

**Neue metallorganische Verbindungen  
der 3d-Übergangsmetalle und  
der Lanthanide**

**Inaugural-Dissertation  
zur Erlangung des Doktorgrades  
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät  
der Universität zu Köln  
vorgelegt von**

**Jennyfer Sierau  
aus Dortmund**

**Köln 2008**

Berichterstatter:

Prof. Dr. Gerd Meyer

Prof. Dr. Uwe Ruschewitz

Vorsitzender:

Prof. Dr. Ladislav Bohatý

Beisitzer:

Dr. Ingo Pantenburg

Tag der mündlichen Prüfung: 18. 11. 2008

Die experimentellen Untersuchungen zur vorliegenden Arbeit wurden in der Zeit von August 2006 bis Juli 2008 unter Anleitung von Herrn Prof. Dr. Gerd Meyer im Institut für Anorganische Chemie der Universität zu Köln durchgeführt.

*Für meine Großeltern*



## ***Kurzzusammenfassung***

Im Rahmen dieser Arbeit gelang die Synthese neuer Koordinationspolymere einiger ausgewählter 3d-Übergangs- sowie der Seltenerdelemente. Bei der direkten Umsetzung der Metalle mit Essigsäure, Benzoesäure oder 2-Methyl-8-hydroxychinolin konnten zwölf neue Verbindungen erhalten und mittels Einkristallstrukturanalyse charakterisiert werden.

Beim Einsatz von Essigsäure konnten ein neues Dysprosiumacetat **Dy<sub>2</sub>(OAc)<sub>6</sub>(H<sub>2</sub>O)** und zwei bimetallische Verbindungen des Dysprosiums synthetisiert werden [**Dy<sub>2</sub>M(OAc)<sub>8</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>](HOAc)<sub>2</sub> (M = Mn, Co). Das Dysprosium-Kobaltacetat konnte außerdem auf optische Eigenschaften, wie Emissions- und Absorptionsverhalten, sowie auf magnetisches und thermisches Verhalten untersucht werden. Die hier dargestellten Acetate beinhalten jeweils ein koordinierendes Wassermolekül, welches aus der Entwässerung der Essigsäure während der Reaktion zum Acetanhydrid entstanden sein könnte.**

Bei der Synthese mit Benzoesäure gelang es, drei neue Manganbenzoate **Mn<sub>3</sub>(OBz)<sub>6</sub>(HOBz)**, **Mn<sub>3</sub>(OBz)<sub>6</sub>(HOBz)<sub>2</sub>** und **Mn<sub>19</sub>(OBz)<sub>38</sub>(HOBz)<sub>2</sub>** darzustellen. Im Bereich der 3d-Übergangsmetalle konnten zusätzlich die neuen Benzoate des Eisens **Fe<sub>3</sub>(OBz)<sub>6</sub>(HOBz)** und des Nickels **Ni<sub>3</sub>(OBz)<sub>6</sub>(HOBz)<sub>4</sub>** synthetisiert werden. Das zuletzt genannte Manganbenzoat sowie das Eisenbenzoat konnten ebenfalls auf magnetisches und thermisches Verhalten untersucht werden. Die Übergangsmetallbenzoate beinhalten allesamt ein oder mehrere koordinierende Benzoesäuremoleküle. Diese bilden, ebenso wie die im Falle der Acetate koordinierenden Moleküle der Essigsäure und des Wassers, Wasserstoffbrückenbindungen zu benachbarten, koordinierten Anionen aus.

Die Seltenerdbenzoate des Terbioms **Tb(OBz)<sub>3</sub>** sowie des Dysprosiums **Dy(OBz)<sub>3</sub>** konnten strukturell charakterisiert werden. Im Falle des Dysprosiumbenzoats wurde ebenfalls das magnetische, thermische sowie das Absorptions- und Emissionsverhalten bestimmt. Außerdem gelang es, eine bimetallische Verbindung des Dysprosiums und des Kobalts herzustellen, **Dy<sub>x</sub>Co<sub>1-x</sub>(OBz)<sub>3</sub>**. Das Mischungsverhältnis der Metalle untereinander konnte bisher jedoch noch nicht ermittelt werden.

Außerdem gelang die Synthese eines Eisen(II)-2-Methyl-8-hydroxychinolats **Fe(OMQ)<sub>2</sub>**. Diese tetranukleare Verbindung weist mit ihrem doppelten würfelartigen Aufbau interessante Strukturcharakteristika auf.

## ***Abstract***

In the course of this work it was possible to synthesize new compounds from selected 3d transition metals and lanthanides. The direct reaction of the metals with acetic acid, benzoic acid and 2-methyl-8-hydroxyquinoline leads to twelve new complexes which could be characterized by single crystal X-ray diffraction.

A new dysprosium acetate  $\text{Dy}_2(\text{OAc})_6(\text{H}_2\text{O})$  and two bimetallic compounds  $[\text{Dy}_2\text{M}(\text{OAc})_8(\text{H}_2\text{O})_2](\text{HOAc})_2$  ( $\text{M} = \text{Mn}, \text{Co}$ ) could be synthesized by the action of acetic acid on the respective metals. The cobalt compound was analysed in respect to optical, magnetic and thermal properties. The acetates described here contain one coordinated water molecule. Most likely, during the synthesis the acetic acid decomposes to water and acetic anhydride.

Applying benzoic acid as the reactant, three new manganese benzoates  $\text{Mn}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})$ ,  $\text{Mn}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})_2$  and  $\text{Mn}_{19}(\text{OBz})_{38}(\text{HOBz})_2$  could be obtained. Other reactions within the 3d group yielded the benzoates of iron  $\text{Fe}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})$  and nickel  $\text{Ni}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})_4$ . The manganese benzoate  $\text{Mn}_{19}(\text{OBz})_{38}(\text{HOBz})_2$  and also the iron compound could be analysed for their magnetic and thermal behavior. All the transition metal benzoates contain one or more coordinated benzoic acid molecules. These, and also the acid and water molecules which are connected to the before described acetates, build up hydrogen bonds to neighbouring coordinated anions.

The rare earth benzoates of terbium  $\text{Tb}(\text{OBz})_3$  and dysprosium  $\text{Dy}(\text{OBz})_3$  could be characterized structurally. In the case of the dysprosium compound it was possible to analyse the substance for magnetic, thermal, absorption and emission behavior. Furthermore, it was possible to synthesize a bimetallic dysprosium-cobalt compound,  $\text{Dy}_x\text{Co}_{1-x}(\text{OBz})_3$ . However, there was no possibility to get any concise information about the ratio of the two metals.

Furthermore, it was possible to synthesize an iron(II)-2-methyl-8-hydroxyquinolinolate,  $\text{Fe}(\text{OMQ})_2$ . This tetranuclear compound builds up an interesting structure, adopting a face-shared double cubane structure with two missing vertices.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung .....</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Untersuchungsmethoden.....</b>	<b>3</b>
2.1	Einkristalldiffraktometrie .....	3
2.2	Pulverdiffraktometrie .....	4
2.3	Emission und Absorption .....	4
2.4	REM und EDX .....	5
2.5	DTA/TG .....	6
2.6	Magnetismus .....	7
<b>3</b>	<b>Allgemeines zu den Synthesen .....</b>	<b>9</b>
<b>4</b>	<b>Acetate .....</b>	<b>10</b>
4.1	$\text{Dy}_2(\text{OAc})_6(\text{H}_2\text{O})$ .....	11
4.2	$[\text{Dy}_2\text{M}(\text{OAc})_8(\text{H}_2\text{O})_2](\text{HOAc})_2$ (M = Mn, Co).....	16
<b>5</b>	<b>Benzoate.....</b>	<b>27</b>
5.1	Manganbenzoate.....	28
5.2	$\text{Fe}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})$ .....	46
5.3	$\text{Ni}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})_4$ .....	51
5.4	$\text{M}(\text{OBz})_3$ (M = Tb, Dy, $\text{Dy}_x\text{Co}_{1-x}$ ).....	55
<b>6</b>	<b>Eisen(II)-(8-hydroxychinaldinat) .....</b>	<b>66</b>
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick .....</b>	<b>71</b>
<b>8</b>	<b>Quellenangabe.....</b>	<b>74</b>
<b>9</b>	<b>Danksagung.....</b>	<b>79</b>
<b>10</b>	<b>Appendix.....</b>	<b>80</b>

## Abkürzungsverzeichnis

DTA	Differenzthermoanalyse
EDX	Energy Dispersive X-Ray Analysis
HOAc	Essigsäure
HOBz	Benzoessäure
HOMQ	2-Methyl-8-hydroxychinolin
OAc	Acetat-Anion
OBz	Benzoat-Anion
OMQ	2-Methyl-Chinolat-Anion
REM	Rasterelektronenmikroskopie
SE	Selten-Erd-Metall
SMM	Single Molecular Magnets
Squid	Superconducting Quantum Interference Device
TG	Thermogravimetrische Analyse
TMB	1,2,4,5-Tetramethylbenzol (Durol)

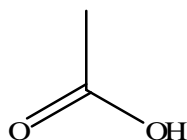
# 1 Einleitung

Koordinationspolymere der Übergangsmetalle und der Lanthanide mit organischen Liganden stehen derzeit im Fokus vieler Forschungsgruppen. Den Grund für dieses große Engagement stellen die interessanten Eigenschaften dar, die diese Verbindungen aufweisen können, wie zum Beispiel ein-, zwei- oder dreidimensionale magnetische Konfiguration<sup>[1-8]</sup>. Es konnte gezeigt werden, dass einzelne Moleküle solcher Verbindungen, so genannte Single-Molecular Magnets (SMM), bei tiefen Temperaturen magnetische Ordnungsphänomene aufweisen können<sup>[9-14]</sup>. Einige von diesen polynuklearen Materialien dienen als Vorstufe für die Synthese von neuen Nanopartikeln magnetischer Oxide<sup>[15]</sup>. Ebenso zeigen viele Verbindungen der Selten-Erd-Metalle magnetische und optische Eigenschaften<sup>[16-19]</sup>.

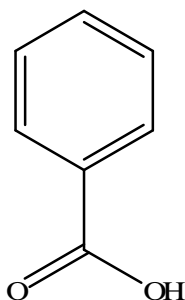
Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden weitere Koordinationspolymere mit organischen Liganden synthetisiert und mittels Einkristallstrukturanalyse charakterisiert. Diese bestehen im Wesentlichen aus zwei Baugruppen, den Metallkationen als Knotenpunkte und polyfunktionalen Liganden als Vernetzer. Der Strukturaufbau wird hauptsächlich von der Anzahl und der Geometrie der Koordinationsstellen der Baugruppen bestimmt. Übergangs- und Selten-Erd-Metalle werden häufig verwendet, da diese abhängig von ihren Oxidationsstufen, unterschiedlichste Koordinationszahlen aufweisen können. Je nach Wahl der Baugruppen und der Synthesebedingungen können Strukturen aufgebaut werden, in denen die Metallzentren nah beieinander liegen und somit elektronische Wechselwirkungen aufweisen können.

Als Synthesemethode wurde hier die direkte Methode zur Darstellung der neuen Koordinationspolyeder genutzt, bei der die Metalle direkt mit einer Säure (definiert nach Liebig<sup>[20]</sup>) unter Festkörperreaktionsbedingungen umgesetzt wurden. Es ist bereits zuvor gelungen, Verbindungen der 3d-Übergangsmetalle und der Lanthanide mit dieser Methode darzustellen<sup>[21-32]</sup>. Die schwachen Säuren sind in der Lage, ein Proton abzuspalten. Dieses wird in einer Redoxreaktion zum Wasserstoff reduziert, wohingegen das Metallatom oxidiert wird. Die Vorteile dieser Synthesemethode liegen in der Darstellung von solvensfreien Produkten sowie der einfachen Produktselektivität.

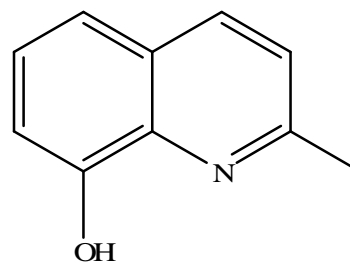
Die folgenden Liebig-Säuren wurden im Rahmen dieser Arbeit verwendet.



Essigsäure  
(HOAc)



Benzoessäure  
(HOBz)



2-Methyl-8-hydroxychinolin  
(HOMQ)

Carboxylate zeichnen sich durch eine große strukturelle Vielfalt aus, wobei die Variation der Koordination des Carboxylat-Ions von monodentater, über die Chelatisierung eines einzelnen Metallatoms, bis hin zu verschiedenen Verbrückungsmustern der Metallatome zu oligomeren und polymeren Bausteinen führen kann<sup>[33]</sup>. Das Chinolat bildet bei Koordination fünfgliedrige Chelatringe aus. Die voluminösen Liganden bilden Substanzen mit interessanten Strukturmotiven aus. Das Sauerstoffatom ist sowohl zu monodentater als auch zu zweizähliger Koordination befähigt. Eine weitere Aufgabe stellt die Präparation von bimetalischen Verbindungen der bereits erwähnten Metalle dar, da diese aufgrund von d-f-Wechselwirkungen zu neuen Materialien mit neuen ungewöhnlichen Eigenschaften führen können<sup>[34, 35]</sup>.

Die Metalle Mangan, Eisen, Kobalt und Nickel sowie Terbium und Dysprosium wurden aufgrund ihrer großen magnetische Momente, als auch ihrer optischen Eigenschaften wie dem Emissionsverhalten in ihren ionischen Verbindungen ausgewählt<sup>[36-41]</sup>. Aus der Kombination dieser Metalle sowie den distinktierten Liganden, in denen durchkonjugierte Systeme vorherrschen, erwartet man Substanzen mit elektronischen Wechselwirkungen, entweder direkt benachbarter Metallatome oder über den Austausch der  $\pi$ -Systeme der Liganden.

## 2 Untersuchungsmethoden

### 2.1 Einkristalldiffraktometrie

Erhält man Kristalle von geeigneter Größe (ca.  $0,1 \text{ mm} \cdot 0,1 \text{ mm} \cdot 0,1 \text{ mm}$ ), so können diese mit der Röntgen-Einkristallstrukturanalyse untersucht werden. Die Kristalle werden dazu in dünnwandige Glaskapillaren mit einem Innendurchmesser von  $0,1\text{-}0,5 \text{ mm}$  überführt und diese verschlossen. Die Kapillare wird auf dem Goniometerkopf des Diffraktometers so justiert, dass der Kristall bei Drehung immer im Strahlengang der Röntgenröhre verbleibt. In der unter Hochvakuum stehenden Röntgenröhre wird ein fein fokussierter Elektronenstrahl durch eine angelegte Hochspannung von  $30 - 60 \text{ kV}$  von der Kathode auf die Anode gelenkt. Die Anode besteht aus einer ebenen Platte eines hochreinen Metalls, meist Molybdän oder Kupfer. In den obersten Schichten des Metalls der Anode wird durch verschiedene Prozesse Röntgenstrahlung freigesetzt. Bei der „charakteristischen Röntgenstrahlung“ wird Strahlung einer scharf definierten Wellenlänge emittiert. Die Wellenlänge von Röntgenstrahlung ist vergleichbar mit den Bindungslängen in Molekülen und den Abständen der Atome in Kristallen (Größenordnung  $100 \text{ pm}$ ). Daher sind bei der Wechselwirkung eines Kristalls mit Röntgenstrahlung Interferenzerscheinungen zu erwarten.

Die Beugung findet an den sogenannten Netzebenen statt, deren Orientierung im Kristall mit den Millerschen Indizes  $hkl$  beschrieben wird. Solch eine Ebene schneidet die Achsen der Elementarzelle ( $a$ -,  $b$ - und  $c$ -Achse) in den Achsenabschnitten  $1/h$ ,  $1/k$  und  $1/l$ , wobei  $h$ ,  $k$  und  $l$  ganze Zahlen sind. Der resultierende Reflex wird beobachtet, wenn die Braggsche Gleichung erfüllt ist. Die Röntgenstrahlung wird an der Elektronenhülle eines Atoms bzw. Ions gebeugt. Das Streuvermögen eines Atoms wird durch den Atomformfaktor  $f$  beschrieben, der von dem Beugungswinkel  $\theta$  abhängt. Je größer  $\theta$  wird, desto kleiner wird der Atomformfaktor. Die Gesamtamplitude der an den  $(hkl)$ -Ebenen gebeugten Welle wird durch den Strukturfaktor  $F_{hkl}$  beschrieben. Die Intensität eines  $(hkl)$ -Reflexes ist proportional zu  $|F_{hkl}|^2$ . Der Strukturfaktor enthält die Information über die Elektronendichteverteilung in der Elementarzelle und ist sowohl von der Art der Atome als auch von deren Positionen abhängig. Das heißt, dass durch die Bestimmung der Reflexintensitäten die Elementarzelle rekonstruiert werden kann <sup>[42, 43]</sup>.

Bei der Strukturbestimmung durch Beugung von Röntgenstrahlung werden normalerweise zwischen  $1000$  und  $50000$  Reflexe gemessen. Da für jeden Reflex die verantwortliche

Netzebene (hkl) im Kristall eine ganz bestimmte, räumliche Orientierung hat, muss der Kristall im Raum bewegt werden, um sie nach und nach in Reflexionsstellung zu bringen.

Bei den zur Messung verwendeten Geräten handelt es sich um die STOE-Diffraktometer IPDS I und IPDS II (Image Plate Diffraction System) mit Mo-K $\alpha$ -Strahlung,  $\lambda = 0,71069 \text{ \AA}$ . Eine numerische Datenreduktion erfolgte nach Optimierung der Kristallflächen (*X-Shape*<sup>[44]</sup>; *X-Red*<sup>[45]</sup>). Die Strukturlösung und -verfeinerung erfolgte unter Verwendung der Programme *SIR92*<sup>[46]</sup> und *SHELXL97*<sup>[47]</sup> unter *WinGX*<sup>[48]</sup>. Die Atomformfaktoren und die Dispersionskorrekturen entstammen den *International Tables*<sup>[49]</sup>. Die erhaltenen Kristallstrukturen wurden mit *Diamond*<sup>[50]</sup> visualisiert.

## 2.2 Pulverdiffraktometrie

Bei der röntgenographischen Untersuchung am Pulver geht die dreidimensionale Ordnung der Beugungsreflexe verloren. Ein auf die Probe treffender monochromatischer Röntgenstrahl wird an allen möglichen Netzebenenscharen gebeugt, wobei Reflexe mit dem gleichen Beugungswinkel zusammenfallen. Im Unterschied zum Einkristall erhält man hier keine scharfen Röntgenreflexe, sondern breite Reflexe der einzelnen Kristallite mit willkürlicher Orientierung. Eine Homogenisierung der Probe gewährleistet, dass jede Kristallorientierung in der Probe mit gleicher Häufigkeit vorkommt. Im Pulverdiagramm werden dann die Intensitäten der einzelnen Reflexgruppen gegen den zugehörigen Beugungswinkel dargestellt<sup>[51]</sup>. Gemessen wurde mit einem STOE-Stadi P-Diffraktometer, welches mit Cu-K $\alpha$ -Strahlung ( $\lambda = 1,5418 \text{ \AA}$ ) als Röntgenquelle ausgestattet ist. Die Auswertung der aufgenommenen Diffraktogramme erfolgte mit dem Programm *WinXPOW*<sup>[52]</sup>.

## 2.3 Emission und Absorption

Untersucht man Materie mit elektromagnetischer Strahlung in einem Wellenlängenbereich von 200-800 nm, können Photonen absorbiert und elektronische Übergänge in einen energetisch reicheren Zustand in Atomen und Molekülen angeregt werden. Dabei aufgenommene Spektren werden Absorptionsspektren genannt. Diese Elektronenübergänge unterscheiden sich voneinander durch die Form und Intensität ihrer Banden. Die Unterschiede beruhen auf verschiedenen Auswahlregeln wie dem Paritätsverbot (Laporte-Regel), die besagt, dass Übergänge zwischen Zuständen gleicher Parität verboten sind, und dem Spinverbot, das besagt, dass jeder Übergang, bei dem sich der Gesamtspin ändern



würde, verboten ist. Die  $\pi \rightarrow \pi^*$ -,  $f \rightarrow d$ - und charge-transfer-Übergänge sind nach den Auswahlregeln erlaubt und erscheinen in Form von intensiven breiten Banden.  $d \rightarrow d$ - und  $f \rightarrow f$ -Übergänge sind nach der Laporte-Regel verboten, das Verbot ist jedoch durch Gitterschwingungen gelockert. Die  $d \rightarrow d$ -Übergänge werden meist als schwache bis mittel intensive, breite Banden beobachtet, während die  $f \rightarrow f$ -Übergänge schwächere, aber charakteristische Banden aufweisen.

Ein elektronisch angeregter Zustand kann seine Energie entweder als Photon ausstrahlen (Emission bzw. Lumineszenz) oder sie kann strahlungslos an die Umgebung abgegeben werden. Beim strahlungslosen Übergang wird die Energie in Form von Translations-, Schwingungs- oder Rotationsenergie an die Umgebung abgegeben. Nach Anregung in einen energetisch höheren Zustand geben die Seltenerdverbindungen oft die Energie in Form von Licht ab. Diese  $f \rightarrow f$ -Übergänge ergeben scharfe Linien im Emissionsspektrum <sup>[53]</sup>.

Bei dem verwendeten Gerät zur Messung der Absorptionsspektren handelt es sich um ein Cary-Varian-500-Scan-Spektrophotometer. Die Proben wurden als dünne Filme, die mit einem Druck von 0,7 MPa gepresst wurden, gemessen. Die Emissions- und Anregungsspektren wurden mittels eines Action Research Corporation Spectra-Pro-750-Monochromators bei 77 und 293 K mit einem Hamamatsu-R-928-Photomultiplier als Detektor für Emissionsspektren aufgenommen. Eine 450 W-Xenonlampe wurde als Quelle für die Anregungsspektren verwendet.

## 2.4 REM und EDX

Bei der Rasterelektronenmikroskopie (REM) können mittels eines feinen Elektronenstrahls Oberflächen abgetastet werden. Auf diesem Wege können Abbildungen mit bis zu 100 000facher Vergrößerung erzeugt werden. Bei dem im Hochvakuum ablaufenden Prozess werden die Elektronen mittels einer Glühkathode emittiert, zu einem Strahl gebündelt und dieser mittels eines hohen elektrischen Feldes beschleunigt. Dieser Primärstrahl rastert die zu untersuchende Probe ab und tritt mit der Probe in Wechselwirkung. Die auf die Oberfläche auftreffenden Elektronen werden abgebremst und die dabei frei werdende kinetische Energie wird in Bremsstrahlung umgewandelt. Zusätzlich werden Sekundärelektronen aus dem Probenmaterial gelöst, welche in einem bildgebenden Verfahren zur Abbildung der Probenoberfläche verwendet werden <sup>[54]</sup>. Des Weiteren erhält man Rückstreuelektronen und charakteristische Röntgenstrahlung, wobei

letztere mittels eines Röntgendetektors dazu genutzt werden kann, Informationen über die Elementarzusammensetzung der Probe zu erhalten. Dieses Verfahren nennt man energiedispersive Röntgenspektroskopie (EDX, Energy-Dispersive X-Ray Analysis) <sup>[55]</sup>.

Bei dem verwendeten Gerät handelt es sich um ein Rasterelektronenmikroskop XL 40 der Firma Philips, welches mit einem zusätzlichen Detektor für die EDX der Firma EDAX ausgestattet ist.

## 2.5 DTA/TG

Unter der thermischen Analyse versteht man Methoden, bei denen physikalische und chemische Eigenschaften einer Substanz als Funktion der Temperatur oder der Zeit gemessen werden. Bei der Differenzthermoanalyse (DTA) können Phasenübergänge bestimmt werden. Dabei wird die Temperaturdifferenz zwischen der zu untersuchenden Substanz und einer Referenzprobe z. B. in Korundtiegeln untersucht. Dabei muss gewährleistet sein, dass beiden Gefäßen in gleicher Zeit die gleiche Wärme zugeführt wird. Solange keine Phasenumwandlung stattfindet, steigt beim Erwärmen in beiden Tiegeln die Temperatur linear an. Tritt in der Probe eine Phasenumwandlung ein, ändert sich die Wärmekapazität der Substanz sprunghaft, da ein Teil der zugeführten Energie für die Umwandlung benötigt oder bei exothermen Prozessen Energie frei gesetzt wird. Die beiden Tiegel weisen nun nicht mehr die gleiche Temperatur auf. Ist der Phasenübergang abgeschlossen, erhöht sich die Temperatur in beiden Tiegeln wieder gleichermaßen. Das Messergebnis eines einzelnen thermoanalytischen Verfahrens hat ohne weitere Kenntnisse über die Probe und ihre Umwandlungen einen relativ geringen Aussagewert. Deshalb wird zusätzlich zu der Temperaturdifferenz ebenfalls der Massenverlust der Probe aufgezeichnet (Thermogravimetrie = TG). Der Probenhalter im Ofen steht mit einer automatisch kompensierenden Waage in Verbindung, so dass das Gewicht der Probe in Abhängigkeit von der Temperatur kontinuierlich gemessen werden kann. Die Atmosphäre im Probenraum ist gewöhnlich ein inertes Gas, das die Probe laminar umströmt und die bei einer Massenänderung von der Probe abgegebenen Reaktionsprodukte vor Eintreten einer Rückreaktion entfernt <sup>[56]</sup>. Bei dem verwendeten Gerät handelt es sich um ein Netzsch STA 409.

