{O}_{40}\text{P}_5\text{W}_{12}$
Kristall	farblose Nadeln (0,10 x 0,05 x 0,05 mm ³)
Kristallsystem, Raumgruppe	monoklin, $P2_1/n$ (Nr. 14)
Gitterkonstanten/Å, °	$a = 25,602(3)$, $b = 14,284(2)$, $c = 33,154(3)$, $\beta = 95,528(1)$
Volumen/Å ³	12068(2)
Formeleinheiten	4
Röntgendichte/g cm ⁻³	2,483
Temperatur	100 K
$2\theta_{max}$	43,30 °
hkl -Bereich	$-26 \leq h \leq 26$, $-14 \leq k \leq 14$, $-34 \leq l \leq 34$
F(000)	7992
Absorptionskoeffizient μ/mm^{-1}	15,188
Zahl der gemessenen Reflexe	61882
davon symmetrieunabhängig	14109 ($R_{int} = 0,0983$)
Anzahl der Parameter	863
Restelektronendichte/e·Å ⁻³ (max/min)	2,06/-1,97
R_1 ($I > 2\sigma(I)$)	0,1049
wR_2 ($I > 2\sigma(I)$)	0,2506
R_1 (alle Daten)	0,1301
wR_2 (alle Daten)	0,2660
Datenbank	CCDC 779217
freies Volumen	21,1 %
freies Volumen mit Lösungsmittel	5,9 %
Lösungsmittel pro Formeleinheit	3 AN
Besonderheiten	ein Polyoxometallat und beide $(n\text{Bu}_4\text{N})^+$ fehlgeordnet, H Atome fehlen an Kationen

Tabelle A.57.: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsfaktoren (Å²) von 24. U_{eq} ist definiert als ein Drittel der Spur des orthogonalisierten U_{ij} -Tensors.

	x	y	z	U_{eq}
W1	-0.08191(7)	0.02184(12)	0.21053(6)	0.0287(5)
W2	0.08151(8)	-0.05797(13)	0.30022(6)	0.0304(5)
W3	-0.06186(8)	0.35762(13)	0.25063(7)	0.0414(6)
W4	-0.12520(7)	0.16534(12)	0.28979(6)	0.0263(5)
W5	-0.03244(7)	0.29467(12)	0.35308(6)	0.0276(5)
W6	0.03984(8)	0.08313(16)	0.37743(6)	0.0384(6)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
W7	-0.01847(8)	0.21606(13)	0.17109(6)	0.0334(5)
W8	0.10427(7)	0.28181(13)	0.33795(6)	0.0296(5)
W9	-0.05270(8)	-0.04565(13)	0.31427(6)	0.0328(5)
W10	0.14625(8)	0.14018(14)	0.26052(6)	0.0352(5)
W11	0.07518(8)	0.34611(13)	0.23599(6)	0.0347(5)
W12	0.05229(8)	0.00876(14)	0.19603(6)	0.0375(5)
P99	0.0103(4)	0.1515(6)	0.2754(3)	0.006(2)
O1	0.0656(13)	-0.063(2)	0.2433(10)	0.047(9)
O2	-0.0930(12)	0.458(2)	0.2373(10)	0.041(9)
O3	0.0770(13)	-0.060(3)	0.1618(12)	0.058(11)
O4	-0.1261(14)	-0.040(2)	0.1809(10)	0.055(11)
O5	0.2075(14)	0.131(3)	0.2525(12)	0.061(11)
O6	-0.0691(15)	-0.053(2)	0.2590(10)	0.053(10)
O7	0.0396(13)	0.287(2)	0.1885(12)	0.054(11)
O8	-0.0860(13)	-0.138(2)	0.3307(11)	0.052(10)
O9	-0.1229(14)	0.105(2)	0.2386(10)	0.049(10)
O10	-0.0193(12)	-0.026(2)	0.1936(12)	0.055(10)
O11	-0.0605(13)	0.299(3)	0.2000(13)	0.078(14)
O12	0.0962(16)	0.360(2)	0.2891(12)	0.063(12)
O13	0.1512(16)	0.209(2)	0.3110(9)	0.057(11)
O14	0.1193(14)	-0.156(2)	0.3089(14)	0.073(14)
O15	-0.0307(12)	0.248(3)	0.1236(11)	0.071(14)
O16	0.1465(12)	0.340(3)	0.3704(12)	0.061(12)
O17	0.110(2)	0.077(3)	0.2146(10)	0.082(17)
O18	0.0089(18)	0.385(3)	0.2475(15)	0.099(18)
O19	0.1277(13)	0.255(3)	0.2333(10)	0.054(11)
O20	0.0121(16)	-0.094(3)	0.3040(11)	0.074(13)
O21	0.1315(16)	0.028(3)	0.2905(11)	0.066(12)
O22	-0.1191(18)	0.279(2)	0.2601(11)	0.073(15)
O23	-0.006(2)	0.110(3)	0.2303(14)	0.016(13)
O24	0.1033(19)	0.441(2)	0.2164(11)	0.070(13)
O25	0.015(2)	0.063(3)	0.3024(14)	0.015(13)
O26	0.0299(16)	0.114(2)	0.1657(12)	0.066(13)
O27	-0.034(2)	0.205(4)	0.2882(14)	0.025(16)
O28	-0.0723(17)	0.125(2)	0.1755(12)	0.071(13)
O29	-0.038(2)	0.100(5)	0.274(2)	0.05(2)
O30	0.0638(17)	0.205(3)	0.2779(13)	0.007(12)
O31	0.0524(12)	0.059(2)	0.4266(11)	0.043(9)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
O32	-0.1022(15)	0.051(2)	0.3151(9)	0.049(10)
O33	0.0364(14)	0.325(2)	0.3502(13)	0.063(12)
O34	-0.0945(17)	0.228(2)	0.3360(10)	0.063(12)
O35	-0.1881(14)	0.164(3)	0.2970(10)	0.061(12)
O36	0.0810(11)	-0.010(3)	0.3531(11)	0.061(12)
O37	-0.0080(13)	0.183(2)	0.3798(13)	0.061(12)
O38	-0.0473(15)	0.373(2)	0.3062(11)	0.068(14)
O39	-0.0169(14)	0.000(4)	0.3641(12)	0.095(18)
O40	-0.0492(15)	0.356(3)	0.3924(14)	0.084(16)
O41	0.0906(16)	0.177(3)	0.3686(15)	0.086(16)
O42	0.064(6)	0.090(5)	0.256(4)	0.21(11)
O43	0.026(3)	0.188(4)	0.318(2)	0.05(2)
O44	-0.001(2)	0.226(5)	0.241(2)	0.05(2)
Au1	0.77013(8)	0.08785(13)	0.00916(5)	0.0345(5)