## 2.6 Magnetismus

Bei der magnetischen Messung einer Probe wird die Wechselwirkung zwischen einem angelegten, äußeren Magnetfeld und dem magnetischen Moment der Probe in Abhängigkeit von der Temperatur untersucht. Durch das äußere Magnetfeld  $H$  wird eine Änderung der Feldstärke des Magnetfeldes in der Probe induziert, die von der Intensität der Magnetisierung  $M$  abhängig ist. Dieser Zusammenhang wird durch die Volumenssuszeptibilität  $\chi$  oder die molare magnetische Suszeptibilität  $\chi_m$  beschrieben. Die Intensität der Magnetisierung entspricht der Änderung der inneren Energie des Körpers im magnetischen Feld. Der Magnetismus eines Festkörpers setzt sich zusammen aus den magnetischen Momenten der darin enthaltenen Atome und Ionen. Das magnetische Moment eines Atoms beinhaltet größtenteils den Beitrag der Elektronenhülle (Hüllenmoment), zu dem das Bahnmoment, das mit dem Bahndrehimpuls der Elektronen verknüpft ist, und das Spinnmoment der Elektronen beitragen. Das äußere Magnetfeld induziert durch die Bewegung der Elektronen in der Probe ein magnetisches Moment, das dem angelegten Feld entgegengesetzt (Diamagnetismus) oder parallel (Paramagnetismus) gerichtet ist. Der diamagnetische Effekt beruht auf gepaarten Elektronen und ist somit eine universelle Eigenschaft der Materie. Wenn in der Probe ausschließlich gepaarte Elektronen enthalten sind, dominiert dieser Effekt. Die Magnetisierung ist unabhängig von der Feldstärke und der Temperatur. Der paramagnetische Effekt ist stärker als der diamagnetische und wird nur in Gegenwart eines äußeren Feldes beobachtet. Der diamagnetische Anteil der Suszeptibilität kann z. B. mit Hilfe von Pascal-Konstanten abgeschätzt werden und muss um diesen Wert korrigiert werden. Im Gegensatz zum Diamagnetismus ist die zugehörige Magnetisierung temperaturabhängig, da bei höheren Temperaturen eine konkurrierende Wechselwirkung zwischen der ausrichtenden Wirkung des Feldes und der auf statistische Gleichverteilung hinwirkenden thermischen Bewegung auftritt. Die paramagnetische Suszeptibilität nimmt daher zu höheren Temperaturen ab.

Das Curiesche Gesetz besagt, dass die paramagnetische Suszeptibilität umgekehrt proportional zur absoluten Temperatur ist. Dieses Gesetz gilt für paramagnetische Substanzen, deren Zentren durch diamagnetische Atome getrennt werden. Tritt jedoch magnetischer Austausch über Kopplung ungepaarter Spins benachbarter Atome auf, so folgt die Temperaturabhängigkeit dem Curie-Weiss-Gesetz.

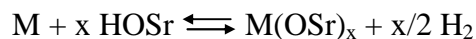
In magnetisch konzentrierten, paramagnetischen Proben können verschiedene magnetische, kollektive Wechselwirkungen beobachtet werden. Die drei wichtigsten Interaktionen sind der Ferro-, der Antiferro- und der Ferrimagnetismus. Beim Ferromagnetismus tritt eine

spontane Parallelstellung benachbarter magnetischer Dipole unterhalb der Curie-Temperatur  $T_C$  ein. Oberhalb von  $T_C$  gilt das Curie-Weiss-Gesetz mit negativer Weiss-Konstante  $\Theta_p$ . Unterhalb von  $T_C$  ist die Suszeptibilität stark feldabhängig, wobei häufig Hystereseschleifen beobachtet werden. Beim Antiferromagnetismus gilt der umgekehrte Fall; benachbarte magnetische Dipole richten sich unterhalb der Néel-Temperatur  $T_N$  spontan antiparallel aus. Oberhalb von  $T_N$  gilt das Curie-Weiss-Gesetz mit positiver Weiss-Konstante  $\Theta_p$ . Unterhalb von  $T_N$  ist die Suszeptibilität nur leicht feldabhängig. Beim Ferrimagnetismus tritt eine spontane antiparallele Ausrichtung benachbarter magnetischer Dipole unterschiedlicher Größe unterhalb von  $T_C$  ein.

Bei Metallkomplexen ist zu beobachten, dass der Beitrag des Bahnmoments abnimmt oder sogar verschwindet, da die beteiligten Metallorbitale an Entartung verlieren und so die Bewegung des Elektrons durch die sterischen Ansprüche gehemmt wird. Die Austauschwechselwirkung kann über die besetzten Orbitale von intermediären diamagnetischen Brückenatomen stattfinden, den sogenannten Superaustausch. Darüber hinaus können die spintragenden Zentren über ihre magnetischen Orbitale (Orbitale mit einem ungepaarten Elektron) direkt in Wechselwirkung treten. Dabei spielt der Abstand zwischen den Zentren eine große Rolle, da bei großem Abstand die Überlappungsdichte der beteiligten Orbitale gleich Null ist und keine Wechselwirkung stattfinden kann. Sind die magnetischen Orbitale orthogonal zueinander, ist das Überlappungsintegral  $S$  gleich Null und ferromagnetische Wechselwirkungen werden beobachtet. Im Fall nicht-orthogonaler Orbitale hat das Überlappungsintegral einen von Null verschiedenen Wert und antiferromagnetische Wechselwirkungen werden beobachtet<sup>[57]</sup>. Bei dem zur Messung verwendeten Gerät handelt es sich um ein Quantum Design MPMS2 Squid-Magnetometer.

### 3 Allgemeines zu den Synthesen

Im Rahmen dieser Arbeit wurde als Synthesemethode die Oxidation von Metallen mit Liebig-Säuren unter Ausschluss eines Lösungsmittels angewendet, zum Beispiel gemäß



Aufgrund der für eine Festkörpersynthese vergleichsweise milden Bedingungen (Reaktionstemperaturen bis maximal 230°C), wurden als Reaktionsgefäße Duranglasampullen verwendet. Im Fall der an der Luft weniger beständigen Metalle wurden sie im Handschuhkasten befüllt. Alle Ampullen wurden mit einer Quickfit-Vorrichtung verschlossen und unter Vakuum abgeschmolzen. Dabei war zu beachten, dass während der Reaktion Wasserstoff entsteht und somit die eingesetzten molaren Verhältnisse nicht zu groß gewählt werden dürfen, damit kein vermehrter Überdruck im Reaktionsgefäß entsteht. Bei der Verwendung von Essigsäure wurde das Reaktionsgemisch in der Ampulle von außen über ein Dewargefäß mit flüssigem Stickstoff eingefroren und dann erst evakuiert und abgeschmolzen.

Die Reaktionsgefäße wurden anschließend in einen Röhrenofen gegeben, der mit Hilfe eines Reglers (Eurotherm 2416) angesteuert und somit dem jeweiligen Temperaturprogramm unterworfen wurde. Bei der Verwendung der unter Raumtemperatur festen Liebig-Säuren sowie dem Flussmittel TMB (1,2,4,5-Tetramethylbenzol) konnten die überschüssige Säure sowie das Flussmittel einfach durch Sublimation von dem Reaktionsprodukt getrennt werden, indem die Glasampullen nur zur Hälfte in den Röhrenofen gegeben, mit 10°C auf 160°C erhitzt, dort für 20 h gehalten und mit 5°C/h wieder auf Raumtemperatur abgekühlt wurden.

Anschließend konnten sie mit einer Säge angeritzt und außer im Falle des  $\text{Fe}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})$ , welches im Handschuhkasten geöffnet werden musste, an der Luft geöffnet, und die Produkte weiteren Untersuchungen unterzogen werden.

## 4 Acetate

Das Anion der Essigsäure ist ein für die Synthese von Koordinationspolymeren sehr häufig verwendeter Ligand, welcher das Zentralatom sowohl einzähnig als auch zweizähnig koordinieren kann. Polymere Strukturen können dadurch ausgebildet werden, dass die Carboxylatgruppe des Acetatanions mehrere Zentralatome miteinander verbrücken kann. Dadurch entstehen als häufiges Strukturmotiv Ketten oder auch Netzwerke. Die bisher bekannten Acetate der Seltenerdmetalle umfassen einen weiten Bereich an struktureller Vielfalt.

Die Kristallstrukturen sämtlicher wasserfreier Seltenerdacetate sind bekannt. Mittels Einkristall-strukturanalyse konnten die Strukturen für  $SE(OAc)_3$  ( $SE = Sc, La, Pr, Nd, Eu, Ho, Tm, Yb$  und  $Lu$ ) bestimmt werden. Die restlichen wasserfreien Seltenerdacetate konnten anhand von Pulverdiffraktometrie charakterisiert werden <sup>[20-22, 58-61]</sup>.

Die wasserhaltigen Seltenerdacetate weisen sich durch einen großen strukturellen Reichtum aus und bilden je nach Wassergehalt unterschiedliche Strukturtypen aus. So sind die Verbindungen von  $SE(OAc)_3 \cdot 4 H_2O$  ( $SE = Y, Sm, Eu, Gd, Dy, Ho, Er$ , und  $Lu$ ),  $Eu(OAc)_3 \cdot 3 H_2O$ ,  $Y(OAc)_3 \cdot 2 H_2O$ ,  $SE_2(OAc)_6 \cdot 3 H_2O$  ( $SE = La, Ce, Pr$  und  $Eu$ ),  $SE(OAc)_3 \cdot H_2O$  ( $SE = Ce, Pr$  und  $Nd$ ) und schliesslich die Semihydrate mit  $SE_2(OAc)_6 \cdot H_2O$  ( $SE = Y, Nd, Sm$  und  $Er$ ) bekannt <sup>[21, 26, 62, 63]</sup>.

Von den Seltenerdacetat-Essigsäureaddukten sind wasserhaltige sowie wasserfreie Verbindungen bekannt. So konnten bisher  $SE(OAc)_3(H_2O)(HOAc)$  ( $SE = Nd, Sm-Gd$  und  $Ho$ ),  $[Eu(OAc)_3(H_2O)(HOAc)]_2(HOAc)_3$ ,  $[SE(OAc)_3(H_2O)(HOAc)](HOAc)_2$  ( $SE = Eu, Dy$  und  $Er$ ),  $[SE(OAc)_3(H_2O)_2](HOAc)$  ( $SE = Y, Sm-Lu$ ),  $[SE(OAc)_3(HOAc)](HOAc)$  ( $SE = Nd$  und  $Sm$ ) und  $[SE(OAc)_3(HOAc)_2](HOAc)_2$  ( $SE = Pr$  und  $Nd$ ) synthetisiert und charakterisiert werden <sup>[26, 32, 62, 64, 65]</sup>.

Bimetallische Systeme der Seltenerdacetate, in denen beide Metallatome über Acetat-Liganden miteinander verbrückt sind, sind bisher nur wenige bekannt. Zwei Beispiele hierfür sind  $[Nd_2Co(OAc)_8(H_2O)_4] \cdot 6 H_2O$  <sup>[66]</sup> und  $[SmPd(OAc)_5(H_2O)](HOAc)$  <sup>[67]</sup>.

Die Synthese der bisher genannten Verbindungen gelang zumeist aus den essigsäuren Lösungen der Seltenerdsalze, zum Beispiel der Oxide, Carbonate oder im Falle der bimetalischen Verbindungen aus einem Lösungsgemisch beider Acetate. Außerdem ist die Synthese aus den Schmelzen von Seltenerdoxid, bzw. deren Acetathydraten und Ammoniumacetaten in einer unter Vakuum abgeschmolzenen Duranglasampulle bekannt.

Bei den im Rahmen dieser Arbeit synthetisierten Verbindungen handelt es sich um ein neues Semi-Acetathydrat des Dysprosiums,  $\text{Dy}_2(\text{OAc})_6 \cdot \text{H}_2\text{O}$ , sowie um zwei neue bimetallische Komplexe des Dysprosiums,  $[\text{Dy}_2\text{M}(\text{OAc})_8(\text{H}_2\text{O})_2](\text{HOAc})_2$  ( $\text{M} = \text{Mn}, \text{Co}$ ).

#### 4.1 $\text{Dy}_2(\text{OAc})_6(\text{H}_2\text{O})$

Die Verbindung kristallisiert in der monoklinen Raumgruppe  $Cc$  (Nr. 9) mit  $Z = 4$  und bildet farblose Nadeln aus. Die Gitterkonstanten betragen  $a = 1595,4(2)$  pm,  $b = 1660,4(2)$  pm,  $c = 840,7(1)$  pm,  $\beta = 115,91(1)^\circ$ ,  $R_1 = 0,0387$  für  $I_0 > 2\sigma(I_0)$ . Die Kristallstruktur ist isotyp zu den bereits bekannten Verbindungen des Yttriums<sup>[63]</sup> und des Europiums<sup>[21]</sup>.

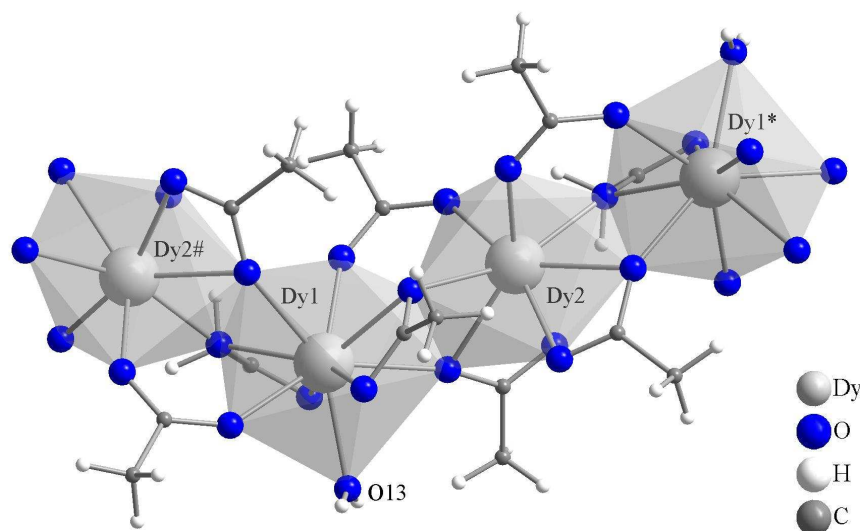


Abbildung 4.1.1: Koordinationssphäre von  $\text{Dy}_2(\text{OAc})_6(\text{H}_2\text{O})$ .

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* =  $0,5+x; 0,5-y; 0,5+z$ ; # =  $-0,5+x; 0,5-y; -0,5+z$

Die asymmetrische Einheit wird aus zwei kristallographisch unabhängigen Dysprosiumkationen aufgebaut welche über sechs Acetatanionen zu wellenartigen Ketten entlang der Flächendiagonalen  $[101]$  verknüpft sind. Von den sechs verbrückenden Acetatanionen sind zwei zweizählig verbrückend ( $\mu_2: \eta^1 - \eta^1$ ) und vier dreizählig chelatisierend-verbrückend ( $\mu_2: \eta^1 - \eta^2$ ). Das Dy(1)-Kation wird von neun Sauerstoffatomen zu einem verzerrten, einfach überkappten quadratischen Antiprisma koordiniert. Eines dieser Sauerstoffatome konnte einem koordinierenden Wassermolekül zugeordnet werden, welches sich in das quadratische Antiprisma eingliedert und nicht das überkappende Sauerstoffatom darstellt. Das Dy(2)-Kation wird von acht Sauerstoffatomen in Form eines verzerrten, quadratischen Antiprismas koordiniert.

**Tabelle 4.1.1: Ausgewählte Bindungslängen und Atomabstände in  $[\text{Dy}_2(\text{OAc})_6(\text{H}_2\text{O})]$** 

Atome	Abstände [pm]	Atome	Abstände [pm]
Dy(1)-Dy(2)	401,5(2)	Dy(1)-O(13)	238,9(8)
Dy(1)-Dy(2*)	398,6(2)	Dy(2)-O(1)	235,3(9)
Dy(1)-O(1*)	258,5(9)	Dy(2)-O(4#)	226(1)
Dy(1)-O(2*)	244(1)	Dy(2)-O(5)	251,6(9)
Dy(1)-O(3)	234(1)	Dy(2)-O(6)	241(1)
Dy(1)-O(5*)	239,9(8)	Dy(2)-O(7)	241(1)
Dy(1)-O(8)	239,7(9)	Dy(2)-O(8)	259(1)
Dy(1)-O(10)	235,1(8)	Dy(2)-O(9)	226(1)
Dy(1)-O(11)	245,5(8)	Dy(2)-O(11)	231,4(9)
Dy(1)-O(12)	249(1)		

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* =  $0,5+x; 0,5-y; 0,5+z$ ; # =  $-0,5+x; 0,5-y; -0,5+z$

Die Kettenstruktur wird durch die Verknüpfung der Koordinationspolyeder über zwei gegenüberliegende Kanten gebildet. Die SE-SE-Abstände der isotypen Verbindungen betragen für Y = 395,1 und 399,3; Dy = 398,6 und 401,5; und für Er = 395,8 und 399,4 pm. Die mittleren  $\langle \text{SE-O} \rangle$ -Bindungslängen liegen im Bereich von  $\langle \text{Y-O} \rangle = 238,8$ ;  $\langle \text{Dy-O} \rangle = 240,9$  und  $\langle \text{Er-O} \rangle = 238,2$  pm.

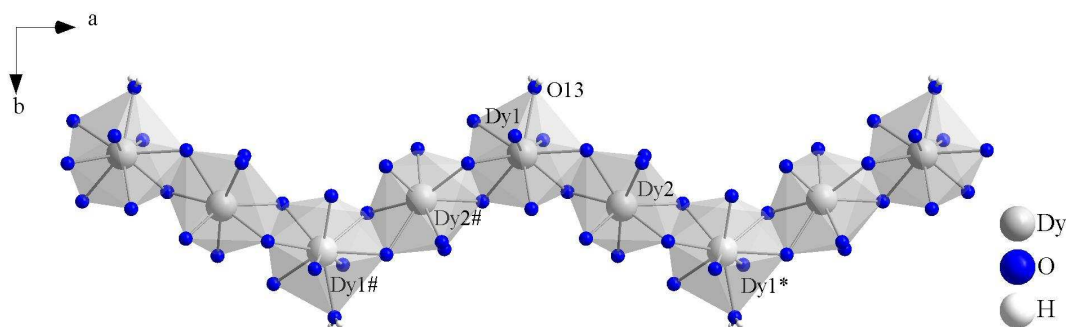


Abbildung 4.1.2: Wellenartige Kette in Blickrichtung  $[001]$  von  $\text{Dy}_2(\text{OAc})_6(\text{H}_2\text{O})$ .

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* =  $0,5+x; 0,5-y; 0,5+z$ ; # =  $-0,5+x; 0,5-y; -0,5+z$

Die koordinierenden Wassermoleküle sind stets im Minimum und Maximum der Welle lokalisiert. Diese Ketten liegen in Blickrichtung  $[010]$  nebeneinander, sind aber so gegeneinander versetzt, dass sich Hohlräume bilden, in denen die Acetatliganden sitzen, (siehe Abbildung 4.1.3), und die Wasserstoffatome der Wassermoleküle Wasserstoffbrückenbindungen zu den benachbarten Ketten ausbilden können. Die hexagonale Ausrichtung der Ketten zueinander ist in Abbildung 4.1.4 zu sehen.



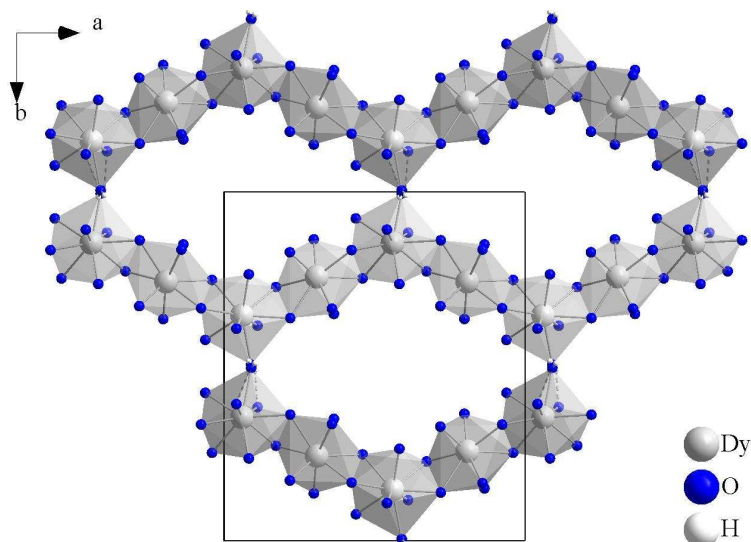


Abbildung 4.1.3: Darstellung eines Ausschnitts der Kristallstruktur von  $\text{Dy}_2(\text{OAc})_6(\text{H}_2\text{O})$  entlang  $[001]$ .

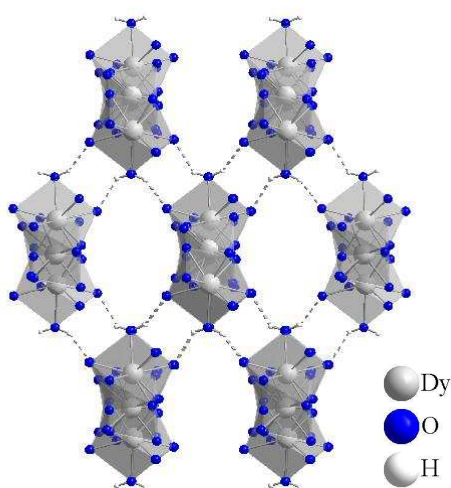


Abbildung 4.1.4: Projektion entlang  $[101]$  von  $\text{Dy}_2(\text{OAc})_6(\text{H}_2\text{O})$ .

Dies wird deutlich, wenn man die Struktur entlang der Kettenwachstumsrichtung  $[101]$  betrachtet. Jedes Wassermolekül bildet mit beiden Wasserstoffatomen zu je zwei benachbarten Ketten eine Wasserstoffbrückenbindung aus. Insgesamt wird somit jede Kette über Wasserstoffbrückenbindungen mit vier weiteren Ketten verknüpft. Die Abstände der Sauerstoffatome, die an den Brückenbindungen beteiligt sind, werden in folgender Tabelle aufgeführt.

**Tabelle 4.1.2: Daten zur Wasserstoffbrückenbindung in  $\text{Dy}_2(\text{OAc})_6(\text{H}_2\text{O})$**

Winkel		Sauerstoffabstände	
O(13)-H(13)-O(2)	137,9(7)°	O(13)-O(2)	276(2) pm
O(13)-H(1)-O(12)	148,2(7)°	O(13)-O(12)	275(2) pm

Die Atomlagen der Wasserstoffatome wurden berechnet und nicht frei verfeinert. Aus den Sauerstoffabständen kann allerdings gefolgert werden, dass es sich hier um starke

Wasserstoffbrückenbindungen handelt <sup>[68]</sup>, welche durchaus zur Stabilität der Verbindung beitragen, da diese nicht feuchtigkeitsempfindlich ist.

Das Dysprosium(III)-acetat-semihydrat wurde auch mittels Pulverdiffraktometrie untersucht. Der Vergleich des gemessenen Pulverdiffraktogramms mit dem simulierten lässt auf leichte Verunreinigungen der Substanz schließen, welche bisher nicht isoliert werden konnten. Daher wurde auf eine weitere Charakterisierung der Substanz verzichtet.

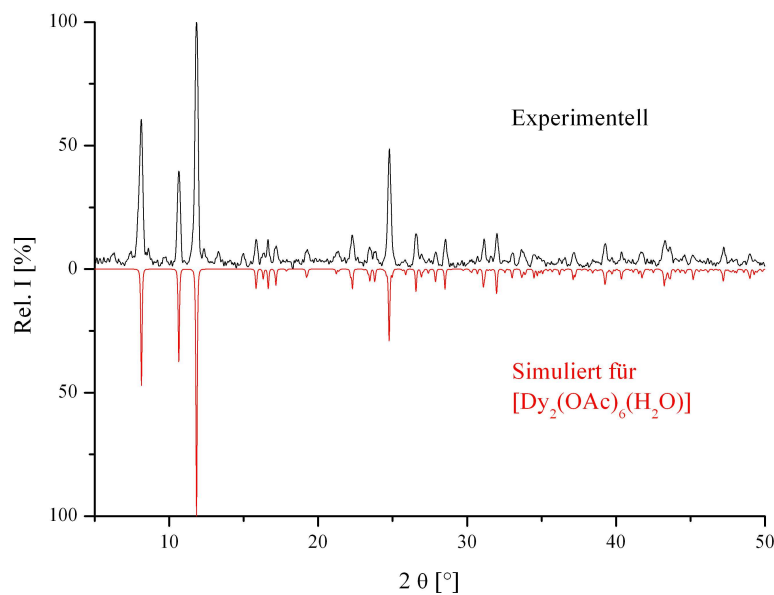


Abbildung 4.1.5: Pulverdiffraktogramm von  $\text{Dy}_2(\text{OAc})_6(\text{H}_2\text{O})$ .

### Experimentelles

Eine 15 cm lange Duranglasampulle mit einem Innendurchmesser von 14 mm wurde mit 32,5 mg (0,2 mmol) Dysprosiumspänen und 0,08 ml (1,4 mmol = 84 mg;  $\rho = 1,048$  g/ml) Essigsäure (98 %) unter inerten Bedingungen befüllt und unter Vakuum verschlossen. Das Reaktionsgefäß wurde in einem Röhrenofen mit 5°C/h auf 130°C erhitzt, dort für 125 h gehalten und mit 2°C/h wieder auf Raumtemperatur abgekühlt.

**Tabelle 4.1.3: Kristallographische Daten für Dy<sub>2</sub>(OAc)<sub>6</sub>(H<sub>2</sub>O)**

Summenformel	C <sub>12</sub> Dy <sub>2</sub> H <sub>20</sub> O <sub>13</sub>
Molmasse	697,28 g/mol
Messtemperatur	293(2) K
Messgerät	STOE IPDS I
Verwendete Strahlung	0,71073 Å (Mo-K <sub>α1</sub> )
Kristallsystem, Raumgruppe	monoklin, C c (Nr. 9)
Gitterkonstanten	a = 1595,4 (2) pm    α = 90° b = 1660,4 (2) pm    β = 115,91 (1)° c = 840,7(1) pm    γ = 90°
Zellvolumen	2003,5 (4) · 10 <sup>6</sup> pm <sup>3</sup>
Z	4
Berechnete Dichte	2,312 g/cm <sup>3</sup>
Absorptionskorrektur	numerisch
Absorptionskoeffizient	7,463 mm <sup>-1</sup>
F(000)	1312
Messbereich	2,45° bis 28,10°
Index-Bereich	-20 ≤ h ≤ 21, -21 ≤ k ≤ 21, -10 ≤ l ≤ 10
Zahl der gemessenen Reflexe	9401
davon symmetrieunabhängig	4393
Beobachtete Reflexe [I <sub>0</sub> > 2σ(I)]	3221
Verfeinerungsmethode	SIR92 <sup>[46]</sup> und SHELXL97 <sup>[47]</sup>
Daten / Parameter	4393 / 246
R <sub>int</sub>	0,0606
Goof	0,878
R Werte [I <sub>0</sub> > 2σ(I)]	R <sub>1</sub> = 0,0387; wR <sub>2</sub> = 0,0740
R Werte (alle Daten)	R <sub>1all</sub> = 0,0635; wR <sub>2all</sub> = 0,0815
Restelektronendichte	1,28 und -1,62 10 <sup>6</sup> e·pm <sup>-3</sup>

## 4.2 $[\text{Dy}_2\text{M}(\text{OAc})_8(\text{H}_2\text{O})_2](\text{HOAc})_2$ (M = Mn, Co)

Obwohl sich die Synthese von bimetallicen Seltenerdverbindungen mit Übergangsmetallen und organischen Liganden als schwierig erwies, gelang es hier doch, die isotypen Verbindungen  $[\text{Dy}_2\text{M}(\text{OAc})_8(\text{H}_2\text{O})_2](\text{HOAc})_2$  mit M = Mn, Co darzustellen. Es wird angenommen, dass diese Reaktion hier durch die bereits bei Raumtemperatur flüssige Essigsäure begünstigt wurde. Die dadurch vergrößerte Diffusion und der erhöhte Dampfdruck bewirken die Bildung der bimetallicen Produkte.