Au2	0.68623(7)	0.17950(12)	0.06445(5)	0.0254(4)
Au3	0.76316(7)	0.31170(12)	0.01996(6)	0.0306(5)
P1	0.8002(5)	0.0258(8)	0.0684(4)	0.029(3)
P2	0.7462(4)	0.1642(8)	0.1205(3)	0.024(3)
P3	0.6175(4)	0.2004(8)	0.0150(3)	0.022(3)
P4	0.6848(4)	0.3652(8)	-0.0064(4)	0.026(3)
Cl2	0.8484(5)	0.2836(9)	0.0439(4)	0.047(3)
Cl1	0.7418(6)	0.1369(10)	-0.0550(4)	0.051(4)
C1	0.8632(18)	-0.030(3)	0.0711(14)	0.035(12)
C2	0.870(2)	-0.118(4)	0.0628(18)	0.060(16)
C3	0.916(2)	-0.167(4)	0.0612(18)	0.063(17)
C4	0.961(3)	-0.115(5)	0.079(2)	0.08(2)
C5	0.954(3)	-0.028(5)	0.0868(19)	0.068(18)
C6	0.9061(19)	0.018(4)	0.0831(15)	0.041(13)
C7	0.7592(15)	-0.068(3)	0.0851(12)	0.018(9)
C8	0.7112(19)	-0.082(3)	0.0636(15)	0.040(13)
C9	0.6760(19)	-0.151(3)	0.0743(14)	0.035(12)
C10	0.693(2)	-0.205(4)	0.1092(18)	0.063(17)
C11	0.741(2)	-0.184(4)	0.1329(18)	0.059(16)
C12	0.7741(19)	-0.114(3)	0.1211(14)	0.037(12)
C13	0.8093(14)	0.113(3)	0.1084(11)	0.011(9)
C14	0.7260(15)	0.090(3)	0.1583(12)	0.016(9)
C15	0.7578(15)	0.075(3)	0.1941(12)	0.018(9)
C16	0.749(2)	0.007(4)	0.2211(17)	0.052(15)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	x	y	z	U_{eq}
C17	0.7041(17)	-0.045(3)	0.2162(14)	0.032(11)
C18	0.6661(19)	-0.032(3)	0.1822(14)	0.036(12)
C19	0.6843(19)	0.039(3)	0.1553(15)	0.038(12)
C20	0.7570(17)	0.275(3)	0.1435(13)	0.027(11)
C21	0.8071(19)	0.316(3)	0.1499(14)	0.039(12)
C22	0.816(2)	0.408(4)	0.1664(16)	0.051(15)
C23	0.773(2)	0.453(4)	0.1773(15)	0.045(14)
C24	0.722(2)	0.411(4)	0.1728(16)	0.048(14)
C25	0.716(2)	0.326(4)	0.1538(15)	0.044(13)
C26	0.5586(19)	0.254(3)	0.0345(15)	0.038(12)
C27	0.5543(18)	0.270(3)	0.0733(14)	0.032(11)
C28	0.510(2)	0.304(4)	0.0863(17)	0.049(14)
C29	0.4673(19)	0.325(3)	0.0600(14)	0.035(12)
C30	0.4704(17)	0.310(3)	0.0207(13)	0.026(10)
C31	0.5177(17)	0.276(3)	0.0039(15)	0.035(12)
C32	0.5909(18)	0.095(3)	-0.0089(14)	0.034(12)
C33	0.5832(17)	0.023(3)	0.0168(14)	0.028(11)
C34	0.559(2)	-0.060(4)	-0.0005(16)	0.046(14)
C35	0.5449(17)	-0.063(3)	-0.0411(13)	0.029(11)
C36	0.5577(19)	0.007(4)	-0.0654(16)	0.045(13)
C37	0.577(2)	0.089(4)	-0.0485(17)	0.053(15)
C38	0.6378(17)	0.271(3)	-0.0256(13)	0.026(10)
C39	0.6519(17)	0.441(3)	0.0301(13)	0.029(11)
C40	0.6016(17)	0.463(3)	0.0205(13)	0.027(11)
C41	0.5811(17)	0.521(3)	0.0487(13)	0.027(11)
C42	0.609(2)	0.559(5)	0.086(2)	0.071(18)
C43	0.6603(19)	0.529(3)	0.0897(15)	0.041(13)
C44	0.682(2)	0.474(4)	0.0639(15)	0.045(14)
C45	0.6917(19)	0.434(3)	-0.0516(15)	0.038(12)
C46	0.682(2)	0.531(4)	-0.0548(18)	0.055(15)
C47	0.688(2)	0.574(4)	-0.0909(17)	0.056(16)
C48	0.7040(19)	0.539(4)	-0.1234(16)	0.042(13)
C49	0.719(3)	0.439(5)	-0.117(2)	0.075(19)
C50	0.7101(19)	0.393(4)	-0.0844(15)	0.040(13)
C51	0.967(4)	0.614(6)	0.135(3)	0.13(3)
C52	0.951(4)	0.528(6)	0.108(3)	0.12(3)
C53	0.893(15)	0.58(2)	0.073(8)	1.2(4)
C54	0.874(3)	0.580(5)	0.015(2)	0.08(2)

Weiter auf der nächsten Seite

	x	y	z	U_{eq}
C55	0.952(3)	0.738(5)	0.214(2)	0.09(2)
C56	0.897(4)	0.687(7)	0.225(3)	0.12(3)
C57	0.850(4)	0.760(8)	0.221(3)	0.14(4)
C58	0.812(4)	0.728(7)	0.243(3)	0.12(3)
C59	1.003(4)	0.620(7)	0.245(3)	0.12(3)
C60	1.018(4)	0.675(7)	0.288(3)	0.13(3)
C61	1.021(4)	0.621(6)	0.329(3)	0.11(3)
C62	0.967(3)	0.610(6)	0.336(2)	0.10(2)
C63	1.039(3)	0.728(6)	0.204(3)	0.10(3)
C64	1.091(4)	0.671(6)	0.199(3)	0.11(3)
C65	1.143(4)	0.735(8)	0.191(3)	0.15(4)
N1	0.984(4)	0.610(8)	0.181(3)	0.20(5)
N2	0.878(3)	0.145(6)	0.964(2)	0.13(3)

Tabelle A.58.: Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2) für 24.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
W1	0.0341(11)	0.0190(10)	0.0298(11)	-0.0059(8)	-0.0138(9)	0.0008(8)
W2	0.0386(12)	0.0204(10)	0.0297(11)	-0.0023(8)	-0.0090(9)	0.0084(9)
W3	0.0468(13)	0.0164(10)	0.0566(15)	-0.0093(10)	-0.0172(11)	0.0129(9)
W4	0.0266(11)	0.0188(10)	0.0322(11)	-0.0041(8)	-0.0035(9)	-0.0017(8)
W5	0.0353(11)	0.0204(10)	0.0264(11)	-0.0063(8)	-0.0010(9)	0.0035(8)
W6	0.0332(12)	0.0589(14)	0.0210(11)	0.0087(10)	-0.0082(9)	-0.0074(10)
W7	0.0470(13)	0.0289(11)	0.0232(11)	0.0031(9)	-0.0013(9)	0.0083(9)
W8	0.0317(11)	0.0236(10)	0.0318(11)	-0.0008(9)	-0.0059(9)	-0.0086(8)
W9	0.0495(13)	0.0235(10)	0.0239(11)	-0.0034(8)	-0.0044(9)	-0.0182(9)
W10	0.0286(11)	0.0418(12)	0.0350(12)	-0.0040(10)	0.0020(9)	0.0011(9)
W11	0.0382(12)	0.0223(11)	0.0445(13)	0.0010(9)	0.0079(10)	-0.0052(9)
W12	0.0495(13)	0.0276(11)	0.0367(12)	-0.0111(9)	0.0104(10)	0.0031(10)
P99	0.017(6)	0.000(5)	0.000(5)	0.001(4)	-0.002(4)	-0.001(4)
O1	0.05(2)	0.030(19)	0.05(2)	-0.001(17)	-0.011(18)	-0.019(16)
O2	0.05(2)	0.021(17)	0.05(2)	0.018(15)	-0.042(17)	0.019(15)
O3	0.03(2)	0.07(3)	0.08(3)	0.01(2)	0.016(19)	0.021(19)
O4	0.07(3)	0.04(2)	0.05(2)	-0.024(18)	-0.030(19)	0.012(19)
O5	0.05(2)	0.05(2)	0.08(3)	0.03(2)	0.01(2)	0.010(19)
O6	0.09(3)	0.021(18)	0.05(2)	0.001(16)	-0.01(2)	0.031(18)
O7	0.04(2)	0.030(19)	0.09(3)	-0.06(2)	0.01(2)	-0.022(16)
O8	0.05(2)	0.04(2)	0.07(3)	0.003(19)	0.014(19)	-0.030(18)