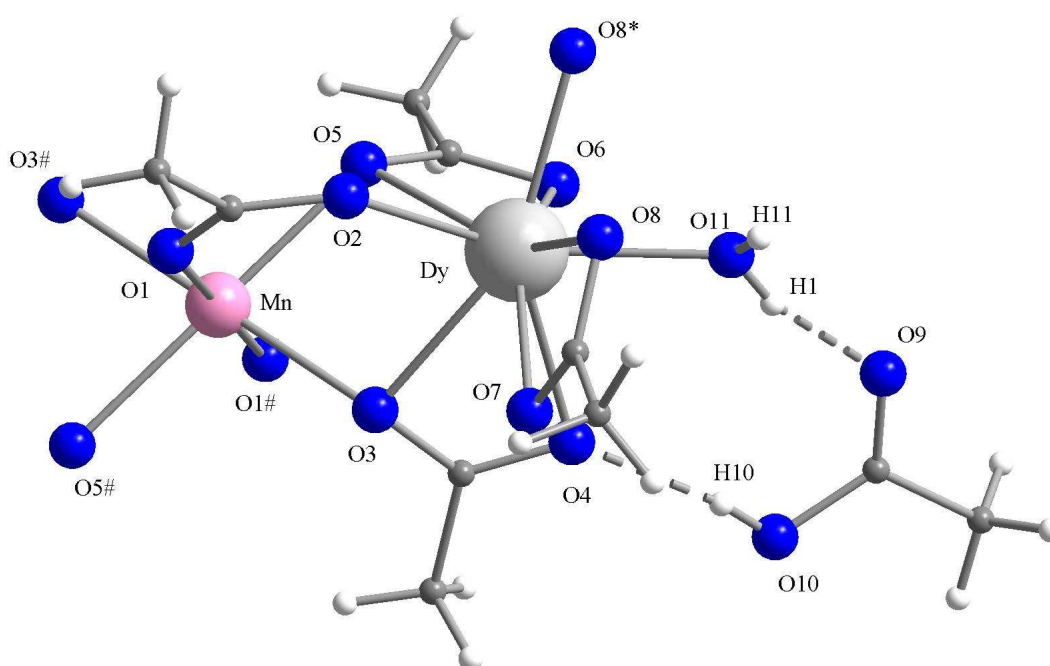


Abbildung 4.2.1: Koordinationssphäre um  $\text{Mn}^{2+}$  und  $\text{Dy}^{3+}$  von  $[\text{Dy}_2\text{Mn}(\text{OAc})_8(\text{H}_2\text{O})_2](\text{HOAc})_2$ .

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* = -x; 2-y; 1-z; # = -x; 2-y; -z

### 4.2.1 Strukturbeschreibung

Die Verbindungen kristallisieren in der triklinen Raumgruppe  $P\bar{1}$  (Nr. 2) mit  $Z = 2$  und bilden im Falle der Manganverbindung farblose und bei dem Einbau des Kobaltatoms violette Nadeln aus. Die Kristalle der Mangan- und der Kobaltverbindung haben nahezu die gleichen Gitterkonstanten M = Mn:  $a = 921,8(2)$  pm,  $b = 930,6(2)$ ,  $c = 1077,1(2)$  pm,  $\alpha = 80,4(1)$ ,  $\beta = 74,8(1)$ ,  $\gamma = 77,1(1)^\circ$ , und  $R_1 = 0,0472$  für  $I_0 > 2\sigma(I_0)$ ; M = Co:  $a = 917,7(2)$  pm,  $b = 937,1(2)$  pm,  $c = 1058,1(2)$  pm,  $\alpha = 80,0(1)^\circ$ ,  $\beta = 75,5(1)^\circ$ ,  $\gamma = 76,8(1)^\circ$ , und  $R_1 = 0,0357$  für  $I_0 > 2\sigma(I_0)$ . Die folgenden Strukturbeschreibungen und Abbildungen beziehen sich auf die Manganverbindung. Die kristallographischen Daten der

isotypen Verbindungen werden in Tabelle 4.2.3 aufgezeigt. Die asymmetrische Einheit wird durch ein Dysprosium- und ein Manganatom auf einer zweizähligen speziellen Lage aufgebaut. Die Metallkationen bilden über ein zweizählig verbrückendes Acetatanion ( $\mu_2: \eta^1 - \eta^1$ ) und drei dreizählig chelatisierend verbrückende Acetatanionen ( $\mu_3: \eta^1 - \eta^2$ ) Ketten entlang [001] aus, wobei auf je zwei Dysprosiumatome ein Manganatom folgt (siehe Abbildung 4.2.2).

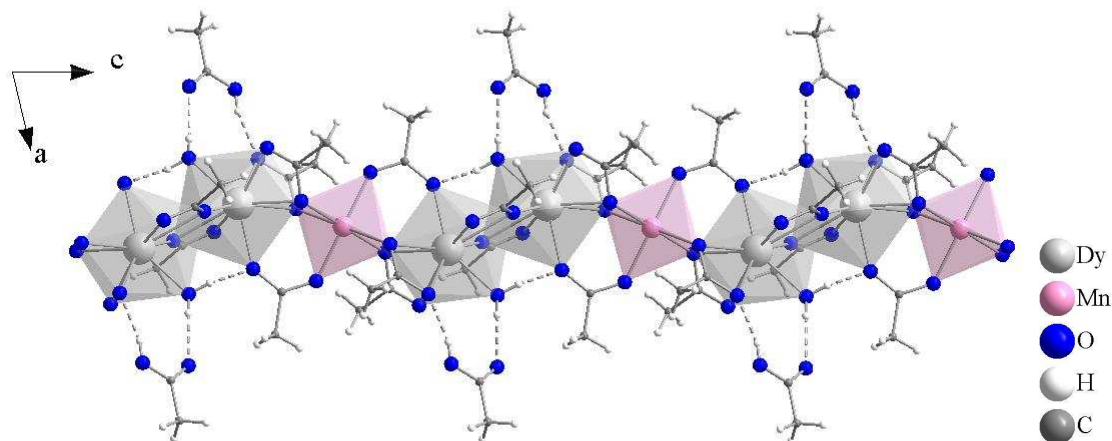


Abbildung 4.2.2: Projektion der Kristallstruktur von  $[\text{Dy}_2\text{Mn}(\text{OAc})_8(\text{H}_2\text{O})_2](\text{HOAc})_2$  entlang [010].

Das Manganatom ist oktaedrisch von Sauerstoffatomen der Acetationen koordiniert. Das Dysprosiumatom wird zum verzerrt einfach überkappten quadratischen Antiprisma koordiniert. Das Wassermolekül befindet sich in der Koordinationssphäre des Dysprosiumkations. Das Essigsäuremolekül koordiniert nicht direkt an ein Metallatom, sondern bildet mit dem Hydroxyl-Wasserstoffatom H(10) eine Wasserstoffbrückenbindung zu dem Sauerstoffatom eines koordinierten Acetatanions und mit dem Carbonyl-Sauerstoff O(9) eine Wasserstoffbrückenbindung zum H(1) des koordinierenden Wassermoleküls. Das Wasserstoffatom H(11) des Wassermoleküls wiederum bildet eine Wasserstoffbrückenbindung zum Sauerstoffatom O(2) des zweizählig verbrückenden Liganden aus. Die Atomlagen der Wasserstoffatome wurden nicht frei verfeinert, sondern lediglich berechnet.

**Tabelle 4.2.1: Daten zur Wasserstoffbrückenbindung**

Winkel	M = Mn	M = Co	Abstände	M = Mn	M = Co
O(4)-H(10)-O(10)	165,4(7)°	164,7(4)°	O(4)-O(10)	269(1) pm	271,9(7) pm
O(9)-H(1)-O(11)	163,0(7)°	173,4(5)°	O(9)-O(11)	268(1) pm	266,8(7) pm
O(11)-H(11)-O(2*)	141,2(5)°	141,2(4)°	O(11)-O(2*)	273(1) pm	272,8(7) pm

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* = -x; 2-y; 1-z

Die O-O-Abstände, welche die Wasserstoffbrückenbindungen umfassen, liegen im Bereich einer schwachen bis mäßig starken Verbrückung<sup>[68]</sup>.

**Tabelle 4.2.2: Ausgewählte Metall-Metall/Sauerstoff-Atomabstände**

Atome	Abstände [pm] M = Mn	Abstände [pm] M = Co
Dy-Dy*	408,66(8)	407,58(9)
M-Dy	368,4(6)	359,13(6)
M-O(1) 2x	209,9(6)	203,9(4)
M-O(3) 2x	220,4(6)	211,9(4)
M-O(5) 2x	219,7(6)	211,7(4)
Dy-O(2)	233,6(6)	233,3(3)
Dy-O(3)	246,6(6)	243,4(4)
Dy-O(4)	249,9(7)	249,1(4)
Dy-O(5)	252,9(7)	251,4(4)
Dy-O(6)	240,9(6)	241,1(4)
Dy-O(7)	239,5(6)	240,3(4)
Dy-O(8)	260,3(6)	258,6(4)
Dy-O(8*)	232,2(6)	233,0(4)
Dy-O(11)	232,6(6)	232,5(4)

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* = -x; 2-y; 1-z; # = -x; 2-y; -z

Die Koordinationspolyeder sind jeweils über zwei gegenüberliegende Kanten miteinander verknüpft. Die Metallatome weisen Abstände von Dy-Dy\* = 408,66(8) pm (M = Mn); Mn-Dy = 368,4(6) pm und Dy-Dy\* = 407,58(9) pm (M = Co); Co-Dy = 359,13 pm auf. Die kürzeren Kobalt-Dysprosium-, sowie Kobalt-Sauerstoff-Abstände resultieren aus dem kleineren van der Waals-Radius des Kobalt(II)-Kations<sup>[69]</sup> und führen zu einer

Verkleinerung der Zelle entlang der kristallographischen  $a$ - und  $c$ -Achse. Damit sich die koordinierenden Liganden sterisch nicht behindern, ist eine Aufweitung der Elementarzelle entlang  $[010]$  notwendig. Die Kettenverknüpfungen innerhalb der Elementarzelle sind in Abbildung 4.2.3 dargestellt.

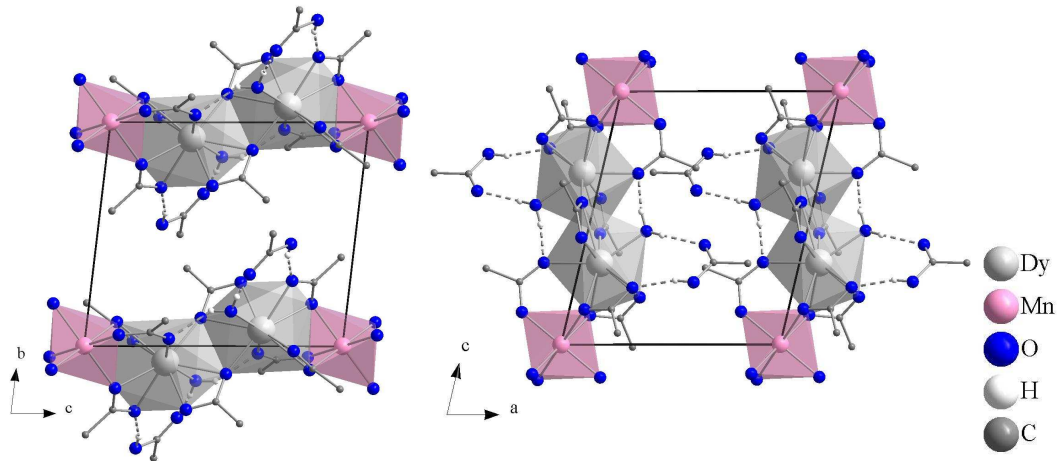


Abbildung 4.2.3: Elementarzelle entlang  $[100]$  und  $[010]$ .

Bei der Betrachtung der Elementarzelle entlang der kristallographischen  $c$ -Achse und somit in Richtung des Kettenwachstums ist eine verzerrte hexagonale Stabpackung der Ketten zu

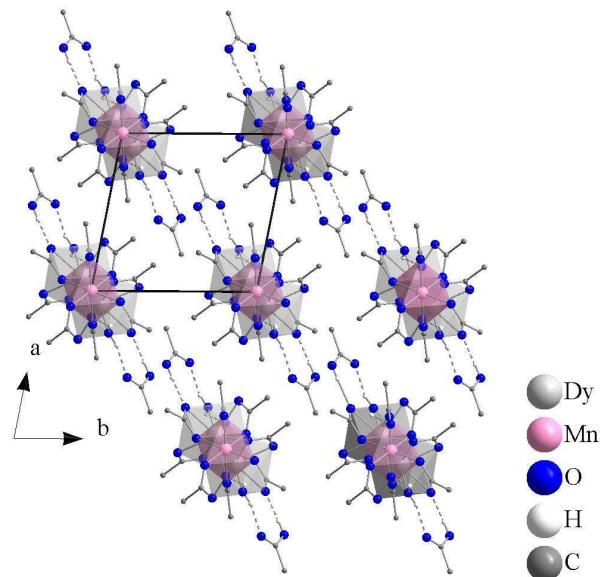


Abbildung 4.2.4: Elementarzelle entlang  $[001]$ .

erkennen. Die beiden Acetate wurden mittels Pulverdiffraktometrie untersucht, die Manganverbindung konnte jedoch keiner weiteren Untersuchung unterzogen werden, da die erhaltene Probe nicht phasenrein herzustellen war, beziehungsweise das aus dem Einkristall simulierte Diffraktogramm in keiner Weise mit den ermittelten Daten zu vergleichen war (Abbildung 4.2.5). Von der phasenreinen

Verbindung des Kobalts war es möglich, das thermische Verhalten mittels DTA/TG zu untersuchen und die magnetischen Eigenschaften zu bestimmen.

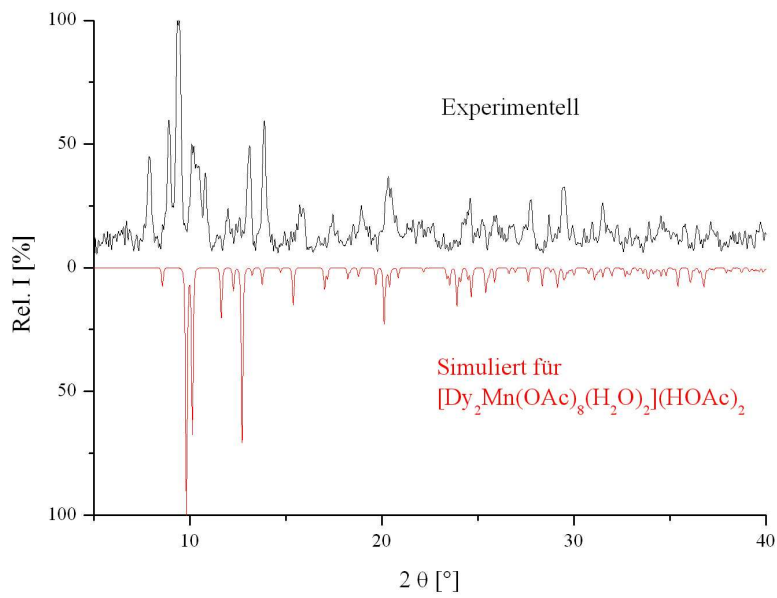


Abbildung 4.2.5: Pulverdiffraktogramm von  $[\text{Dy}_2\text{Mn}(\text{OAc})_8(\text{H}_2\text{O})_2](\text{HOAc})_2$ .

In Abbildung 4.2.6 wird deutlich, dass die gemessenen Daten mit dem simulierten Diffraktogramm übereinstimmen.

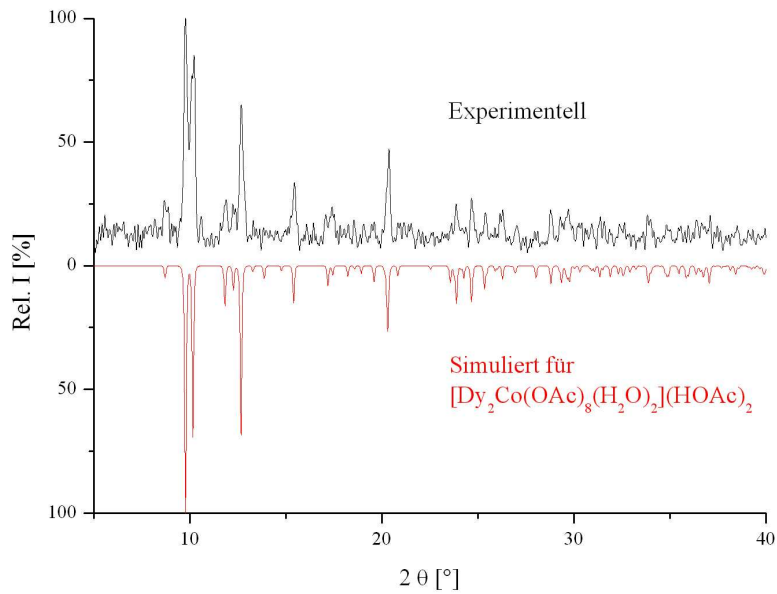


Abbildung 4.2.6: Pulverdiffraktogramm von  $[\text{Dy}_2\text{Co}(\text{OAc})_8(\text{H}_2\text{O})_2](\text{HOAc})_2$ .



**Tabelle 4.2.3: Kristallographische Daten für  $[\text{Dy}_2\text{M}(\text{OAc})_8(\text{H}_2\text{O})_2](\text{HOAc})_2$** 

Verbindung	$[\text{Dy}_2\text{Mn}(\text{OAc})_8(\text{H}_2\text{O})_2](\text{HOAc})_2$	$[\text{Dy}_2\text{Co}(\text{OAc})_8(\text{H}_2\text{O})_2](\text{HOAc})_2$
Summenformel	$\text{C}_{10}\text{DyH}_{18}\text{Mn}_{0,5}\text{O}_{11}$	$\text{C}_{10}\text{Co}_{0,5}\text{DyH}_{18}\text{O}_{11}$
Molmasse	504,21 g/mol	506,21 g/mol
Messtemperatur	293(2) K	293(2) K
Messgerät	STOE IPDS I	STOE IPDS I
Verwendete Strahlung	0,71073 Å (Mo- $K_{\alpha 1}$ )	0,71073 Å (Mo- $K_{\alpha 1}$ )
Kristallsystem, Raumgruppe	triklin, $P\bar{1}$ (Nr. 2)	triklin, $P\bar{1}$ (Nr. 2)
Gitterkonstanten	a = 921,8 (2) pm b = 931,6 (2) pm c = 1077,1(2) pm $\alpha = 80,37(2)^\circ$ $\beta = 74,83 (2)^\circ$ $\gamma = 77,15(2)^\circ$	a = 917,7 (2) pm b = 937,1 (2) pm c = 1058,1(2) pm $\alpha = 80,03(2)^\circ$ $\beta = 75,46 (2)^\circ$ $\gamma = 76,83(2)^\circ$
Zellvolumen	$863,5 (3) \cdot 10^6 \text{ pm}^3$	$851,1(2) \cdot 10^6 \text{ pm}^3$
Z	2	2
Berechnete Dichte	1,939 g/cm <sup>3</sup>	1,975 g/cm <sup>3</sup>
Absorptionskorrektur	numerisch	numerisch
Absorptionskoeffizient	4,724 mm <sup>-1</sup>	4,909 mm <sup>-1</sup>
F(000)	489	491
Messbereich	1,97° bis 29,59°	2,25° bis 28,07°
Index-Bereich	-12 ≤ h ≤ 12, -12 ≤ k ≤ 12 -14 ≤ l ≤ 13	-12 ≤ h ≤ 12 -12 ≤ k ≤ 12 -12 ≤ l ≤ 12
Zahl der gemessenen Reflexe	14009	10127
davon symmetrieunabhängig	4792	3765
Beobachtete Reflexe [ $I_0 > 2\sigma(I)$ ]	3399	3109
Verfeinerungsmethode	SIR92 <sup>[46]</sup> und SHELXL97 <sup>[47]</sup>	SIR92 <sup>[46]</sup> und SHELXL97 <sup>[47]</sup>
Daten / Parameter	4792 / 212	3765 / 212
R <sub>int</sub>	0,1063	0,0571
Goof	0,966	0,975
R Werte [ $I_0 > 2\sigma(I)$ ]	R <sub>1</sub> = 0,0425; wR <sub>2</sub> = 0,0896	R <sub>1</sub> = 0,0345, wR <sub>2</sub> = 0,0748
R Werte (alle Daten)	R <sub>1all</sub> = 0,0725; wR <sub>2all</sub> = 0,1025	R <sub>1all</sub> = 0,0471, wR <sub>2all</sub> = 0,0821
Restelektronendichte	1,42 und -1,68 10 <sup>6</sup> e·pm <sup>-3</sup>	1,60 und -1,68 10 <sup>6</sup> e·pm <sup>-3</sup>

### 4.2.2 Magnetisches Verhalten

Zur genaueren Betrachtung der elektronischen Umgebung in der Kobaltverbindung, wurde das magnetische Verhalten in Abhängigkeit von der Temperatur untersucht. Die temperaturabhängige Messung der magnetischen Suszeptibilität  $\chi$  wurde zwischen 1,8 und 390 K bei einem äußeren magnetischen Feld von 0,1 T durchgeführt. Die experimentellen Daten wurden um den diamagnetischen Anteil unter Verwendung von Pascal-Konstanten korrigiert.

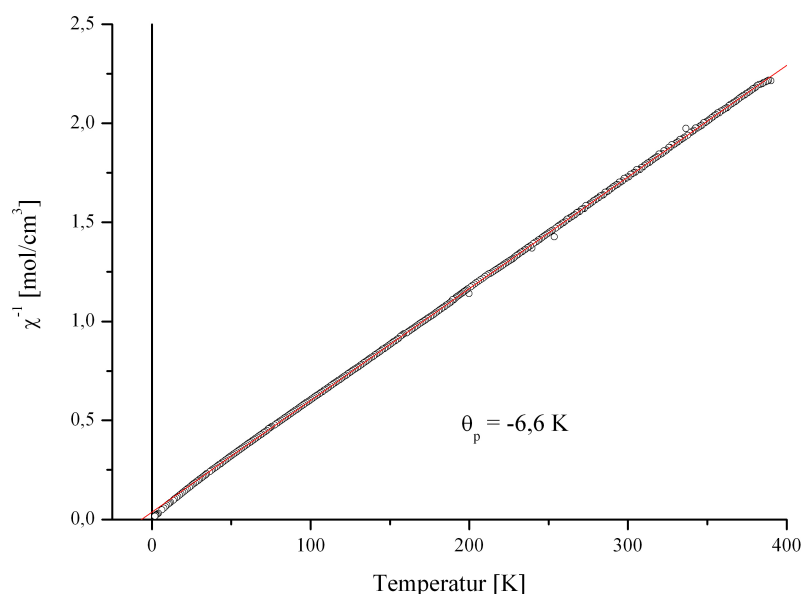


Abbildung 4.2.7: Die reziproke magnetische Suszeptibilität als Funktion der Temperatur von  $[\text{Dy}_2\text{Co}(\text{OAc})_8(\text{H}_2\text{O})_2](\text{HOAc})_2$ .

Die reziproke Suszeptibilität  $\chi^{-1}$  zeigt über den ganzen Temperaturbereich ein nahezu lineares Verhalten mit einem Schnittpunkt bei 0 K, wie es für paramagnetisches Verhalten zu erwarten ist. Zur Darstellung der sich in diesem Verhalten äußernden Temperaturunabhängigkeit des magnetischen Moments eignet sich die Größe des effektiven magnetischen Moments  $\mu_{\text{eff}}$ . Die empirische Zahl  $\mu_{\text{eff}}$  ist bei Gültigkeit des Curie-Gesetzes temperaturunabhängig. Der Vorteil bei der Angabe von  $\mu_{\text{eff}}$  gegenüber  $\chi_{\text{mol}}$ -Werten besteht darin, dass eine Abweichung von dem Curie-Gesetz an den temperaturabhängigen  $\mu_{\text{eff}}$ -Werten unmittelbar erkannt wird. Die Abbildung 4.2.8 zeigt die Unabhängigkeit von der Temperatur bis circa 150 K mit einem magnetischen Moment  $\mu_{\text{eff}} = 8,48 \mu_{\text{B}}$ . Wenn nach dem Curie-Weiss-Gesetz nur der höhere Temperaturbereich oberhalb von 150 K betrachtet wird, zeigt die gemessene Probe ein Curie-Weiss-Verhalten

mit einer Curie-Weiss-Konstanten von  $\Theta_p = -6,6$  K. Dieses wird gefunden, wenn aufgrund der Tendenz zu antiparalleler Ausrichtung benachbarter Dipole entweder Antiferromagnetismus oder Ferrimagnetismus unterhalb einer bestimmten kritischen Temperatur (Néel-Temperatur  $T_N$ ) auftritt.

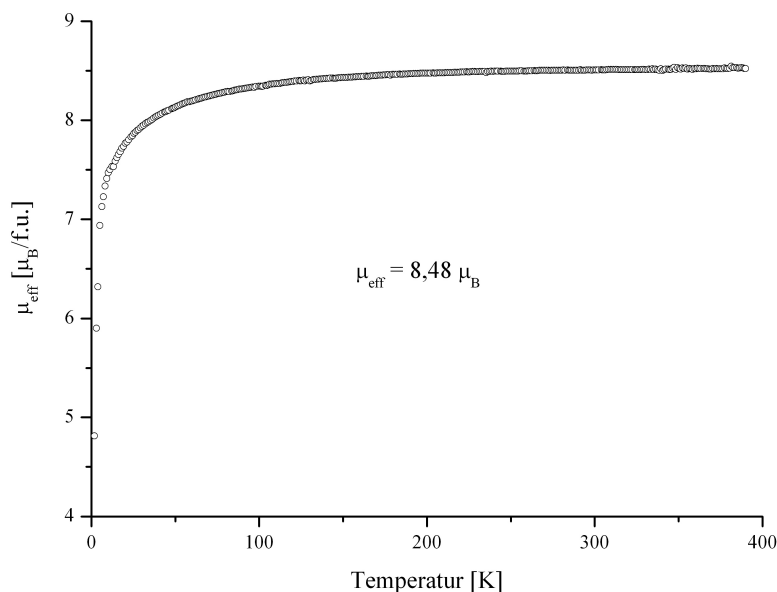


Abbildung 4.2.8: Das effektive magnetische Moment von  $[\text{Dy}_2\text{Co}(\text{OAc})_8(\text{H}_2\text{O})_2](\text{HOAc})_2$ .

Im Verlauf des Graphen in Abbildung 4.2.7 kann jedoch kein Übergang in eine antiferromagnetische oder ferrimagnetische Wechselwirkung mit kritischer Temperatur beobachtet werden. Dieses Verhalten ist häufig anzutreffen, wenn die kooperativen Effekte zwischen den magnetischen Zentren vernachlässigbar sind. Die Verbindungen zeigen dann bis zu tiefen Temperaturen Paramagnetismus. Das magnetische Verhalten der chemisch gebundenen Ionen weicht dabei mehr oder weniger stark von dem der freien Ionen ab. Der Einfluss der Umgebung auf das magnetische Zentrum macht sich im Wesentlichen in der elektrostatischen Wechselwirkung zwischen den Liganden und den Valenzelektronen (Kristallfeld- bzw. Ligandenfeld-Effekt) bemerkbar. Der Magnetismus wird maßgeblich bestimmt durch die Stärke dieses Einflusses im Vergleich zur Elektron-Elektron-Wechselwirkung und zur Spin-Bahn-Kopplung, gemessen jeweils als Energie-Aufspaltung der Valenzelektronenzustände. Bei den Ionen der Lanthanoide mit ihren großen Radien (100-124 pm) und den tief im Inneren der Elektronenhülle unter der abgeschlossenen  $5s^2p^6$ -Schale angeordneten 4f-Elektronen ist der Ligandenfeldeffekt deutlich schwächer als die Spin-Bahn-Kopplung. Dagegen haben bei den 3d-Ionen Ligandenfeld-Effekte einen um mehrere Größenordnungen stärkeren Einfluss und rangieren deutlich vor der Spin-Bahn-

Kopplung, da die den Magnetismus bestimmenden Valenzelektronen nach außen ragen <sup>[57]</sup>. Misst man die Magnetisierung bei konstanter Temperatur in Abhängigkeit des sich ändernden Magnetfeldes, und trägt die Magnetisierung  $M$  als Funktion des angelegten Magnetfeldes  $H$  auf, so findet man einen Kurvenverlauf, der anzeigt, dass es sich hier nur um schwache antiferromagnetische Wechselwirkungen handelt.

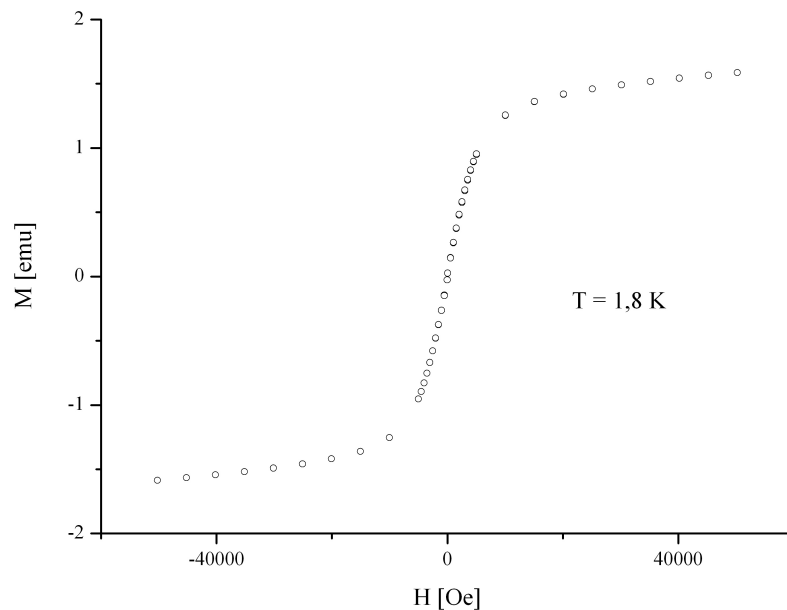


Abbildung 4.2.9: Magnetisierung  $M$  als Funktion des angelegten magnetischen Feldes  $H$  von  $[\text{Dy}_2\text{Co}(\text{OAc})_8(\text{H}_2\text{O})_2](\text{HOAc})_2$ .

Um hier jedoch genauere Aussagen zu treffen, wäre eine Messung der magnetischen Zelle mittels Neutronenbeugung sinnvoll. Es ist bis jetzt jedoch noch nicht gelungen, die Verbindung in ausreichender Menge für diese Messung herzustellen.

### 4.2.3 Thermisches Verhalten

Wie die DTA/TG-Messung zeigt, zersetzt sich die Substanz exotherm bis zu einer Temperatur von 422°C unter Abgabe von Wasser und einem am Carbonyl-Kohlenstoff deprotoniertes Acetaldehyd mit einem Massenverlust von 55%. Bei dieser Temperatur ist ein leicht endothermer Anstieg im Kurvenverlauf zu erkennen, der auf eine Kristallisation hinweisen könnte. Den angestellten Berechnungen zu Folge könnte es sich bei dem gebildeten Produkt um ein neues Dysprosium-Kobalt-Oxid ( $\text{Dy}_2\text{CoO}_4$ ) handeln, welches genau der restlichen Masse von 227,8 g/mol entsprechen würde.

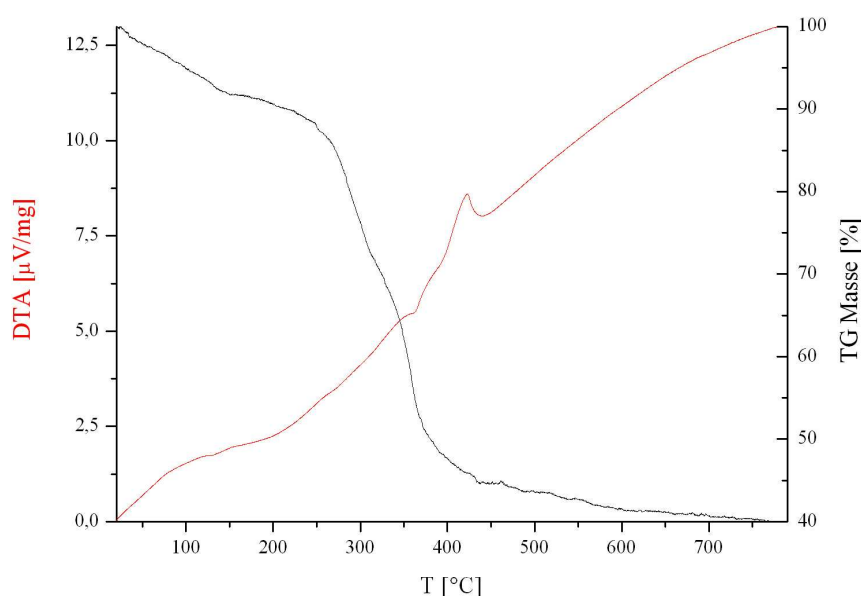


Abbildung 4.2.10: DTA/TG-Messung von  $[\text{Dy}_2\text{Co}(\text{OAc})_8(\text{H}_2\text{O})_2](\text{HOAc})_2$ .

Bisher ist nur  $\text{Dy}^{\text{III}}\text{Co}^{\text{III}}\text{O}_3$  <sup>[70]</sup> bekannt. Bis zu 800°C ist ein Massenverlust von 60% zu erkennen. Dies deutet auf eine komplette Zersetzung hin. Ob es sich bei der restlichen Probe um die metallischen Reste nebeneinander oder um ein Gemisch dieser handelt, konnte bisher nicht ermittelt werden. Bisher sind für das Dysprosium-Kobalt-System die intermetallischen Phasen  $\text{DyCo}_2$  <sup>[71]</sup>,  $\text{DyCo}_3$  <sup>[72]</sup>,  $\text{DyCo}_5$  <sup>[73]</sup>,  $\text{Dy}_2\text{Co}_{17}$  <sup>[74]</sup>, und  $\text{Dy}_{12}\text{Co}_7$  <sup>[75]</sup> bekannt.

#### 4.2.4 Absorptionsverhalten

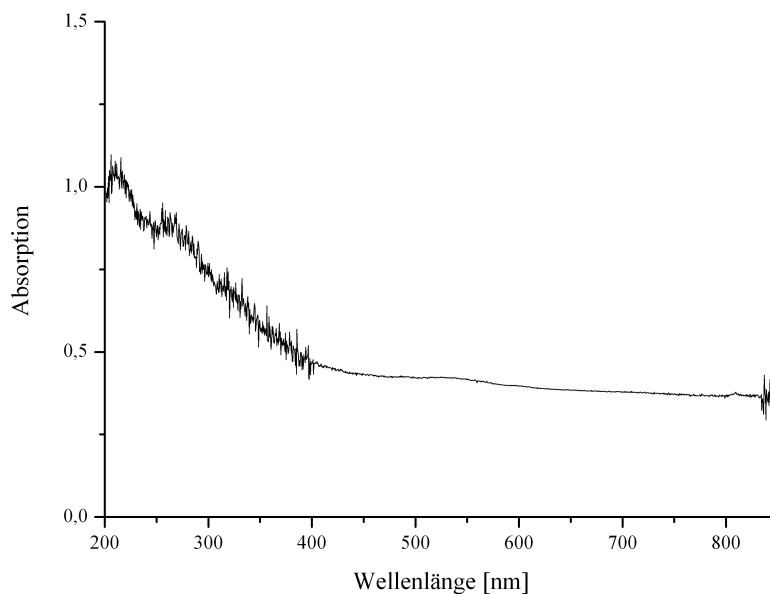


Abbildung 4.2.11: Absorptionsspektrum von  $[\text{Dy}_2\text{Co}(\text{OAc})_8(\text{H}_2\text{O})_2](\text{HOAc})_2$ .

Das Absorptionsspektrum der bimetallichen Dy-Co-Verbindung wurde bei 293 K gemessen und weist im Bereich von 200-850 nm zwei breite und intensive Banden auf, welche den d-d-Übergängen des Kobalt(II)-Ions zugewiesen werden können. Diese Banden dominieren in dem Spektrum, und es können keine f-f-Übergänge des Dysprosium(III)-Kations beobachtet werden. Diese Beobachtung könnte einen Einfluss auf den Energie-Austausch-Prozess zwischen den Metallatomen haben. Es konnte keine Emission von dem  $^4\text{F}_{9/2}$ -Level des Dysprosium(III)-Kations detektiert werden. Es wird angenommen, dass aufgrund des Wassermoleküls in der direkten Umgebung des Dysprosiumatoms durch eine starke Multiphononen-Relaxation diese Emission ausbleibt. Die Emission könnte ebenfalls von dem Kobalt-Kation gequencht werden.

#### Experimentelles

Eine 15 cm lange Duranglasampulle mit einem Innendurchmesser von 14 mm wurde mit 32,5 mg (0,2 mmol) Dysprosiumspänen, 22,0 mg (0,4 mmol) Mangan- bzw. 23,6 mg (0,4 mmol) Kobaltpulver und 0,08 ml (1,4 mmol = 84 mg;  $\rho = 1,048 \text{ g/ml}$ ) Essigsäure (98%) unter inerten Bedingungen befüllt und unter Vakuum verschlossen. Das Reaktionsgefäß wurde in einem Röhrenofen mit  $5^\circ\text{C/h}$  auf  $130^\circ\text{C}$  erhitzt, dort für 125 h gehalten und mit  $2^\circ\text{C/h}$  wieder auf Raumtemperatur abgekühlt.

## 5 Benzoate

Aufgrund der langen Geschichte der Benzoesäure (HOBz) und ihrer schon früher leichten Zugänglichkeit sind heute viele Benzoate bekannt. Die Synthesen erfolgten jedoch meist in einem Solvens wie zum Beispiel Wasser, Methanol oder Toluol<sup>[76, 77]</sup>. Somit beinhalten die meisten bekannten Strukturen ein koordinierendes oder eingelagertes Solvensmolekül. Verbindungen der 3d-Übergangs- und der Seltenerdmetalle, in denen neben den koordinierenden Benzoatanionen lediglich Benzoesäure-Addukte vorliegen, konnten bisher nur wenige dargestellt werden. Die bekannten Verbindungen  $\text{Cr}_2(\text{OBz})_4(\text{HOBz})_2$ <sup>[78]</sup>,  $\text{Cr}_8\text{O}_4(\text{OBz})_{16}$ <sup>[79]</sup>,  $\text{Co}(\text{OBz})_2$ <sup>[80]</sup>,  $\text{Cu}(\text{OBz})$ <sup>[81]</sup>,  $\text{Cu}(\text{OBz})_2(\text{HOBz})_2$ <sup>[82]</sup> und  $\text{Zn}(\text{OBz})_2$ <sup>[83]</sup> wurden meist aus den Metallsalzen wie z. B.  $\text{CuCO}_3$  mit Benzoesäure in Methanol,  $\text{Cr}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9 \text{H}_2\text{O}$  mit KOBz in Wasser,  $\text{Co}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6 \text{H}_2\text{O}$  mit Benzaldehyd in Toluol oder einem Metallacetylacetonat in Benzoesäure erhalten. Auf diesem Wege war es außerdem möglich, die bimetalischen Verbindungen von  $\text{CuNi}(\text{OBz})_4(\text{HOBz})_2$ <sup>[84]</sup> und  $\text{CoMn}(\text{OBz})_4$ <sup>[85]</sup> zu erhalten.

Durch die direkte Umsetzung der Metalle unter Verwendung der Benzoesäure als Liebigssäure wurden die Verbindungen  $\text{Mn}_7(\text{OBz})_{14}(\text{HOBz})_2$ ,  $\text{Fe}(\text{OBz})_2$ ,  $\text{SE}(\text{OBz})_3$  mit  $\text{SE} = \text{Pr}$ ,  $\text{Gd}$ ,  $\text{Ho}$ ,  $\text{Pr}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_2$ ,  $\text{Eu}_2(\text{OBz})_5(\text{HOBz})_2$  und  $\text{Eu}_2(\text{OBz})_6(\text{HOBz})$  synthetisiert<sup>[26, 86]</sup>. Als Strukturmotiv findet man häufig Ketten sowie 3-dimensionale Netzwerke. Unter Zuhilfenahme der direkten Umsetzung konnten im Bereich der 3d-Übergangsmetalle im Rahmen dieser Arbeit neue Metallbenzoat-Benzoesäure-Addukte des Mangans, Eisens und Nickels dargestellt werden. Außerdem konnten die neuen Verbindungen  $\text{Tb}(\text{OBz})_3$  und  $\text{Dy}(\text{OBz})_3$  synthetisiert und charakterisiert werden.

Bimetalliche Verbindungen der Benzoesäure sind in der Literatur bislang wenig bekannt, da sich deren Synthese als schwierig darstellte. Dennoch ist es im Rahmen dieser Arbeit gelungen,  $\text{Dy}_x\text{Co}_{1-x}(\text{OBz})_3$  herzustellen, dessen Struktur zu der des Gadoliniums, Terbiums und Dysprosiums isotyp ist. Auf den kristallographischen Lagen der Metallkationen liegen die Dysprosium- und Kobaltatome in statistischer Verteilung vor.

## 5.1 Manganbenzoate

Mit Benzoesäure konnten drei neue Verbindungen des Mangans erhalten werden. Es handelt sich um die Manganbenzoate  $\text{Mn}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})$ ,  $\text{Mn}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})_2$  und  $\text{Mn}_{19}(\text{OBz})_{38}(\text{HOBz})_2$ . Das zuletzt genannte Benzoat konnte phasenrein dargestellt werden und war somit für weitere Messungen zugänglich.

### 5.1.1 $\text{Mn}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})$

Die Verbindung bildet farblose, quaderförmige Kristalle aus, die in der orthorhombischen, azentrischen Raumgruppe  $P 2_12_12_1$  (Nr. 19) kristallisieren, mit  $a = 876,9(1)$ ,  $b = 2261,4(3)$ ,  $c = 2275,3(2)$  pm,  $Z = 4$  und  $R_1 = 0,0472$  für  $I_0 > 2\sigma(I_0)$ .

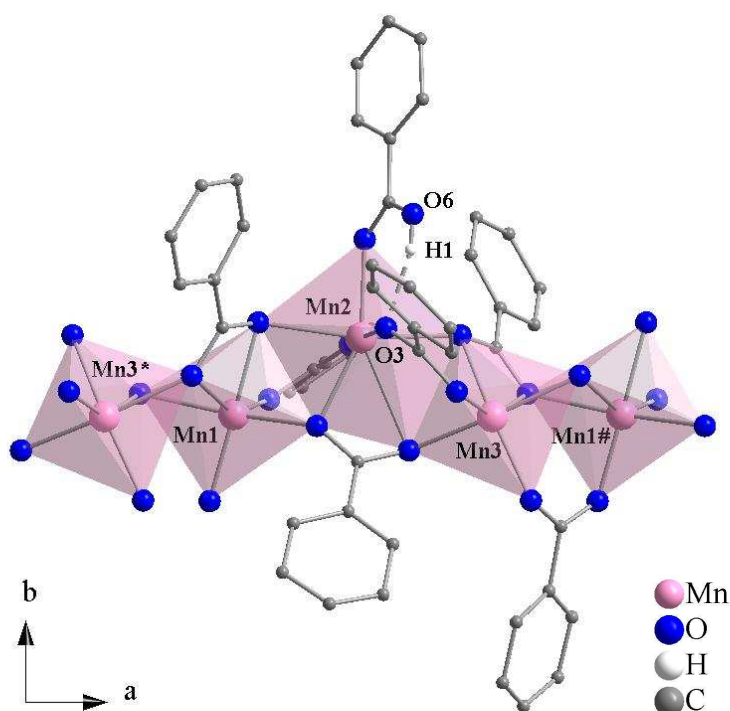


Abbildung 5.1.1: Koordinationssphäre der Manganatome in  $\text{Mn}_3(\text{OBz})_6(\text{OBz})$ .

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* =  $-1+x; y; z$ ; # =  $1+x; y; z$ .

Die asymmetrische Einheit wird von drei kristallographisch unabhängigen Manganatomen aufgebaut, welche von drei zweizählig verbrückenden ( $\mu_2: \eta^1 - \eta^1$ ), drei vierzählig verbrückend-chelatisierenden Benzoaten ( $\mu_3: \eta^2 - \eta^2$ ) und einer einzählig koordinierenden Benzoesäure ( $\eta^1$ ) umgeben sind (siehe Abbildung 4.1.1). Das koordinierende Säuremolekül bildet mit dem Sauerstoffatom der Hydroxylgruppe eine Wasserstoffbrückenbindung zum O(3)-Atom des zweizählig verbrückenden Benzoations aus. Der Abstand der beiden an der



Bindung beteiligten Sauerstoffatome beträgt  $O(3)-O(6) = 266,55(3)$  pm, und sie umspannen das Wasserstoffatom mit einem Winkel von  $O(3)-H(1)-O(6) = 164,88(2)^\circ$ . Zwei der kristallographisch unabhängigen Mangankationen werden von Sauerstoffatomen sechsfach zum verzerrten Oktaeder koordiniert, während das Mn(2)-Atom siebenfach koordiniert ist und eine verzerrte pentagonale Bipyramide ausbildet. Die Metall-Metall-Abstände variieren von 331,5(0) bis 357,5(1) pm.

**Tabelle 5.1.1: Mangan-Mangan und Mangan-Sauerstoff-Abstände [pm] in  $Mn_3(OBz)_6(HOBz)$**

Atome	d [pm]	Atome	d [pm]	Atome	d [pm]
Mn(1)-Mn(2)	341,9(0)	Mn(2)-Mn(3)	331,5(1)	Mn(3*)-Mn(1)	357,5(1)
Mn(1)-O(1)	219,6(5)	Mn(2)-O(1)	228,0(6)	Mn(3)-O(2)	209,2(5)
Mn(1)-O(8*)	224,8(5)	Mn(2)-O(2)	279,1(3)	Mn(3)-O(4)	206,7(3)
Mn(1)-O(10)	203,7(5)	Mn(2)-O(3)	215,5(5)	Mn(3)-O(7)	232,5(5)
Mn(1)-O(11)	234,5(5)	Mn(2)-O(5)	223,4(5)	Mn(3)-O(8)	231,0(5)
Mn(1)-O(12)	231,7(5)	Mn(2)-O(7)	226,9(6)	Mn(3)-O(9)	209,2(5)
Mn(1)-O(13)	204,0(5)	Mn(2)-O(12)	236,2(5)	Mn(3)-O(11#)	221,5(5)
		Mn(2)-O(14)	206,8(5)		

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* =  $-1+x; y; z$ ; # =  $1+x; y; z$ .

Die Mangan-Sauerstoff-Abstände variieren 203,7(5) bis 279,1(3) pm und bilden einen mittleren Abstand von  $\langle Mn-O \rangle = 223,4$  pm. Die Oktaeder sind jeweils über zwei zueinander *cis*-stehende Kanten miteinander verknüpft. Die pentagonale Bipyramide verknüpft über zwei Kanten entlang der fünfzähligen Achse. Das fünfte Sauerstoffatom auf dieser Achse gehört zu der einzähnig koordinierenden Benzoesäure. Die Verknüpfung der Polyeder erfolgt jeweils über die Sauerstoffatome der vierzähnig koordinierenden Benzoate ( $\mu_3: \eta^2 - \eta^2$ ). Somit bilden sich Trimere, die wiederum über Kantenverknüpfung Ketten entlang [100] ausbilden (siehe Abbildung 5.1.2).

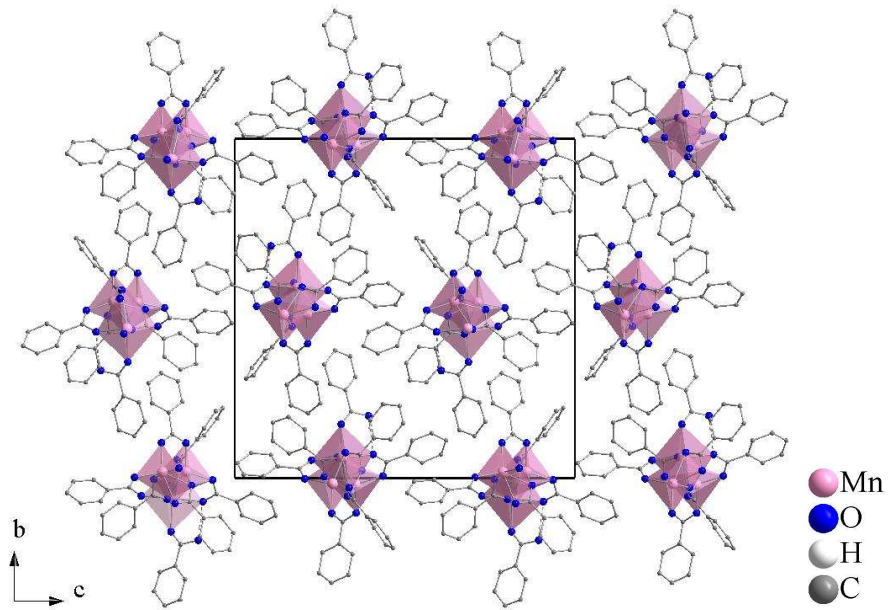


Abbildung 5.1.2: Projektion der Kristallstruktur von  $\text{Mn}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})$  entlang [100].

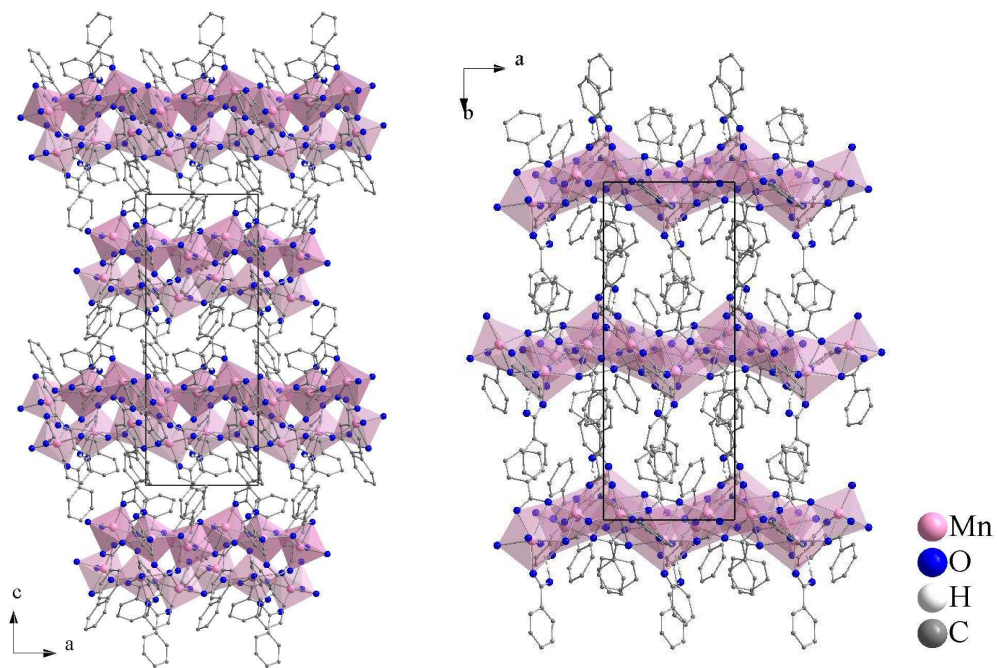


Abbildung 5.1.3: Darstellung der Kristallstruktur von  $\text{Mn}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})$  entlang [010] und [001].

Die Ketten liegen entlang [010] alternierend nebeneinander vor und sind entlang [001] aufeinander gestapelt.