Weiter auf der nächsten Seite

A. Kristallographische Daten

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
O9	0.07(3)	0.03(2)	0.04(2)	0.009(17)	-0.019(19)	0.002(18)
O10	0.03(2)	0.04(2)	0.10(3)	0.02(2)	0.02(2)	-0.008(16)
O11	0.02(2)	0.13(4)	0.08(3)	-0.03(3)	-0.01(2)	-0.02(2)
O12	0.10(3)	0.03(2)	0.07(3)	0.034(19)	0.05(2)	0.02(2)
O13	0.11(3)	0.05(2)	0.012(17)	0.007(16)	0.002(19)	0.04(2)
O14	0.06(3)	0.008(17)	0.14(4)	0.02(2)	-0.05(3)	0.017(16)
O15	0.010(18)	0.15(4)	0.05(2)	0.01(3)	-0.009(16)	-0.02(2)
O16	0.019(18)	0.08(3)	0.08(3)	-0.04(2)	-0.029(19)	0.039(18)
O17	0.16(5)	0.08(3)	0.005(18)	0.021(19)	0.00(2)	-0.05(3)
O18	0.09(3)	0.08(3)	0.12(4)	-0.10(3)	0.00(3)	-0.01(3)
O19	0.04(2)	0.09(3)	0.027(19)	0.03(2)	0.009(16)	0.04(2)
O20	0.07(3)	0.12(4)	0.04(2)	-0.02(2)	0.02(2)	-0.02(3)
O21	0.09(3)	0.07(3)	0.04(2)	-0.01(2)	0.01(2)	-0.05(2)
O22	0.13(4)	0.017(19)	0.06(3)	0.028(18)	-0.06(3)	-0.03(2)
O23	0.04(4)	0.00(3)	0.00(3)	-0.02(2)	-0.02(2)	0.01(2)
O24	0.14(4)	0.03(2)	0.05(2)	-0.016(18)	0.03(3)	0.01(2)
O25	0.04(4)	0.00(3)	0.00(3)	0.02(2)	-0.01(2)	0.02(2)
O26	0.08(3)	0.03(2)	0.09(3)	0.01(2)	0.06(2)	0.04(2)
O27	0.05(4)	0.02(3)	0.00(3)	-0.03(2)	0.01(3)	-0.05(3)
O28	0.12(4)	0.03(2)	0.07(3)	0.03(2)	0.02(3)	0.05(2)
O29	0.00(3)	0.08(5)	0.06(5)	-0.02(4)	0.02(3)	0.03(3)
O30	0.00(2)	0.01(3)	0.01(3)	0.02(2)	-0.01(2)	-0.03(2)
O31	0.04(2)	0.021(17)	0.06(2)	-0.003(16)	-0.018(18)	0.006(15)
O32	0.09(3)	0.020(18)	0.03(2)	0.022(15)	-0.004(19)	0.013(18)
O33	0.04(2)	0.04(2)	0.11(3)	0.04(2)	0.03(2)	0.026(18)
O34	0.12(3)	0.026(19)	0.03(2)	0.015(16)	-0.05(2)	-0.01(2)
O35	0.04(2)	0.10(3)	0.03(2)	-0.03(2)	-0.007(17)	-0.02(2)
O36	0.012(17)	0.12(3)	0.05(2)	-0.05(2)	-0.005(16)	-0.007(19)
O37	0.04(2)	0.03(2)	0.12(3)	0.06(2)	0.03(2)	0.022(16)
O38	0.10(3)	0.021(18)	0.07(3)	0.053(19)	-0.05(2)	-0.06(2)
O39	0.03(2)	0.20(5)	0.06(3)	-0.06(3)	0.00(2)	-0.03(3)
O40	0.05(3)	0.10(3)	0.10(3)	-0.05(3)	0.04(2)	-0.08(3)
O41	0.07(3)	0.06(3)	0.14(4)	0.06(3)	0.02(3)	0.00(2)
O42	0.30(17)	0.00(4)	0.27(17)	0.00(6)	-0.31(16)	0.00(6)
O43	0.07(5)	0.01(3)	0.06(5)	-0.03(3)	0.00(4)	-0.05(3)
O44	0.02(4)	0.09(6)	0.05(4)	0.06(4)	0.02(3)	0.05(4)
Au1	0.0437(12)	0.0350(11)	0.0233(10)	-0.0006(9)	-0.0045(9)	0.0080(9)
Au2	0.0305(10)	0.0220(9)	0.0216(10)	-0.0012(8)	-0.0079(8)	0.0037(8)

Weiter auf der nächsten Seite

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Au3	0.0313(11)	0.0275(10)	0.0316(11)	0.0019(8)	-0.0034(8)	-0.0020(8)
P1	0.036(7)	0.026(7)	0.023(7)	0.001(5)	-0.003(6)	-0.001(5)
P2	0.023(6)	0.022(6)	0.026(7)	-0.011(5)	-0.009(5)	0.007(5)
P3	0.021(6)	0.021(6)	0.021(6)	-0.004(5)	-0.009(5)	-0.003(5)
P4	0.022(6)	0.015(6)	0.037(7)	-0.002(5)	-0.011(6)	0.002(5)
Cl2	0.032(7)	0.054(8)	0.055(9)	0.010(7)	-0.003(6)	0.002(6)
Cl1	0.071(10)	0.055(9)	0.025(7)	0.004(6)	-0.018(7)	0.015(7)