**Experimentelles**

33,0 mg (0,6 mmol) Manganpulver und 610,0 mg (5,0 mmol) Benzoesäure im Überschuss wurden unter inerten Bedingungen in eine 10 cm lange Duranglasampulle mit einem Innendurchmesser von 18 mm gefüllt. Diese wurde unter Vakuum abgeschmolzen und mit 5°C/h auf 200°C erhitzt, dort für 100 h gehalten, mit 2°C/h auf 100°C abgekühlt, und dort nochmals für 62 h gehalten und anschließend mit 5°C/h auf Raumtemperatur abgekühlt.

**Tabelle 5.1.2: Kristallographische Daten für Mn<sub>3</sub>(OBz)<sub>6</sub>(HOBz)**

Summenformel	C <sub>49</sub> H <sub>36</sub> Mn <sub>3</sub> O <sub>14</sub>	
Molmasse	1013,60 g/mol	
Messtemperatur	293(2) K	
Messgerät	STOE IPDS I	
Verwendete Strahlung	0,71073 Å (Mo-K <sub>α1</sub> )	
Kristallsystem, Raumgruppe	orthorhombisch, <i>P</i> 2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> (Nr. 19)	
Gitterkonstanten	a = 876,9 (1) pm	α = 90°
	b = 2261,4 (3) pm	β = 90°
	c = 2275,3(2) pm	γ = 90°
Zellvolumen	4512,2(8) · 10 <sup>6</sup> pm <sup>3</sup>	
Z	4	
Berechnete Dichte	1,492 g/cm <sup>3</sup>	
Absorptionskorrektur	numerisch	
Absorptionskoeffizient	0,895 mm <sup>-1</sup>	
F(000)	2068	
Messbereich	2,49° bis 25,00°	
Index-Bereich	-9 ≤ h ≤ 10, -26 ≤ k ≤ 26, -26 ≤ l ≤ 27	
Zahl der gemessenen Reflexe	32155	
davon symmetrieunabhängig	7846	
Beobachtete Reflexe [I <sub>0</sub> > 2σ(I)]	3303	
Verfeinerungsmethode	SIR92 <sup>[46]</sup> und SHELXL97 <sup>[47]</sup>	
Daten / Parameter	7846 / 598	
R <sub>int</sub>	0,1613	
Goof	0,712	
R Werte [I <sub>0</sub> > 2σ(I)]	R <sub>1</sub> = 0,0455; wR <sub>2</sub> = 0,0734	
R Werte (alle Daten)	R <sub>1all</sub> = 0,1311; wR <sub>2all</sub> = 0,0928	
Restelektronendichte	0,27 und -0,36 10 <sup>6</sup> e·pm <sup>-3</sup>	

### 5.1.2 $\text{Mn}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})_2$

$\text{Mn}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})_2$  kristallisiert in farblosen, quaderförmigen Kristallen in der orthorhombischen Raumgruppe  $P bca$  (Nr. 61) mit  $a = 1604,1(2)$ ,  $b = 2436,9(3)$ ,  $c = 2704,0(3)$  pm,  $Z = 8$  und  $R_1 = 0,0555$  für  $I_0 > 2\sigma(I_0)$ . Die drei kristallographisch unabhängigen Manganatome werden oktaedrisch von sechs Sauerstoffatomen umgeben.

**Tabelle 5.1.3: Mangan-Sauerstoff-Abstände in  $\text{Mn}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})_2$**

Atome	d [pm]	Atome	d [pm]	Atome	d [pm]
Mn(1)-O(6*)	214,4(5)	Mn(2)-O(3)	205,8(5)	Mn(3)-O(1)	219,3(5)
Mn(1)-O(8)	210,2(5)	Mn(2)-O(9)	219,3(5)	Mn(3)-O(4)	220,0(5)
Mn(1)-O(10*)	213,7(5)	Mn(2)-O(12)	229,2(5)	Mn(3)-O(6)	217,8(5)
Mn(1)-O(12)	248,5(5)	Mn(2)-O(14)	204,6(4)	Mn(3)-O(7#)	208,4(5)
Mn(1)-O(13)	210,7(5)	Mn(2)-O(15)	227,2(5)	Mn(3)-O(9)	220,2(4)
Mn(1)-O(15)	218,6(5)	Mn(2)-O(16)	241,0(5)	Mn(3)-O(16)	223,0(5)

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* =  $-0,5+x; y; 0,5-z$ ; # =  $0,5+x; y; 0,5-z$ .

Die Mangan-Sauerstoff-Bindungslängen variieren von 204,6 bis 248,5 pm mit einem Mittelwert von  $\langle \text{Mn-O} \rangle = 219,6$  pm. Die drei Manganatome werden von je einem vierzählig ( $\mu_3: \eta^2 - \eta^2$ ) und einem dreizählig verbrückend-chelatisierenden ( $\mu_2: \eta^1 - \eta^2$ ), von drei zweizählig verbrückenden ( $\mu_2: \eta^1 - \eta^1$ ) sowie einem zweizählig verbrückenden Benzoatanion ( $\mu_2: \eta^2$ ) umgeben. Zusätzlich werden sie von einem einzählig ( $\eta^1$ ) und einem zweizählig ( $\mu_2: \eta^2$ ) koordinierenden Benzoessäuremolekül koordiniert (siehe Abbildung 5.1.4). Die Benzoessäuremoleküle bilden innerhalb der asymmetrischen Einheit Wasserstoffbrückenbindungen aus, die maßgeblich zur Stabilität der Verbindung beitragen.

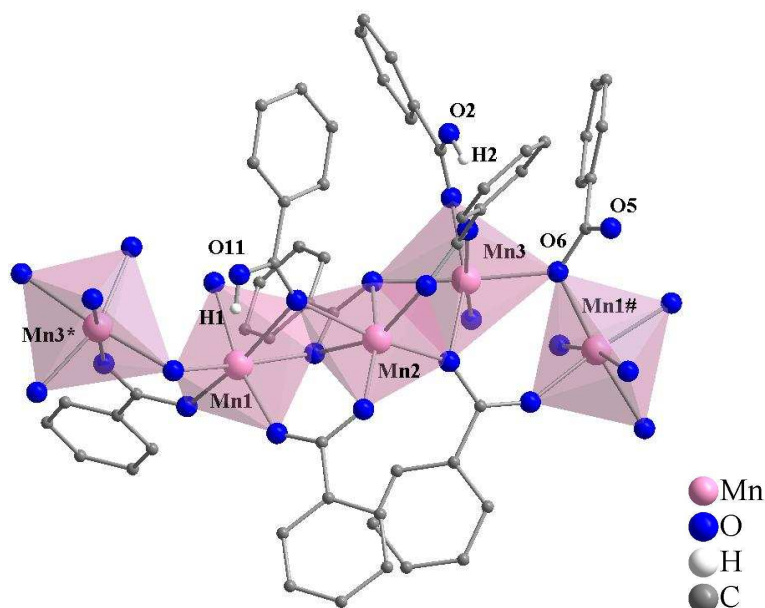


Abbildung 5.1.4: Koordinationssphäre der Manganatome in  $\text{Mn}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})_2$ .

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* =  $-0,5+x; y; 0,5-z$ ; # =  $0,5+x; y; 0,5-z$ .

Bei Betrachtung des Koordinationsmusters der koordinierenden Benzoesäuremoleküle sowie des einzähnigen Benzoatanions findet man zwei Verknüpfungsmuster, auf die hier näher eingegangen werden soll (siehe Abbildung 5.1.5). Betrachten wir zunächst das mit dem Carboxyl-Sauerstoffatom O(1) an das Manganatom Mn(3) koordinierende Säuremolekül, so finden wir für das Hydroxyl-Sauerstoffatom O(2) einen Abstand von  $\text{O}(2)\text{-O}(4) = 261,8(7)$  pm zu dem Sauerstoffatom eines benachbarten Benzoations. Der Winkel für diese Verbrückung beträgt  $\text{O}(2)\text{-H}(2)\text{-O}(4) = 156,3(4)^\circ$ . Eine ähnliche Situation liegt an dem Säuremolekül vor, das mit dem Carbonyl-Sauerstoff O(12) einzähnig verbrückend koordiniert und mit dem Hydroxyl-Sauerstoff O(11) eine Wasserstoffbrückenbindung zum benachbarten Benzoat ausbildet. Der Winkel dieser Verbrückung beträgt  $\text{O}(5^*)\text{-H}(1)\text{-O}(11) = 163,1(4)^\circ$ . Der Abstand der Atome ist hier mit  $\text{O}(11)\text{-O}(5^*) = 249,3(7)$  pm wesentlich kürzer als der vorherige. Dieser kleinere Abstand könnte auf die ungewöhnliche Koordination des Benzoations zurückzuführen sein welches an dieser Bindung beteiligt ist. Es koordiniert mit nur einem Sauerstoffatom an das Metallatom und bildet mit dem anderen Sauerstoffatom O(5\*) die Wasserstoffbrückenbindung zum O(11) aus.

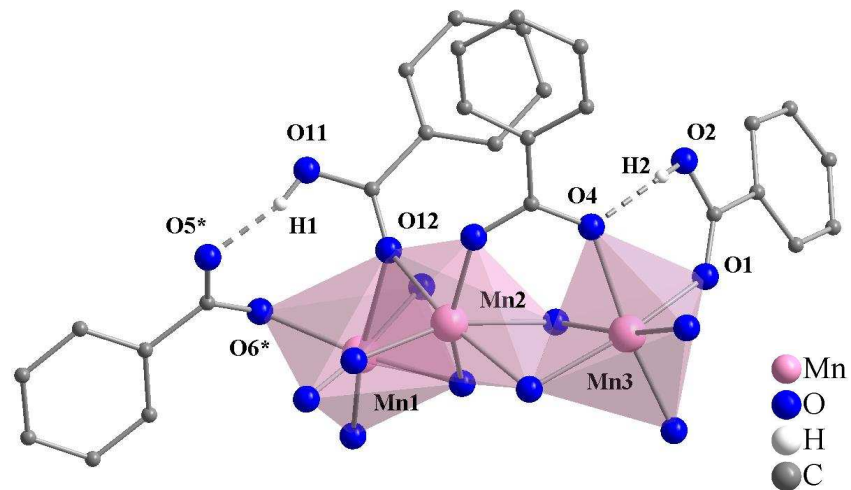


Abbildung 5.1.5: Darstellung der Wasserstoffbrückenbindungen in  $\text{Mn}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})_2$ .

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* =  $-0,5+x; y; 0,5-z$ ; # =  $0,5+x; y; 0,5-z$ .

Die drei Oktaeder sind *cis*-ständig miteinander über Kanten zu Trimeren verknüpft. Die Trimere sind gegenüberliegend von der Kantenverknüpfung über Ecken zu zick-zackförmigen Ketten entlang [100] verknüpft. Diese Ketten sind in einer hexagonalen Stabpackung angeordnet (siehe Abbildung 5.1.6).

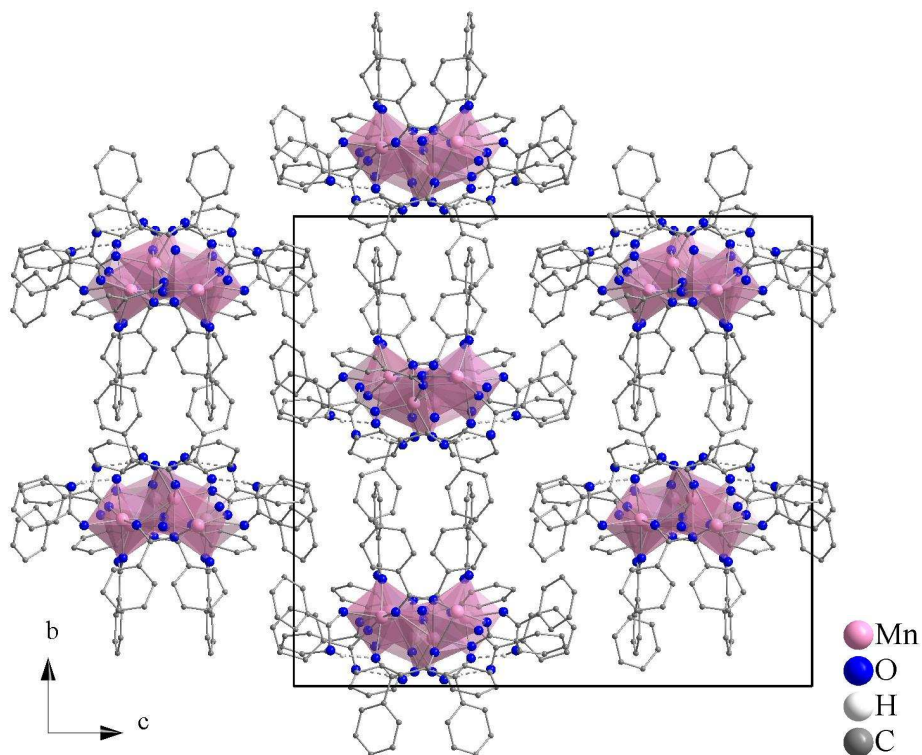


Abbildung 5.1.6: Projektion der Kristallstruktur von  $\text{Mn}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})_2$  entlang [100].



Die Kettenstapelung erfolgt entlang [010] und [001] alternierend und wird in Abbildung 5.1.7 dargestellt.

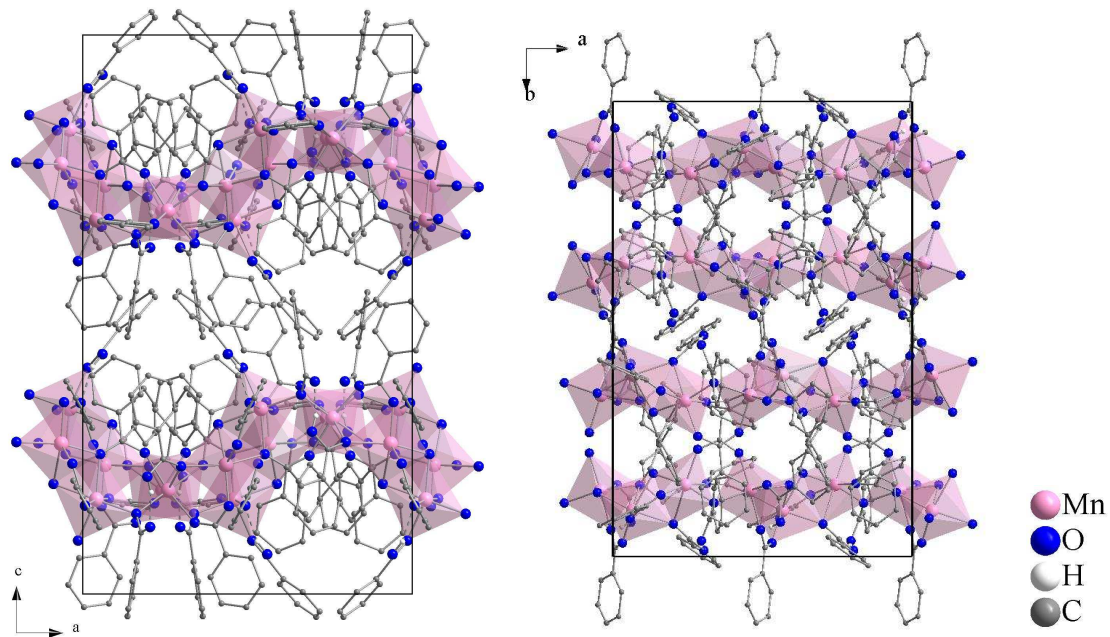


Abbildung 5.1.7: Projektion der Kristallstruktur von  $\text{Mn}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})_2$  entlang [010] und [001].

Die pulverdiffraktometrischen Untersuchungen der erhaltenen Probe zeigen nicht nur die Reflexlagen des Manganbenzoats  $\text{Mn}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})_2$  sondern weisen auch Reflexe einer bislang unbekanntem Verbindung auf, die nicht näher charakterisiert werden konnten.

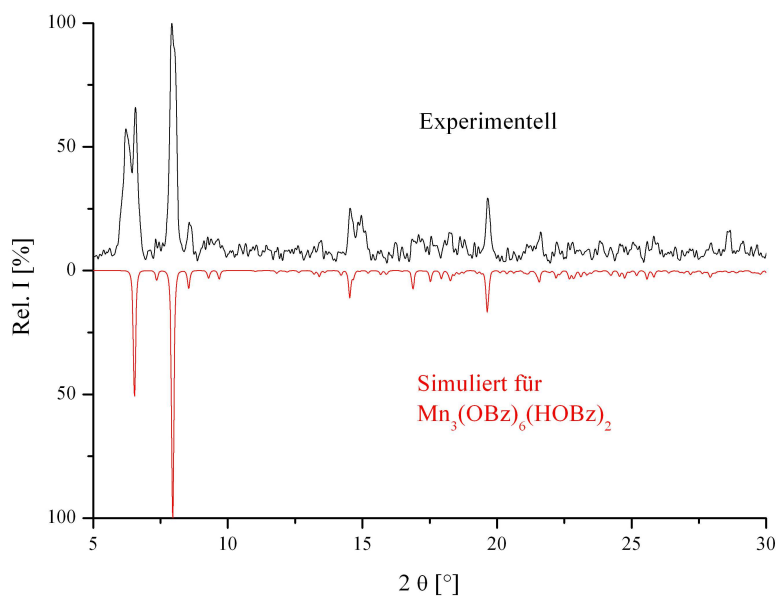


Abbildung 5.1.8: Pulverdiffraktogramm von  $\text{Mn}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})_2$ .



**Experimentelles**

22,0 mg (0,4 mmol) Manganpulver und 171,0 mg (1,4 mmol) Benzoesäure wurden unter inerten Bedingungen in eine 10 cm lange Duranglasampulle mit einem Innendurchmesser von 18 mm gefüllt. Diese wurde unter Vakuum abgeschmolzen und mit 10°C/h auf 230°C erhitzt, für 100 h dort gehalten, mit 1°C/h auf 130°C abgekühlt, und dort nochmals für 62 h gehalten und anschließend mit 5°C/h auf Raumtemperatur abgekühlt.

**Tabelle 5.1.4: Kristallographische Daten für Mn<sub>3</sub>(OBz)<sub>6</sub>(HOBz)<sub>2</sub>**

Summenformel	C <sub>56</sub> H <sub>42</sub> Mn <sub>3</sub> O <sub>16</sub>	
Molmasse	1135,72 g/mol	
Messtemperatur	293(2) K	
Messgerät	STOE IPDS I	
Verwendete Strahlung	0,71073 Å (Mo-K <sub>α1</sub> )	
Kristallsystem, Raumgruppe	orthorhombisch, <i>P bca</i> (Nr. 61)	
Gitterkonstanten	a = 1604,1(2) pm	α = 90°
	b = 2436,9(3) pm	β = 90°
	c = 2704,0(3) pm	γ = 90°
Zellvolumen	10570,0(2) · 10 <sup>6</sup> pm <sup>3</sup>	
Z	8	
Berechnete Dichte	1,427 g/cm <sup>3</sup>	
Absorptionskorrektur	numerisch	
Absorptionskoeffizient	0,776 mm <sup>-1</sup>	
F(000)	4648	
Messbereich	1,83° bis 24,28°	
Index-Bereich	-18 ≤ h ≤ 17, -28 ≤ k ≤ 28, -31 ≤ l ≤ 31	
Zahl der gemessenen Reflexe	62006	
davon symmetrieunabhängig	8367	
Beobachtete Reflexe [I <sub>0</sub> > 2σ(I)]	2534	
Verfeinerungsmethode	SIR92 <sup>[46]</sup> und SHELXL97 <sup>[47]</sup>	
Daten / Parameter	8367 / 679	
R <sub>int</sub>	0,3219	
Goof	0,654	
R Werte [I <sub>0</sub> > 2σ(I)]	R <sub>1</sub> = 0,0555; wR <sub>2</sub> = 0,0679	
R Werte (alle Daten)	R <sub>1all</sub> = 0,1959; wR <sub>2all</sub> = 0,0925	
Restelektronendichte	0,33 und -0,32 10 <sup>6</sup> e·pm <sup>-3</sup>	

### 5.1.3 $\text{Mn}_{19}(\text{OBz})_{38}(\text{HOBz})_2$

#### 5.1.3.1 Strukturbeschreibung

$\text{Mn}_{19}(\text{OBz})_{38}(\text{HOBz})_2$  bildet quaderförmige, rosa Kristalle aus, die in der orthorhombischen, azentrischen Raumgruppe  $P 2_1 2_1 2$  (Nr. 18) kristallisieren, mit  $a = 3895,9(1)$ ,  $b = 1773,7(1)$ ,  $c = 1954,5(1)$  pm,  $Z = 4$  und  $R_1 = 0,0677$  für  $I_0 > 2\sigma(I_0)$ . Die asymmetrische Einheit wird von zehn kristallographisch unabhängigen Manganatomen aufgebaut, von denen eines auf einer speziellen, zweizähligen Lage sitzt. Die zehn Manganatome weisen ein kompliziertes Verknüpfungsmuster auf und sind von 19 Benzoatliganden und einem Benzoessäuremolekül umgeben. Das Sauerstoffatom der Hydroxylgruppe bildet mit einem benachbarten, zweizählig verbrückenden Benzoat eine Wasserstoffbrückenbindung aus, mit einem Winkel von  $\text{O}(34)\text{-H}(34\text{A})\text{-O}(39) = 168,3(8)^\circ$  und einem Abstand der beteiligten Sauerstoffatome von  $\text{O}(34)\text{-O}(39) = 262(1)$  pm.

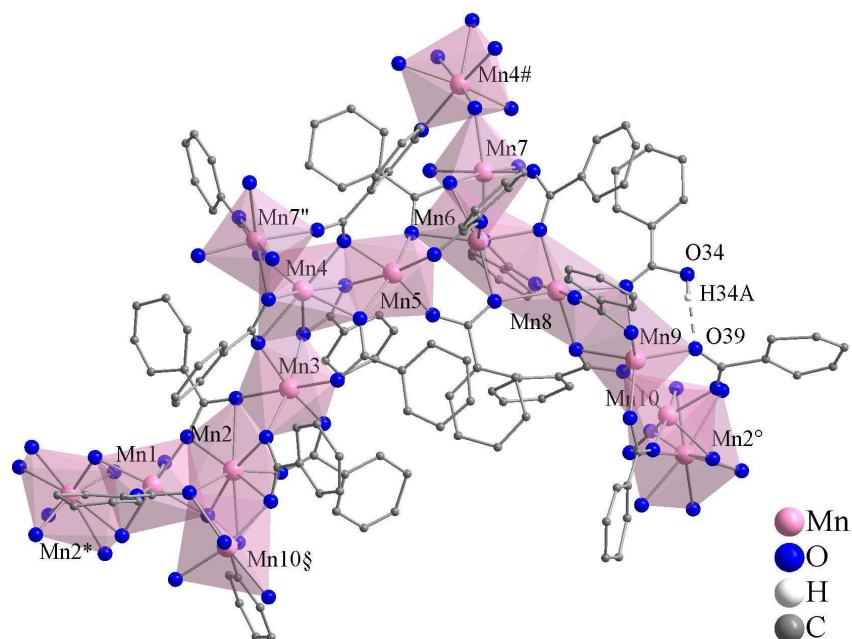


Abbildung 5.1.9: Koordinationssphäre der Manganatome in  $\text{Mn}_{19}(\text{OBz})_{38}(\text{HOBz})_2$ .

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* =  $-x; 1-y; z$ ; # =  $0,5-x; -0,5+y; -z$ , § =  $0,5-x; -0,5+y; 1-z$ ,  
 § =  $0,5-x; 0,5+y; 1-z$ , “ =  $0,5-x; 0,5+y; -z$ .

Acht der Manganatome sind oktaedrisch von Sauerstoffatomen umgeben, wohingegen das Mn(2)-Atom achtfach zur hexagonalen Bipyramide und das Mn(4)-Atom siebenfach zur pentagonalen Bipyramide koordiniert werden. Die Koordinationspolyeder sind leicht

verzerrt (für ausgewählte Bindungslängen und Winkel siehe Appendix 10.6). Die Mangan-Mangan-Abstände variieren in einem Bereich von 318,8(2) bis 361,5(2) pm und betragen im Mittel  $\langle \text{Mn-Mn} \rangle = 340,6$  pm. Die Mangan-Sauerstoff-Abstände variieren in einem Bereich von 199,9(8) bis 269,8(9) pm, bei einem Mittelwert von  $\langle \text{Mn-O} \rangle = 220,9$  pm. Die Koordinationspolyeder sind insgesamt über drei Ecken, sieben Kanten und zwei Flächen miteinander verknüpft und bilden verzweigte Ketten aus, die zu einem dreidimensionalen Netzwerk miteinander verknüpft sind. Die Verknüpfung der Ketten untereinander erfolgt über das Mn(1)-Atom. Dieses liegt auf einer speziellen Lage und verknüpft über *cis*-ständige Kanten zu zwei äquivalenten Mn(2)-Atomen. Das Mn(2)-Atom verknüpft zusätzlich zu dem Mn(3)-Atom über eine benachbarte Kante des sechsgliedrigen Rings und bildet eine Flächenverknüpfung zu dem Mn(10)-Atom aus. Ähnlich verhält es sich mit dem Mn(4)-Atom, welches über zwei Kanten entlang der fünfgliedrigen Ebene zum Mn(3)- und Mn(5)-Atom verknüpft und zusätzlich mit dem fünften Sauerstoffatom über eine Ecke zu dem Mn(7)-Atom verbrückt.

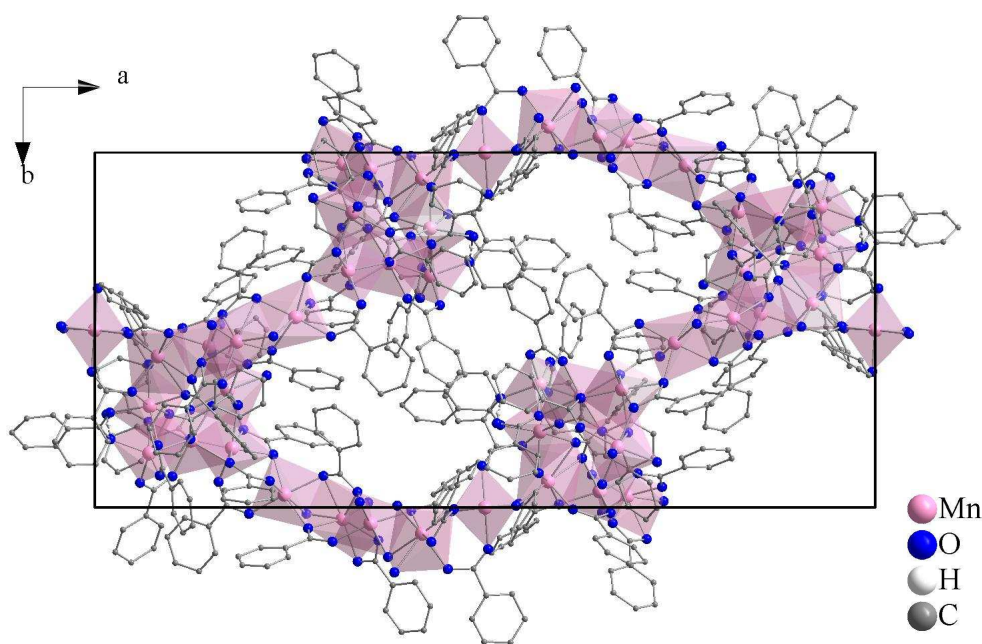


Abbildung 5.1.10: Projektion der Kristallstruktur von  $\text{Mn}_{19}(\text{OBz})_{38}(\text{HOBz})_2$  entlang [001].

Die ringförmige Verknüpfung der vier Einheiten in der Elementarzelle beinhaltet 36 Manganatome, wobei die Atome Mn(1), Mn(2), Mn(4) und Mn(7) diese Ringe miteinander verbinden.

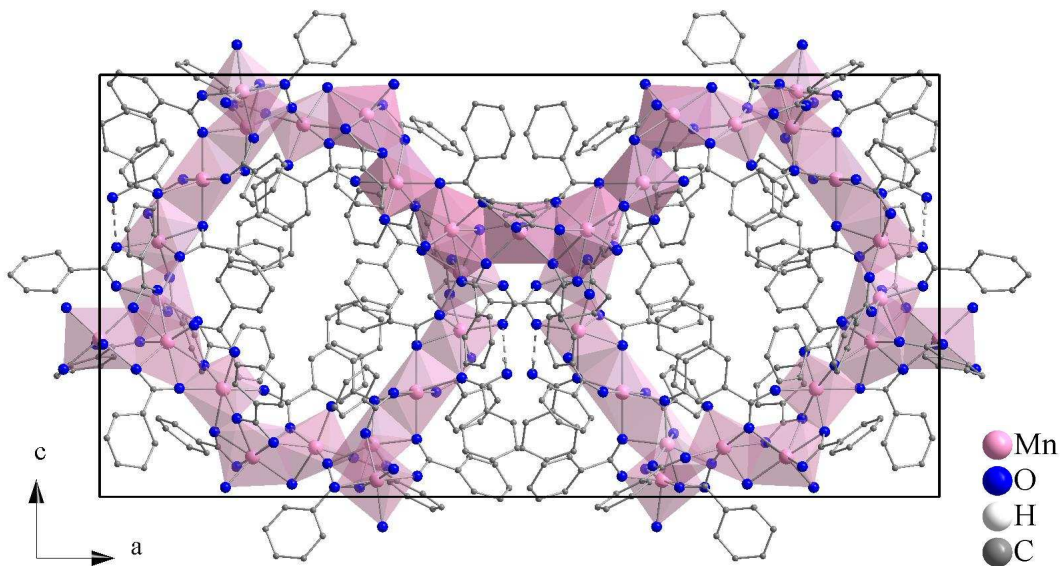


Abbildung 5.1.11: Projektion der Kristallstruktur von  $\text{Mn}_{19}(\text{OBz})_{38}(\text{HOBz})_2$  entlang [010].

Von den neunzehn koordinierenden Benzoatliganden sind sechs zweizählig verbrückend ( $\mu_2: \eta^1 - \eta^1$ ), sechs dreizählig verbrückend ( $\mu_3: \eta^1 - \eta^2$ ) und sieben vierzählig verbrückend-chelatisierend ( $\mu_3: \eta^2 - \eta^2$ ). Das Benzoesäuremolekül verbrückt zweizählig ( $\mu_2: \eta^2$ ) mit seinem Carbonyl-Sauerstoffatom.

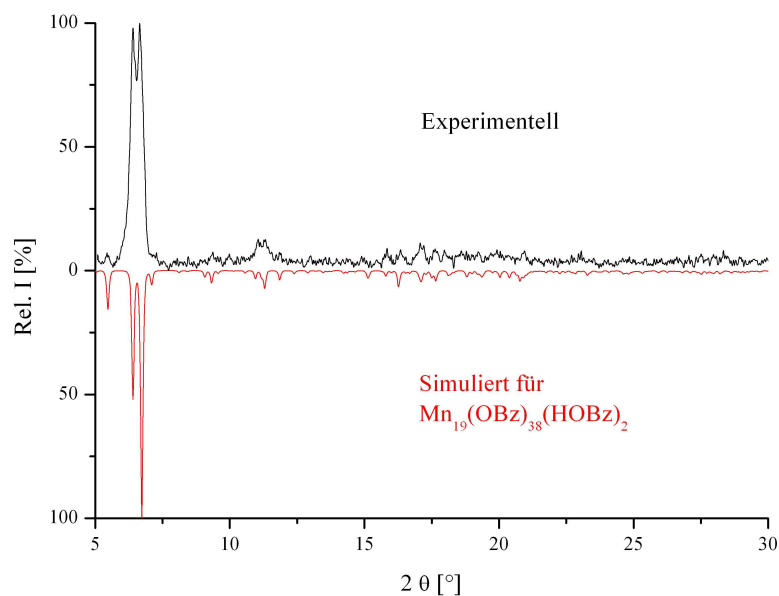


Abbildung 5.1.12: Pulverdiffraktogramm von  $\text{Mn}_{19}(\text{OBz})_{38}(\text{HOBz})_2$ .

Der Vergleich der Diffraktogramme zeigt, dass dieses Manganbenzoat phasenrein hergestellt werden konnte.

**Tabelle 5.1.5: Kristallographische Daten für Mn<sub>19</sub>(OBz)<sub>38</sub>(HOBz)<sub>2</sub>**

Summenformel	C <sub>140</sub> H <sub>101</sub> Mn <sub>9,5</sub> O <sub>40</sub>
Molmasse	2945,14 g/mol
Messtemperatur	173(2) K
Messgerät	STOE IPDS II
Verwendete Strahlung	0,71073 Å (Mo-K <sub>α1</sub> )
Kristallsystem, Raumgruppe	orthorhombisch, <i>P</i> 2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2 (Nr. 18)
Gitterkonstanten	a = 3895,9(1) pm      α = 90° b = 1773,7(1) pm      β = 90° c = 1954,5(1) pm      γ = 90°
Zellvolumen	13505,9(1) · 10 <sup>6</sup> pm <sup>3</sup>
Z	4
Berechnete Dichte	1,448 g/cm <sup>3</sup>
Absorptionskorrektur	numerisch
Absorptionskoeffizient	0,938 mm <sup>-1</sup>
F(000)	5994
Messbereich	1,05° bis 25,32°
Index-Bereich	-46 ≤ h ≤ 46, -21 ≤ k ≤ 21, -22 ≤ l ≤ 23
Zahl der gemessenen Reflexe	104929
davon symmetrieunabhängig	23714
Beobachtete Reflexe [I <sub>0</sub> > 2σ(I)]	9574
Verfeinerungsmethode	SIR92 <sup>[46]</sup> und SHELXL97 <sup>[47]</sup>
Daten / Parameter	23714 / 1739
R <sub>int</sub>	0,1068
Goof	0,781
R Werte [I <sub>0</sub> > 2σ(I)]	R <sub>1</sub> = 0,0674; wR <sub>2</sub> = 0,1618
R Werte (alle Daten)	R <sub>1all</sub> = 0,1471; wR <sub>2all</sub> = 0,1922
Restelektronendichte	1,38 und -0,51 10 <sup>6</sup> e·pm <sup>-3</sup>

### 5.1.3.2 Magnetisches Verhalten

Zur genaueren Betrachtung der elektronischen Umgebung der Manganatome in  $\text{Mn}_{19}(\text{OBz})_{38}(\text{HOBz})_2$  wurde das magnetische Verhalten in Abhängigkeit der Temperatur untersucht. Die temperaturabhängige Messung der magnetischen Suszeptibilität  $\chi$  wurde zwischen 1,8 und 390 K bei einem äußeren magnetischen Feld von 0,1 T durchgeführt.

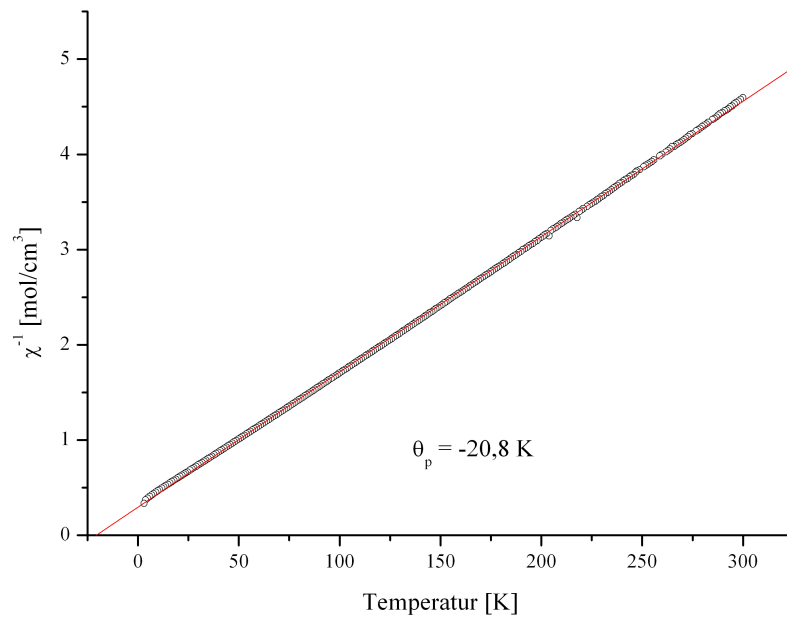


Abbildung 5.1.13: Die reziproke magnetische Suszeptibilität als Funktion der Temperatur von  $\text{Mn}_{19}(\text{OBz})_{38}(\text{HOBz})_2$ .

Die reziproke Suszeptibilität  $\chi^{-1}$  verläuft über den ganzen Temperaturbereich nahezu linear und zeigt ein Curie-Weiss-Verhalten mit einer Weiss-Konstanten von  $\Theta_p = -20,8 \text{ K}$ , was auf antiferromagnetisches Verhalten schließen lässt. Die Magnetisierung  $M$  in Abhängigkeit des äußeren Feldes  $H$  ist in Abbildung 5.1.14 gezeigt.

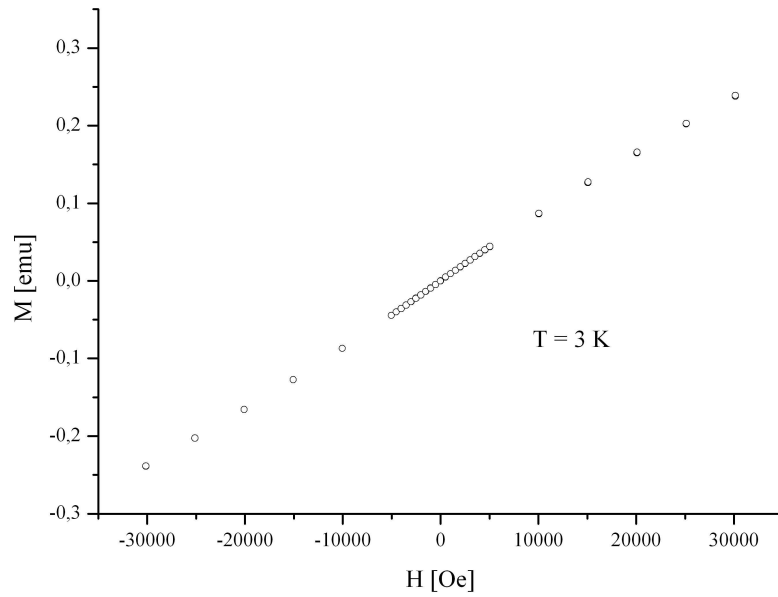


Abbildung 5.1.14: Magnetisierung  $M$  als Funktion des angelegten magnetischen Feldes  $H$  von  $\text{Mn}_{19}(\text{OBz})_{38}(\text{HOBz})_2$ .

Die Abbildung 5.1.15 zeigt die Unabhängigkeit des magnetischen Moments von der Temperatur bis circa 150 K mit  $\mu_{\text{eff}} = 5,3 \mu_{\text{B}}$ .

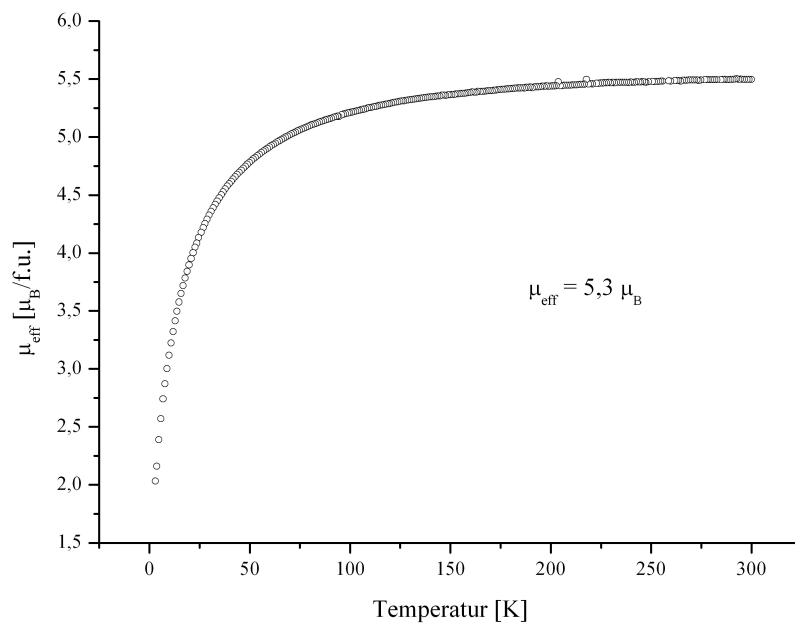


Abbildung 5.1.15: Das effektive magnetische Moment von  $\text{Mn}_{19}(\text{OBz})_{38}(\text{HOBz})_2$ .



### 5.1.3.3 Thermisches Verhalten

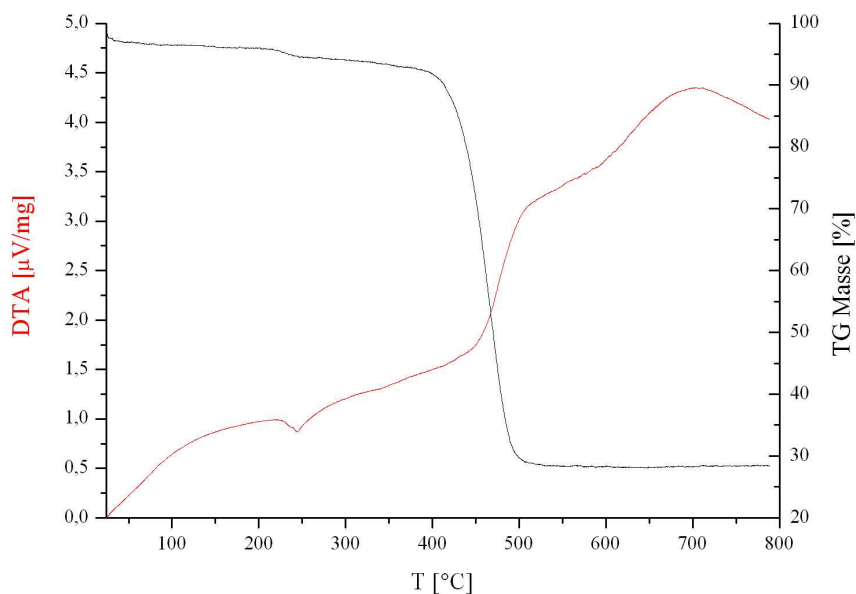


Abbildung 5.1.16: DTA/TG-Messung von Mn<sub>19</sub>(OBz)<sub>38</sub>(HOBz)<sub>2</sub>.

Die DTA/TG-Messung zeigt bei einer Temperatur von 244,5°C eine leicht endotherme Reaktion, die auf den Schmelzpunkt der Substanz nach Abgabe eines Benzoesäure- und eines Benzaldehydmoleküls mit einem Massenverlust von 7,8% hindeutet. Unter exothermen Bedingungen zersetzt sich die Manganverbindung mit einem Massenverlust von 64,8% unter Abgabe von 18 Benzaldehydmolekülen bei einer Temperatur von circa 400-500°C. Die restliche Masse von 28 % könnte auf das Vorliegen von neunzehnmal MnO<sub>2</sub> hindeuten. Zahlreiche Manganoxide sind bisher bekannt<sup>[87-94]</sup>, dennoch wäre eine genauere Untersuchung der Substanz mittels Pulverdiffraktometrie interessant, da es sich um eine neue Phase nach der thermischen Zersetzung des Benzoats handeln könnte. Die restliche Substanz durchläuft ohne Massenverlust einen weiteren exothermen Anstieg bei 600°C der bei 700°C wieder abfällt.

#### Experimentelles

22,0 mg (0,4 mmol) Manganpulver und 97,4 mg (0,8 mmol) Benzoesäure wurden in eine 15 cm lange Duranglasampulle mit einem Innendurchmesser von 12 mm gefüllt. Diese wurde nicht wie üblich unter Vakuum verschlossen, da sonst das gewünschte Produkt nicht erhalten werden konnte. Die Glasampulle wurde mit 10°C/h auf 230°C erhitzt, für 100 h dort gehalten, mit 1°C/h auf 130°C abgekühlt, dort nochmals für 62 h gehalten und anschließend mit 2°C/h auf Raumtemperatur abgekühlt.

## 5.2 $\text{Fe}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})$

### 5.2.1 Strukturbeschreibung

Das neue Eisenbenzoat bildet gelb-orange Nadeln und kristallisiert in der monoklinen Raumgruppe  $P 2_1/c$  (Nr. 14) mit den Gitterkonstanten  $a = 2105,0(3)$ ,  $b = 902,20(5)$ ,  $c = 2417,5(3)$  pm,  $\beta = 105,44(1)^\circ$ ,  $Z = 4$  und  $R_1 = 0,0398$  für  $I_0 > 2\sigma(I_0)$ .

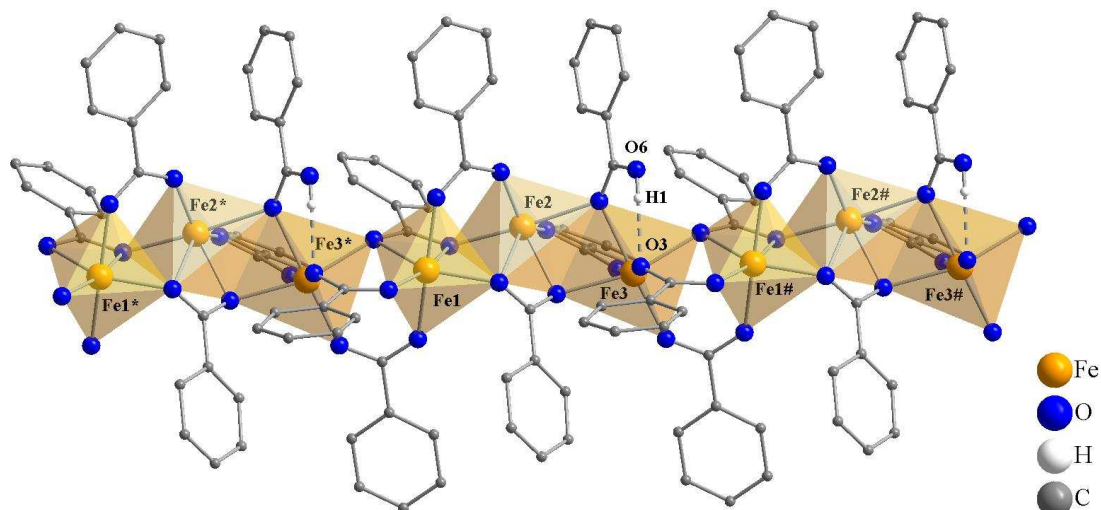


Abbildung 5.2.1: Projektion einer Kette in  $\text{Fe}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})$ .

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* =  $x; 1-y; z$ ; # =  $x; 1+y; z$ .

Die asymmetrische Einheit wird durch drei kristallographisch unabhängige Eisenatome aufgebaut, welche jeweils von sechs Sauerstoffatomen koordiniert werden und verzerrte Oktaeder ausbilden. Die Eisen-Sauerstoff-Bindungslängen variieren im Bereich von 198,6(2) bis 265,1(3) pm mit einem Mittelwert von  $\langle \text{Fe-O} \rangle = 215,5$  pm.

**Tabelle 5.2.1: Eisen-Sauerstoff-Bindungslängen in  $\text{Fe}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})$**

Atome	d [pm]	Atome	d [pm]	Atome	d [pm]
Fe(1)-O(2)	208,5(3)	Fe(2)-O(5)	229,6(2)	Fe(3)-O(1#)	202,2(2)
Fe(1)-O(4*)	202,5(3)	Fe(2)-O(7)	198,6(2)	Fe(3)-O(3)	213,8(3)
Fe(1)-O(9)	207,1(3)	Fe(2)-O(9)	265,1(3)	Fe(3)-O(5)	221,9(2)
Fe(1)-O(11)	211,8(2)	Fe(2)-O(10)	216,5(2)	Fe(3)-O(8)	203,8(3)
Fe(1)-O(13)	222,6(2)	Fe(2)-O(12)	197,9(3)	Fe(3)-O(10)	221,4(2)
Fe(1)-O(14)	226,1(2)	Fe(2)-O(14)	211,6(2)	Fe(3)-O(13#)	218,2(2)

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* =  $x; 1-y; z$ ; # =  $x; 1+y; z$ .

Die Metallatomabstände betragen für  $\text{Fe}(1)\text{-Fe}(2) = 335,90(7)$ ,  $\text{Fe}(1)\text{-Fe}(3^*) = 351,34(7)$  und  $\text{Fe}(2)\text{-Fe}(3) = 334,23(7)$  pm. Die unterschiedlichen Abstände kommen durch die verschiedenen Verknüpfungen der Koordinationspolyeder untereinander zustande. Die beiden kleineren Metallabstände liegen einer *cis*-ständigen Kantenverknüpfung des  $\text{Fe}(2)$ -Oktaeders zugrunde. Dies führt zur Ausbildung von Trimeren, welche über endständige Eckenverknüpfung Ketten entlang  $[010]$  ausbilden. Diese Eckenverknüpfung führt erwartungsgemäß zu einem größeren Abstand zwischen den Metallatomen. Die Ketten arrangieren sich entlang  $[010]$  zu einer  $[4+4]$  Anordnung.

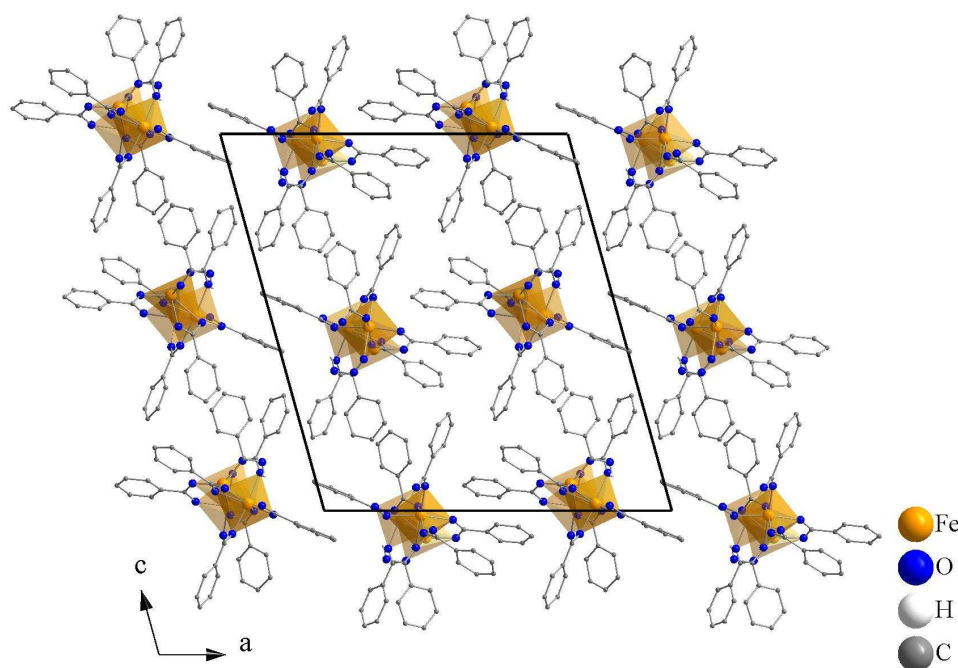


Abbildung 5.2.2: Projektion der Kristallstruktur von  $\text{Fe}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})$  entlang  $[010]$ .

Die drei Eisenatome werden von vier zweizählig verbrückenden ( $\mu_2: \eta^1 - \eta^1$ ) und zwei vierzählig verbrückend-chelatisierenden ( $\mu_3: \eta^2 - \eta^2$ ) Benzoatliganden umgeben. Drei Sauerstoffatome der vierzähligen Liganden sind an den Kantenverknüpfungen beteiligt, wohingegen das letzte Sauerstoffatom die Eckenverknüpfung ausbildet. Jenes Sauerstoffatom, welches die Kantenverknüpfung realisiert, stellt das Benzoessäuremolekül mit dem Carbonyl-Sauerstoffatom ( $\mu_2: \eta^2$ ). Das Wasserstoffatom der Hydroxylgruppe bildet zum Sauerstoffatom eines benachbarten Benzoations eine Wasserstoffbrückenbindung aus. Der Winkel der beteiligten Atome beträgt  $\text{O}(3)\text{-H}(1)\text{-O}(6) = 166,0(2)^\circ$ . Da die Wasserstoffatome nicht frei verfeinert wurden, wird der Abstand der beteiligten Sauerstoffatome angegeben. Dieser beträgt hier  $\text{O}(3)\text{-O}(6) = 269,5(4)$  pm.

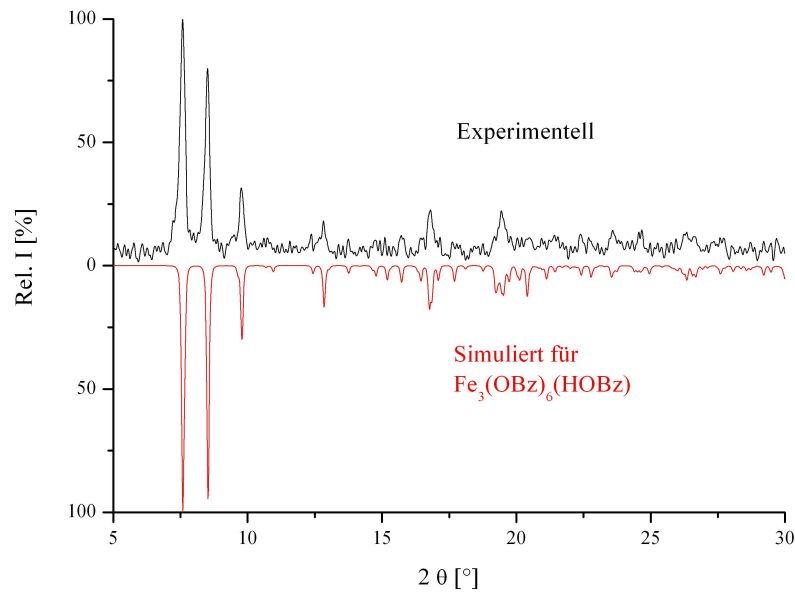


Abbildung 5.2.3: Pulverdiffraktogramm von  $\text{Fe}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})$ .

Die gemessenen Daten des Pulverdiffraktogramms zeigen eine gute Übereinstimmung mit den simulierten Daten, so dass das thermische Zersetzungsverhalten bestimmt werden konnte. Die Messungen der magnetischen Eigenschaften und des Mößbauer-Spektrums stehen noch aus.

Bei einigen Ansätzen entstand neben  $\text{Fe}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})$  auch  $\text{Fe}(\text{OBz})_2$ <sup>[26]</sup>, welches im Pulverdiffraktogramm nachgewiesen werden konnte. Daher wurden Versuchsreihen mit variierenden molaren Einwaagen und Temperaturen durchgeführt. Vorteilhaft erwies sich die Verwendung eines geringeren Anteils an Benzoesäure, wohingegen  $\text{Fe}(\text{OBz})_2$ <sup>[26]</sup> immer mit einem Überschuss der Säure erhalten wurde.

**Tabelle 5.2.2: Kristallographische Daten für Fe<sub>3</sub>(OBz)<sub>6</sub>(HOBz)**

Summenformel	C <sub>49</sub> Fe <sub>3</sub> H <sub>36</sub> O <sub>14</sub>	
Molmasse	1016,33 g/mol	
Messtemperatur	293(2) K	
Messgerät	STOE IPDS II	
Verwendete Strahlung	0,71073 Å (Mo-K <sub>α1</sub> )	
Kristallsystem, Raumgruppe	monoklin, <i>P</i> 2 <sub>1</sub> <i>c</i> (Nr. 14)	
Gitterkonstanten	a = 2150,0(3) pm	α = 90°
	b = 902,20(5) pm	β = 105,44(1)°
	c = 2417,5(3) pm	γ = 90°
Zellvolumen	4520,1(7) · 10 <sup>6</sup> pm <sup>3</sup>	
Z	4	
Berechnete Dichte	1,493 g/cm <sup>3</sup>	
Absorptionskorrektur	numerisch	
Absorptionskoeffizient	1,019 mm <sup>-1</sup>	
F(000)	2080	
Messbereich	1,75° bis 27,33°	
Index-Bereich	-27 ≤ h ≤ 27, -11 ≤ k ≤ 10, -31 ≤ l ≤ 31	
Zahl der gemessenen Reflexe	53241	
davon symmetrieunabhängig	10124	
Beobachtete Reflexe [I <sub>0</sub> > 2σ(I)]	4918	
Verfeinerungsmethode	SIR92 <sup>[46]</sup> und SHELXL97 <sup>[47]</sup>	
Daten / Parameter	10124 / 598	
R <sub>int</sub>	0,0777	
Goof	0,824	
R Werte [I <sub>0</sub> > 2σ(I)]	R <sub>1</sub> = 0,0398; wR <sub>2</sub> = 0,0879	
R Werte (alle Daten)	R <sub>1all</sub> = 0,1013; wR <sub>2all</sub> = 0,1072	
Restelektronendichte	0,39 und -0,79 10 <sup>6</sup> e·pm <sup>-3</sup>	

## 5.2.2 Thermisches Verhalten

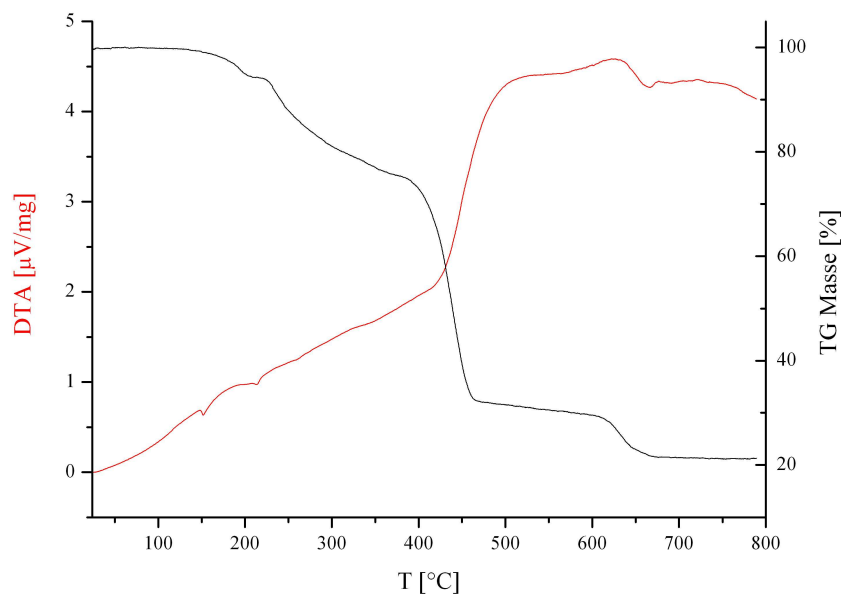


Abbildung 5.2.4: DTA/TG-Messung von Fe<sub>3</sub>(OBz)<sub>6</sub>(HOBz).

Die DTA/TG-Messung zeigt einen mehrstufigen Zersetzungsprozess. Bei einer Temperatur von 152°C deutet eine geringe endotherme Reaktion auf den Schmelzpunkt der Substanz hin. Unter exothermen Bedingungen zersetzt sich die Eisenverbindung bis zu einer Temperatur von 365°C mit einem Massenverlust von 23,5% unter Abgabe von zwei Benzoatmolekülen. Außerdem ist zuvor ein leicht endothermer Massenverlust von 5,8% bei 213°C zu erkennen, der jedoch nicht sicher zugeordnet werden kann. Bis zu einer Temperatur von 461°C erfolgt ein weiterer exothermer Prozess mit einem Massenverlust von 43,4% unter Abgabe eines Benzoat- und drei Benzaldehydmolekülen. Der letzte Zersetzungsschritt folgt endotherm von 611-665°C. Der Massenverlust von 12% entspricht der Abgabe des letzten Benzoatanions. Die verbleibende Masse von 215,3 g/mol spricht für das Vorliegen von drei Formeleinheiten des Eisen(II)-oxides FeO.

### Experimentelles

22,3 mg (0,4 mmol) Eisenpulver und 146,5 mg (1,2 mmol) Benzoesäure wurden in eine 15 cm lange Duranglasampulle mit einem Innendurchmesser von 12 mm gefüllt und unter Vakuum abgeschmolzen. Die Glasampulle wurde mit 10°C/h auf 230°C erhitzt, für 100 h dort gehalten, mit 1°C/h auf 130°C abgekühlt, dort nochmals für 62 h gehalten und anschließend mit 2°C/h auf Raumtemperatur abgekühlt.

### 5.3 $\text{Ni}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})_4$

Das Nickelbenzoat kristallisiert in quaderförmigen, grünen Kristallen in der triklinen Raumgruppe  $P\bar{1}$  (Nr. 2) mit den Gitterkonstanten  $a = 1155,4(2)$ ,  $b = 1205,1(2)$ ,  $c = 2353,4(3)$  pm,  $\alpha = 88,25(2)^\circ$ ,  $\beta = 86,88(2)^\circ$ ,  $\gamma = 78,21(2)^\circ$ ,  $Z = 2$  mit  $R_1 = 0,0521$  für  $I_0 > 2\sigma(I_0)$ . Die Struktur wird von vier kristallographisch unabhängigen Nickelatomen aufgebaut, von denen zwei auf einer einzähligen speziellen Lage sitzen. Diese haben zwei durch Symmetrieoperationen gleiche benachbarte Nickelatome. Somit bilden sich zwei Trimere aus, welche verdreht zueinander in der Elementarzelle vorliegen.

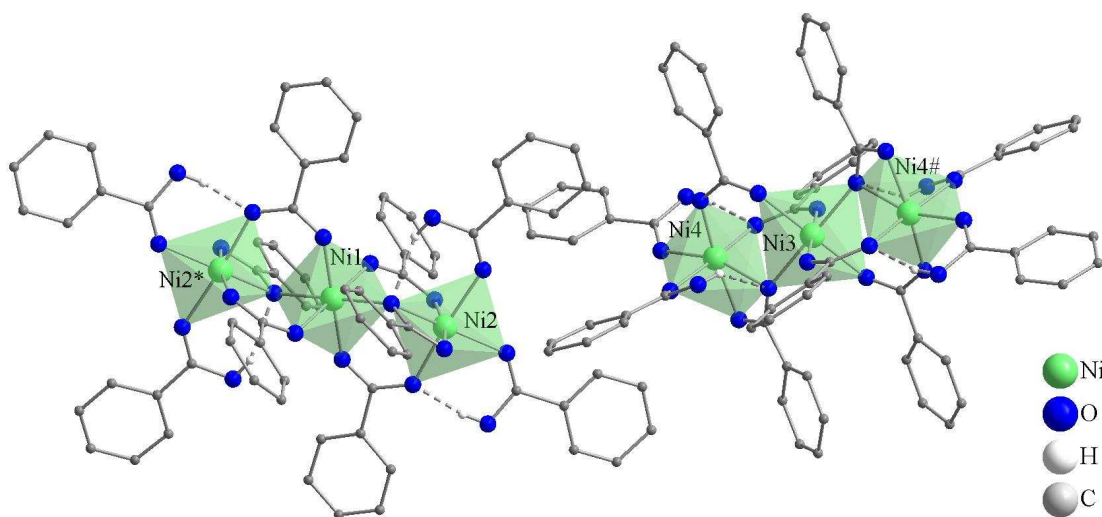


Abbildung 5.3.1: Koordinationssphären der Nickelatome in  $\text{Ni}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})_4$ .

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* =  $1-x, 1-y, 1-z$ ; # =  $-x, -y, 2-z$ .

Die zwei Trimere sind nahezu identisch und unterscheiden sich nur geringfügig in ihren Bindungslängen und Bindungswinkeln (siehe Tabelle 5.3.2). Die Beschreibung der Koordinationssphären beschränkt sich daher im folgenden Text nur auf eines der Trimere. Die drei Nickelatome werden von vier zweizählig verbrückenden ( $\mu_2: \eta^1 - \eta^1$ ) und zwei dreizählig, verbrückend-chelatisierenden ( $\mu_2: \eta^1 - \eta^2$ ) Benzoatanionen umgeben. Zusätzlich werden sie von vier einzähligen Benzoessäuremolekülen ( $\mu_1$ ) koordiniert. Die Wasserstoffatome der Hydroxylgruppen bilden Wasserstoffbrückenbindungen zu benachbarten Sauerstoffatomen der Benzoate aus.

**Tabelle 5.3.1: Winkel und Abstände der Wasserstoffbrückenbindungen in  $\text{Ni}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})_4$**

Winkel		Abstände	
O(7)-H(1)-O(5)	139,93(3)°	O(5)-O(7)	281,4(4) pm
O(10)-H(2)-O(1*)	169,91(2)°	O(1*)-O(10)	255,37(4) pm
O(11)-H(8)-O(19)	165,69(2)°	O(11)-O(19)	258,6(4) pm
O(14)-H(9)-O(16#)	143,06(2)°	O(14)-O(16#)	297,21(6) pm

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* = 1-x, 1-y, 1-z; # = -x, -y, 2-z.

Die drei Nickelatome werden von je sechs Sauerstoffatomen zu verzerrten Oktaedern koordiniert, die über gegenüberliegende Ecken zu den Trimeren verknüpft sind.

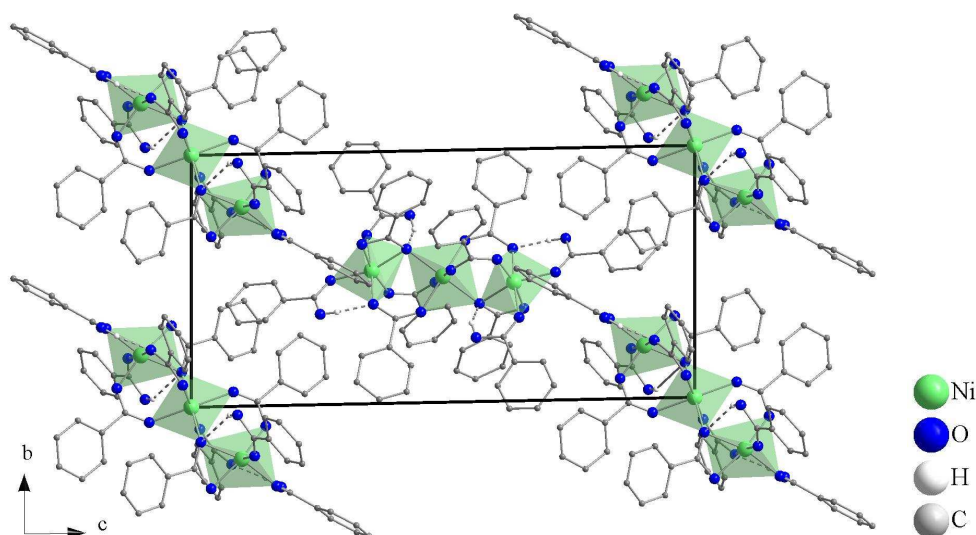


Abbildung 5.3.2: Projektion der Kristallstruktur von  $\text{Ni}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})_4$  entlang [100].

**Tabelle 5.3.2: Nickel-Sauerstoff-Bindungslängen in  $\text{Ni}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})_4$**

Atome	d [pm]	Atome	d [pm]	Atome	d [pm]
Ni(1)-O(2) (2x)	204,0(5)	Ni(2)-O(1*)	202,5(5)	Ni(4)-O(12)	206,6(5)
Ni(1)-O(3) (2x)	204,9(4)	Ni(2)-O(4)	196,4(5)	Ni(4)-O(13)	206,0(5)
Ni(1)-O(5) (2x)	212,6(5)	Ni(2)-O(5)	213,7(4)	Ni(4)-O(15)	206,8(5)
Ni(3)-O(16) (2x)	211,7(5)	Ni(2)-O(6)	209,7(5)	Ni(4)-O(16#)	215,0(5)
Ni(3)-O(18) (2x)	209,6(5)	Ni(2)-O(8)	210,7(5)	Ni(4)-O(17)	195,6(6)
Ni(3)-O(20) (2x)	202,3(5)	Ni(2)-O(9)	207,2(5)	Ni(4)-O(19)	202,1(5)

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* = 1-x, 1-y, 1-z; # = -x, -y, 2-z.



Die Nickel-Nickel-Abstände betragen: Ni(1)-Ni2(2) = 344,83(5) pm beziehungsweise Ni(3)-Ni(4) = 344,34(5) pm. Die Nickel-Sauerstoff-Bindungslängen variieren in einem Bereich von 202,1(5) bis 215,0(5) pm und betragen im Mittel  $\langle \text{Ni-O} \rangle = 206,77$  pm.

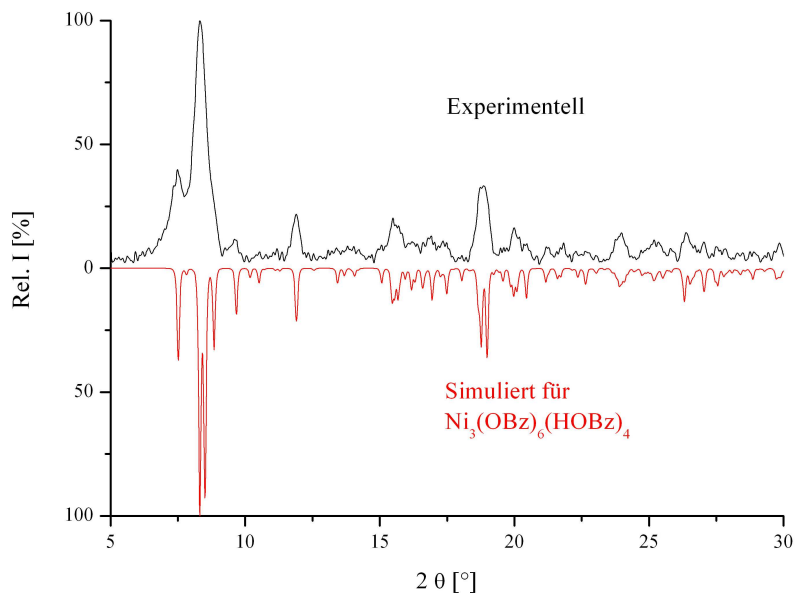


Abbildung 5.3.3: Pulverdiffraktogramm von  $\text{Ni}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})_4$ .

Auch wenn das experimentell bestimmte Pulverdiffraktogramm keine scharfen Reflexe aufweist, lässt sich doch eine generelle Übereinstimmung mit den simulierten Daten zeigen. Die Verbindung fiel bisher hauptsächlich in mikrokristalliner Form mit sehr wenig Einkristallen in geringer Ausbeute an.

### Experimentelles

23,5 mg (0,4 mmol) Nickelpulver und 171,0 mg (1,4 mmol) Benzoesäure wurden in eine 10 cm lange Duranglasampulle mit einem Innendurchmesser von 10 mm gefüllt und unter Vakuum verschlossen. Die Glasampulle wurde mit 10°C/h auf 230°C aufgeheizt, für 100 h dort gehalten, mit 1°C/h auf 130°C abgekühlt, dort nochmals für 62 h gehalten und anschließend mit 2°C/h auf Raumtemperatur abgekühlt.

**Tabelle 5.3.3: Kristallographische Daten für Ni<sub>3</sub>(OBz)<sub>6</sub>(HOBz)<sub>4</sub>**

Summenformel	C <sub>70</sub> H <sub>54</sub> Ni <sub>3</sub> O <sub>20</sub>	
Molmasse	1391,26 g/mol	
Messtemperatur	293(2) K	
Messgerät	STOE IPDS I	
Verwendete Strahlung	0,71073 Å (Mo-K <sub>α1</sub> )	
Kristallsystem, Raumgruppe	triklin, <i>P</i> $\bar{1}$ (Nr. 2)	
Gitterkonstanten	a = 1155,4(2) pm	$\alpha = 88,25(2)^\circ$
	b = 1205,1(2) pm	$\beta = 86,88(2)^\circ$
	c = 2353,4(3) pm	$\gamma = 78,21(2)^\circ$
Zellvolumen	3202,4(7) · 10 <sup>6</sup> pm <sup>3</sup>	
Z	2	
Berechnete Dichte	1,443 g/cm <sup>3</sup>	
Absorptionskorrektur	numerisch	
Absorptionskoeffizient	0,949 mm <sup>-1</sup>	
F(000)	1436	
Messbereich	1,35° bis 25,00°	
Index-Bereich	-13 ≤ h ≤ 13, -14 ≤ k ≤ 14, -27 ≤ l ≤ 27	
Zahl der gemessenen Reflexe	28634	
davon symmetrieunabhängig	10626	
Beobachtete Reflexe [I <sub>0</sub> > 2σ(I)]	3491	
Verfeinerungsmethode	SIR92 <sup>[46]</sup> und SHELXL97 <sup>[47]</sup>	
Daten / Parameter	10626 / 844	
R <sub>int</sub>	0,1479	
Goof	0,704	
R Werte [I <sub>0</sub> > 2σ(I)]	R <sub>1</sub> = 0,0522; wR <sub>2</sub> = 0,0689	
R Werte (alle Daten)	R <sub>1all</sub> = 0,1808; wR <sub>2all</sub> = 0,0923	
Restelektronendichte	0,368 und -0,068 10 <sup>6</sup> e·pm <sup>-3</sup>	

## 5.4 $M(\text{OBz})_3$ ( $M = \text{Tb}, \text{Dy}, \text{Dy}_x\text{Co}_{1-x}$ )

### 5.4.1 Strukturbeschreibung

Im Rahmen dieser Arbeit gelang die Synthese der isotypen Verbindungen  $\text{Tb}(\text{OBz})_3$ ,  $\text{Dy}(\text{OBz})_3$  und  $\text{Dy}_x\text{Co}_{1-x}(\text{OBz})_3$ . Diese neuen Benzoate sind isotyp zu dem bereits bekannten  $\text{Gd}(\text{OBz})_3$  <sup>[26]</sup> und kristallisieren in der monoklinen Raumgruppe  $P 2_1/n$  (Nr. 14), mit den in Tabelle 5.4.1 gezeigten Gitterkonstanten und  $Z = 4$ . Im Folgenden wird für die Strukturbeschreibung und die graphischen Darstellungen das Terbiumbenzoat verwendet.

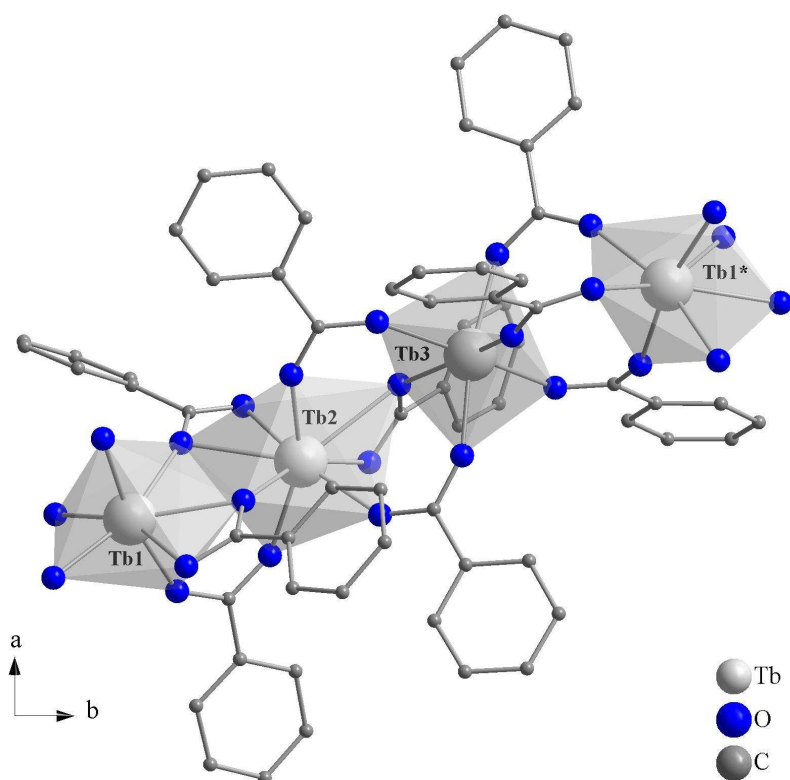


Abbildung 5.4.1: Koordinationssphäre der Terbiumatome in  $\text{Tb}(\text{OBz})_3$ .

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* =  $1,5-x, 0,5+y, 0,5-z$

**Tabelle 5.4.1: Gitterkonstanten für  $M(\text{OBz})_3$**

	$\text{Gd}(\text{OBz})_3$ <sup>[26]</sup>	$\text{Tb}(\text{OBz})_3$	$\text{Dy}(\text{OBz})_3$	$\text{Dy}_x\text{Co}_{1-x}(\text{OBz})_3$
a [pm]	1146,9(5)	1146,0(2)	1143,7(1)	11,37,71(7)
b [pm]	2261,5(4)	2258,3(2)	2257,1(2)	2248,2(1)
c [pm]	2278,9(2)	2279,8(3)	2283,8(3)	2247,3(2)
$\beta$ [°]	95,29(1)	95,41(1)	95,17(1)	95,554(5)
$R_1$ für $I_0 > 2\sigma(I_0)$	0,0370	0,0381	0,0535	0,1164

Die asymmetrische Einheit der Benzoate  $M(\text{OBz})_3$  wird von drei kristallographisch unabhängigen Metallatomen aufgebaut, welche von drei dreizählig verbrückend-chelatisierenden ( $\mu_2: \eta^1 - \eta^2$ ) und sechs zweizählig verbrückenden ( $\mu_2: \eta^1 - \eta^1$ ) Benzoatliganden koordiniert sind. Das Terbium(1)-atom wird von sieben Sauerstoffatomen zu einer verzerrten pentagonalen Bipyramide koordiniert, wohingegen das Terbium(2)-atom achtfach zu einem verzerrten quadratisch-planaren Antiprisma und das Terbium(3)-atom sechsfach zu einem verzerrten Oktaeder koordiniert werden. Die Polyeder um Tb(1) und Tb(2) sind über eine Kante miteinander verknüpft, und das Tb(2)-Polyeder ist mit dem Tb(3)-Oktaeder über eine Ecke verknüpft. Somit bilden sich Trimere aus, welche über drei der zweizählig verbrückenden Benzoat-Ionen zu helikalen Ketten entlang [010] verknüpft werden.

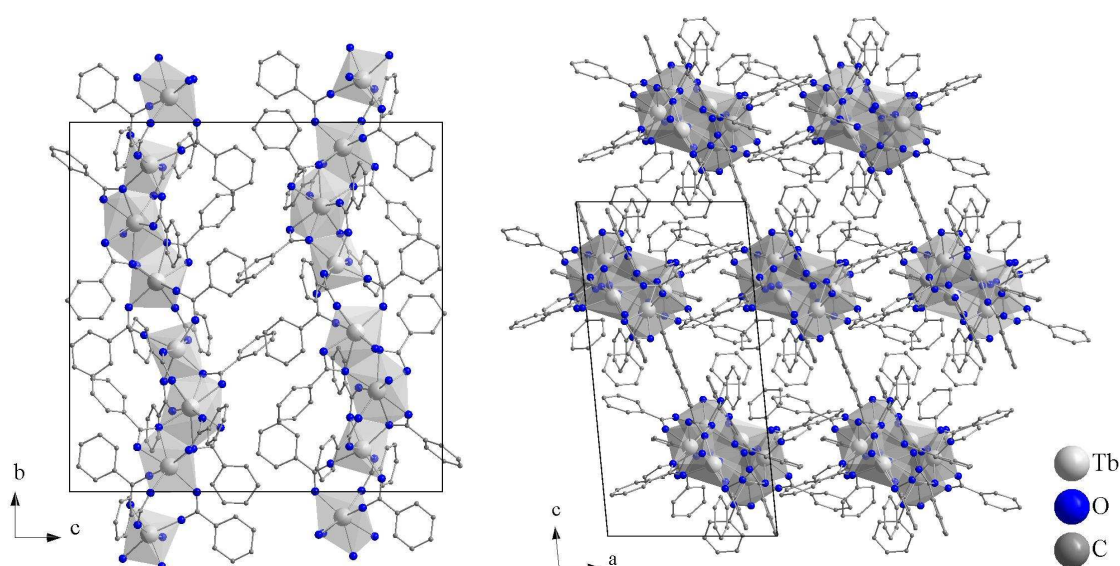


Abbildung 5.4.2: Projektion der Kristallstruktur von  $\text{Tb}(\text{OBz})_3$  entlang [100] und [010].

Die Winkel zwischen den Metallatomen der vier isotypen Benzoate unterscheiden sich kaum.

**Tabelle 5.4.2: Winkel zwischen den Metallatomen in  $M(\text{OBz})_3$**

Winkel [°]	M = Gd <sup>[26]</sup>	M = Tb	M = Dy	M = Dy <sub>x</sub> Co <sub>1-x</sub>
M(1)-M(2)-M(3)	145,69(1)	145,33(2)	145,32(2)	145,21(2)
M(2)-M(1)-M(3#)	143,49(1)	143,63(1)	143,52(2)	142,70(2)
M(2)-M(3)-M(1*)	167,78(1)	167,77(1)	167,93(2)	168,26(2)

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* = 1,5-x, 0,5+y, 0,5-z; # = 1,5-x, -0,5+y, 0,5-z

Die Abstände der Metallatome über die Kantenverknüpfung nehmen, wie erwartet, mit kleiner werdenden Ionenradien ab <sup>[69]</sup>. Entlang der Verbrückung der Trimere untereinander werden die Abstände größer. Über die Eckenverknüpfung variieren die Abstände nur im Bereich weniger pm.

**Tabelle 5.4.3: Metall-Metall-Abstände in M(OBz)<sub>3</sub>**

Abstände [pm]	M = Gd <sup>[26]</sup>	M = Tb	M = Dy	M = Dy <sub>x</sub> Co <sub>1-x</sub>
M(1)-M(2)	399,61(4)	397,88(6)	396,06(9)	394,63(9)
M(1)-M(3#)	457,17(4)	459,23(7)	459,05(8)	460,9(1)
M(2)-M(3)	435,43(4)	434,82(6)	435,23(8)	433,46(9)

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* = # = 1,5-x, -0,5+y, 0,5-z

Die mittleren Metall-Sauerstoff-Bindungslängen variieren im Bereich von  $\langle \text{Gd-O} \rangle = 235,8$  pm,  $\langle \text{Tb-O} \rangle = 233,2$  pm,  $\langle \text{Dy-O} \rangle = 231,6$  pm und für das statistisch besetzte  $\langle \text{Dy}_x\text{Co}_{1-x}\text{-O} \rangle = 231,9$  pm. Auch hier lässt sich der Trend zu kürzeren Bindungen mit abnehmendem Ionenradius erkennen. Die kürzeren Abstände der einzelnen Verbindungen werden von ( $\mu_2: \eta^1 - \eta^1$ )-Sauerstoffatomen geprägt, wohingegen die längeren Abstände den dreifach koordinierenden ( $\mu_2: \eta^2 - \eta^1$ ) Sauerstoffatomen zugeordnet werden können (für nähere Details siehe Appendix 10.9-10.11).

Als auffällig erscheinen hier die Atomabstände und kristallographischen Daten des Dysprosium/Kobalt Mischkristalls. Die mittleren Metall-Sauerstoff-Bindungslängen der bimetalischen Verbindung unterscheiden sich kaum von denen des Dysprosiumbenzoats. Aufgrund dessen ist auch der Metall-Metall-Abstand der beiden Atome über die Kantenverknüpfung sehr ähnlich zu dem der Dysprosiumverbindung. Vergleicht man die Abstände mit dem bekannten  $\text{Co(OBz)}_2$  <sup>[80]</sup>, in dem der mittlere Kobalt-Sauerstoff-Abstand  $\langle \text{Co-O} \rangle = 210,0$  pm beträgt, und vergleicht die sich kaum unterscheidenden Zellparameter, so lässt sich daraus schließen, dass es sich bei der hier erhaltenen Verbindung eher um ein Dysprosiumbenzoat mit einer statistischen Fehlordnung der Atome handelt, indem die Dysprosiumlagen teilweise durch Kobaltatome besetzt sind. Die Struktur lässt sich allerdings nicht unter dieser Annahme mit annehmbaren Gütefaktoren verfeinern. Während die Verbindungen  $\text{Dy(OBz)}_3$  und  $\text{Tb(OBz)}_3$  quaderförmige, farblose Kristalle ausbilden, findet man für die bimetalische Komponente hellblaue, quaderförmige Einkristalle, wohingegen das bekannte  $\text{Co(OBz)}_2$  <sup>[80]</sup> violette Nadeln ausbildet.

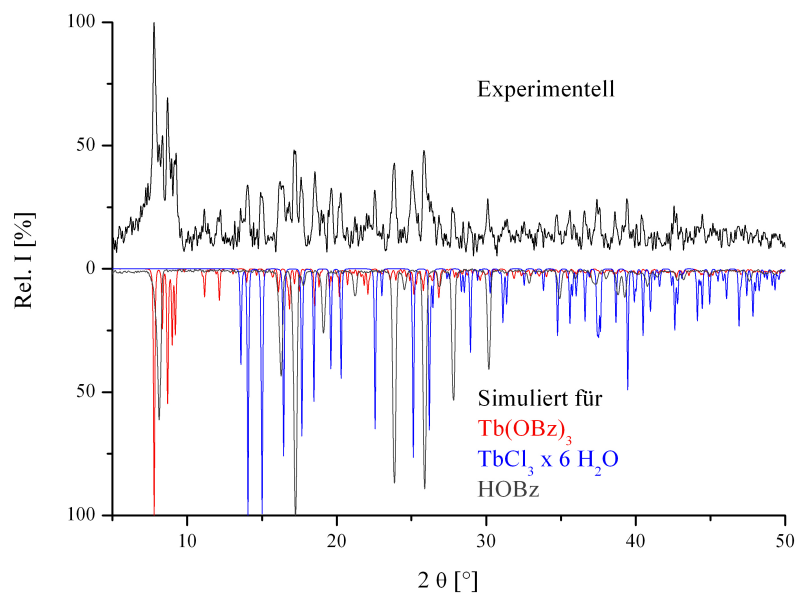


Abbildung 5.4.3: Pulverdiffraktogramm von Tb(OBz)<sub>3</sub>.

Das Terbiumbenzoat wurde bei der Umsetzung des Terbiunchlorids mit Benzoesäure erhalten. Im experimentell bestimmten Pulverdiffraktogramm sind die Ausgangssubstanzen zusätzlich zu den Reflexlagen des neuen Benzoats zu erkennen. Bisher ist es nicht gelungen, die Verbindung phasenrein herzustellen bzw. sie zu selektieren, um weitere Messungen an der Substanz vorzunehmen.

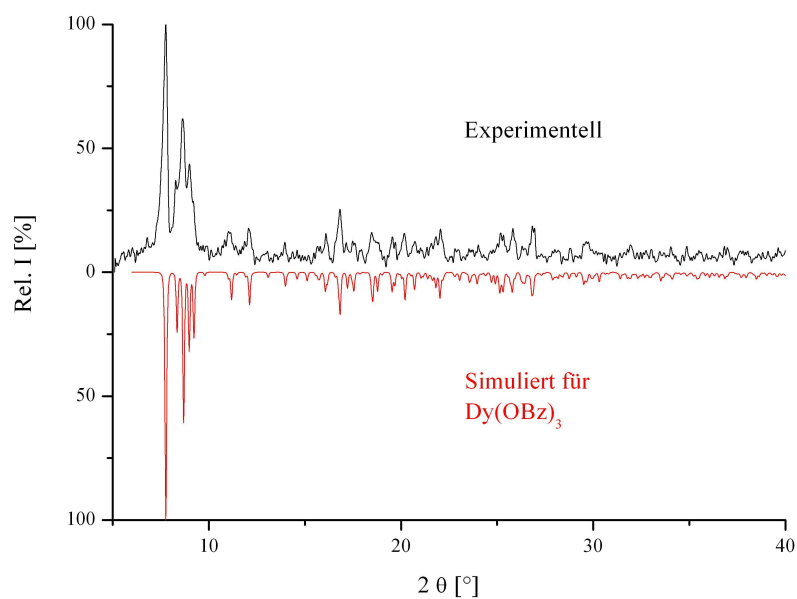


Abbildung 5.4.4: Pulverdiffraktogramm von Dy(OBz)<sub>3</sub>.

Das Pulverdiffraktogramm des Dysprosiumbenzoats zeigt eine gute Übereinstimmung mit den simulierten Daten, so dass es hier möglich war, einige physikalische und optische Eigenschaften der Verbindung zu bestimmen.

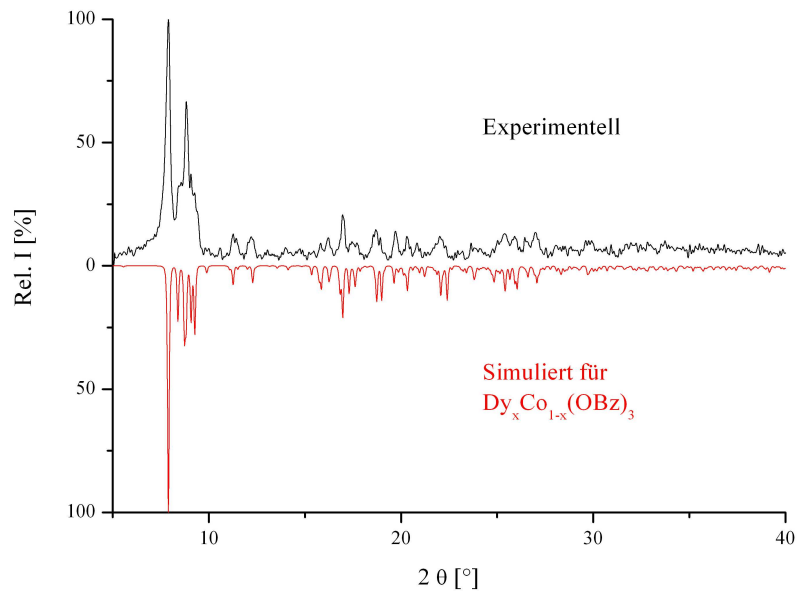


Abbildung 5.4.5: Pulverdiffraktogramm von  $\text{Dy}_x\text{Co}_{1-x}(\text{OBz})_3$ .

Bei der Mischkristallverbindung war es möglich, die hellblauen Kristalle aus dem Produktgemisch zu selektieren und somit ein Diffraktogramm einer nahezu phasenreinen Verbindung zu erhalten. Die Reflexlagen befinden sich außerdem auf der gleichen Position des simulierten Diffraktogramms der reinen Dysprosiumbenzoat-Verbindung. Es konnte jedoch nicht genug Substanz selektiert werden, um weitere Messungen an der Verbindung durchführen zu können. Allerdings konnte anhand eines Einkristalls das energiedispersive Röntgenspektrum (EDX) gemessen werden.

**Tabelle 5.4.4: Kristallographische Daten für M(OBz)<sub>3</sub>**

Verbindung	Tb(OBz) <sub>3</sub>	Dy(OBz) <sub>3</sub>	Dy <sub>x</sub> Co <sub>1-x</sub> (OBz) <sub>3</sub>
Summenformel	Tb <sub>3</sub> O <sub>18</sub> C <sub>63</sub> H <sub>45</sub>	Dy <sub>3</sub> O <sub>18</sub> C <sub>63</sub> H <sub>45</sub>	(Dy <sub>x</sub> Co <sub>1-x</sub> ) <sub>3</sub> O <sub>18</sub> C <sub>63</sub> H <sub>45</sub>
Molmasse	1566,75 g/mol	1565,48 g/mol	1266,78 g/mol (für Co)
Messtemperatur	293(2) K	293(2) K	173(2) K
Messgerät	STOE IPDS II	STOE IPDS II	STOE IPDS II
Verwendete Strahlung	0,71073 Å (Mo-K <sub>α1</sub> )	0,71073 Å (Mo-K <sub>α1</sub> )	0,71073 Å (Mo-K <sub>α1</sub> )
Kristallsystem	monoklin	monoklin	monoklin
Raumgruppe	<i>P</i> 2 <sub>1</sub> / <i>n</i> (Nr. 14)	<i>P</i> 2 <sub>1</sub> / <i>n</i> (Nr. 14)	<i>P</i> 2 <sub>1</sub> / <i>n</i> (Nr. 14)
Gitterkonstanten	a = 1146,0(2) pm b = 2258,3(2) pm c = 2279,8(3) pm β = 95,41(1)°	a = 1143,7(1) pm b = 2257,1(2) pm c = 2283,8(3) pm β = 95,17(1)°	a = 1137,71(7)pm b = 2248,2(1)pm c = 2247,3(2)pm β = 95,55(1)°
Zellvolumen	5873(1) · 10 <sup>6</sup> pm <sup>3</sup>	5871,5(1) · 10 <sup>6</sup> pm <sup>3</sup>	5720,9(6) · 10 <sup>6</sup> pm <sup>3</sup>
Z	4	4	4
Berechnete Dichte	1,772 g/cm <sup>3</sup>	1,771 g/cm <sup>3</sup>	1,471 g/cm <sup>3</sup>
Absorptionskorrektur	numerisch	numerisch	numerisch
Absorptionskoeffizient	3,646 mm <sup>-1</sup>	3,851 mm <sup>-1</sup>	0,935 mm <sup>-1</sup>
F(000)	3048	3036	2592
Messbereich	1,79° bis 27,34°	1,27° bis 25,24°	1,81° bis 27,35°
Index-Bereich	-14 ≤ h ≤ 14, -27 ≤ k ≤ 28 -29 ≤ l ≤ 29	-13 ≤ h ≤ 13, -26 ≤ k ≤ 26 -27 ≤ l ≤ 26	-14 ≤ h ≤ 14 -26 ≤ k ≤ 28 -28 ≤ l ≤ 28
Gemessenen Reflexe	50262	72433	89443
davon	13036	10462	12765
symmetrieunabhängig			
Beobachtete Reflexe	5111	3877	9815
[I <sub>0</sub> > 2σ(I)]			
Strukturlösung	SIR92 <sup>[46]</sup>	SIR92 <sup>[46]</sup>	SIR92 <sup>[46]</sup>
Verfeinerungsmethode	SHELXL97 <sup>[47]</sup>	SHELXL97 <sup>[47]</sup>	SHELXL97 <sup>[47]</sup>
Daten / Parameter	13036 / 759	10462 / 759	12765 / 759
R <sub>int</sub>	0,1300	0,2544	0,0545
Goof	0,642	0,647	1,362
R <sub>1</sub> [I <sub>0</sub> > 2σ(I)]	0,0381	0,0438	0,1164
wR <sub>2</sub> [I <sub>0</sub> > 2σ(I)]	0,0427	0,0535	0,2973
R <sub>1all</sub>	0,1492	0,1650	0,1319
wR <sub>2all</sub>	0,0601	0,0761	0,3166
Restelektronendichte	0,810 / -1,198 10 <sup>6</sup> e·pm <sup>-3</sup>	0,751 / -0,828 10 <sup>6</sup> e·pm <sup>-3</sup>	4,875 / -1,172 10 <sup>6</sup> e·pm <sup>-3</sup>



### 5.4.2 Magnetisches Verhalten von $\text{Dy}(\text{OBz})_3$

Das magnetische Verhalten des Dysprosiumbenzoats wurde in Abhängigkeit von der Temperatur untersucht; bei 3 bis 390 K und einem äußeren magnetischen Feld von 0,1 T. In Abbildung 5.4.6 zeigt die reziproke Suszeptibilität  $\chi^{-1}$  über den ganzen gemessenen Temperaturbereich ein lineares Verhalten mit einer paramagnetischen Curie-Temperatur von  $\Theta_p = 0$  K. Es handelt sich bei dieser Verbindung um einen Paramagneten.

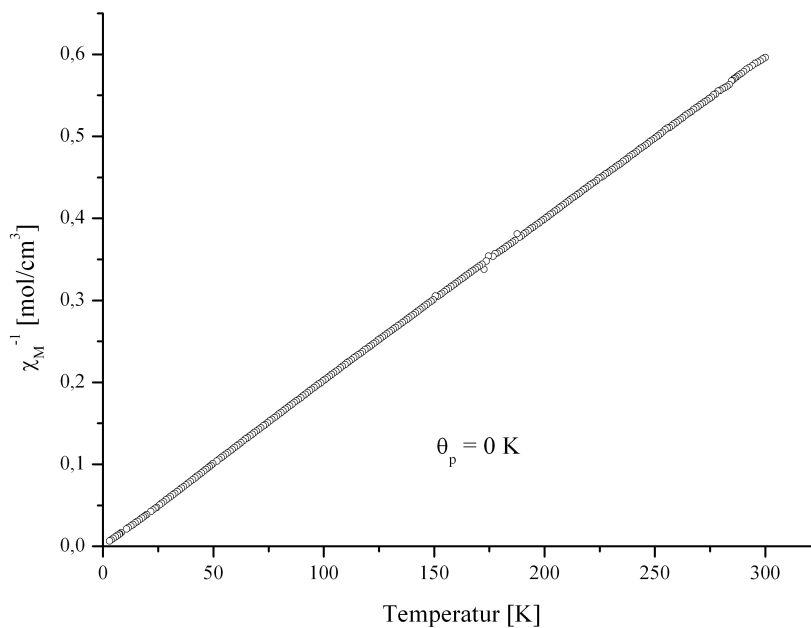


Abbildung 5.4.6: Die reziproke magnetische Suszeptibilität als Funktion der Temperatur von  $\text{Dy}(\text{OBz})_3$ .

Das experimentell bestimmte effektive magnetische Moment  $\mu_{\text{eff}} = 10,3 \mu_B$  stimmt gut mit dem berechneten Wert des magnetischen Moments für das  $\text{Dy}^{3+}$ -Kation mit  $\mu_{\text{eff}} = 10,6 \mu_B$  überein.

### 5.4.3 Thermisches Verhalten von $\text{Dy}(\text{OBz})_3$

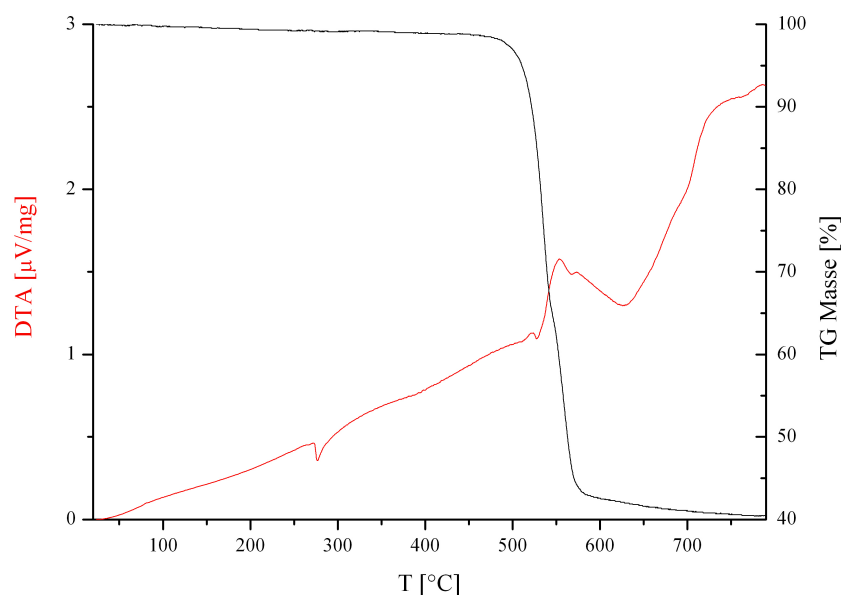
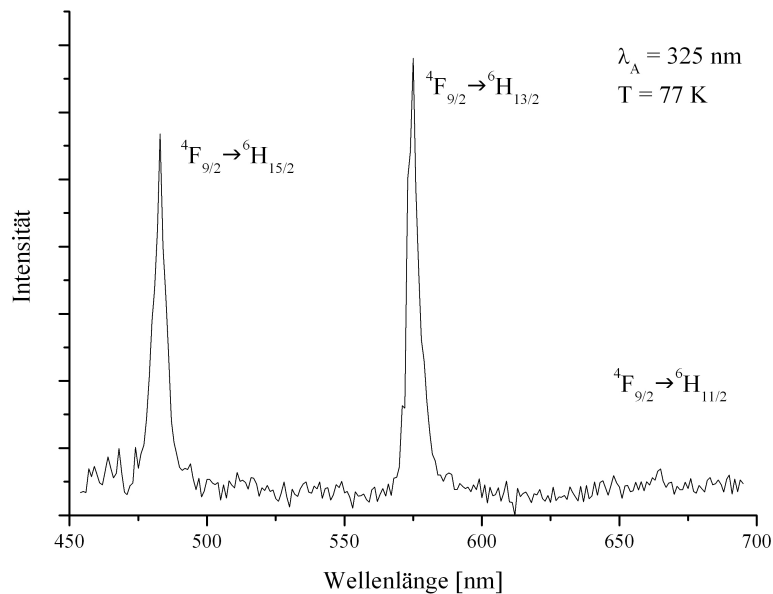


Abbildung 5.4.7: DTA/TG-Messung von  $\text{Dy}(\text{OBz})_3$ .

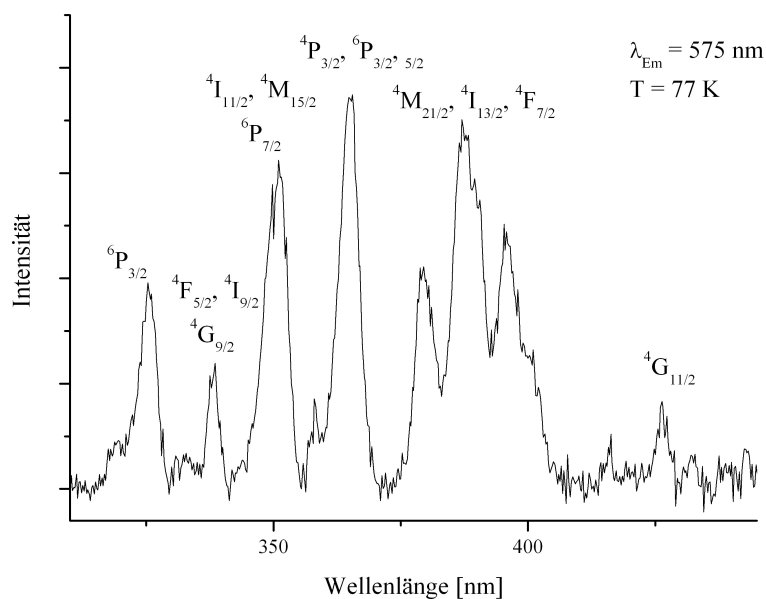
Die DTA/TG-Messung zeigt bei einer Temperatur von  $277^{\circ}\text{C}$  einen geringen endothermen Abfall der Energie, der auf den Schmelzpunkt der Substanz hindeutet. Unter exothermen Bedingungen zersetzt sich die Dysprosiumverbindung bei einer Temperatur von  $539,9^{\circ}\text{C}$  mit einem Massenverlust von 30,7% unter Abgabe von vier Benzoatliganden. Bis  $570^{\circ}\text{C}$  erfolgt eine weitere exotherme Zersetzung mit einem Massenverlust von 27,7% unter Abgabe von vier Benzaldehydmolekülen. Die restliche Masse von 656,2 g/mol (41,6%) spricht für das Vorliegen von  $\text{Dy}_3\text{O}_4(\text{OBz})$ . Hier wäre es interessant, eine weitere Messung bis zu höheren Temperaturen durchzuführen, um auch das letzte Benzoatanion abzuspalten und eventuell eine neue kristalline Phase eines Dysprosiumoxids zu erhalten.

### 5.4.4 Emissions-und Absorptionsverhalten von $\text{Dy}(\text{OBz})_3$

Mit Dysprosium(III)-Kationen dotierte lumineszierende Materialien haben erst kürzlich wegen ihres weißen Emissionspotentials Aufmerksamkeit auf sich gezogen<sup>[95]</sup>. Innerhalb der Lanthanide weist das Ion mit seiner  $4f^9$ -Konfiguration verschiedenste 4f-Energieniveaus auf, die eine große Auswahl an Übergängen erlauben. Dysprosium(III)-Ionen zeichnen sich durch ein klares Linienspektrum aus.

Abbildung 5.4.8: Emissionsspektrum von  $\text{Dy}(\text{OBz})_3$ .

Das Emissionsspektrum des Dysprosiumbenzoats wurde bei einer Temperatur von  $T = 77 \text{ K}$  und einer Anregungsenergie von  $\lambda_A = 325 \text{ nm}$  gemessen und zeigt zwei starke Emissionsübergänge. Die blaue Bande bei  $485 \text{ nm}$  entspricht dem Übergang des angeregten  ${}^4\text{F}_{9/2}$ -Zustandes in den  ${}^6\text{H}_{15/2}$ -Grundzustand und die gelbe Bande ist dem Übergang von dem  ${}^4\text{F}_{9/2}$ - in den  ${}^6\text{H}_{13/2}$ -Zustand zuzuschreiben. Der  ${}^4\text{F}_{9/2} \rightarrow {}^6\text{H}_{11/2}$ -Übergang bei circa  $650 \text{ nm}$  konnte nicht beobachtet werden.

Abbildung 5.4.9: Anregungsspektrum von  $\text{Dy}(\text{OBz})_3$ .

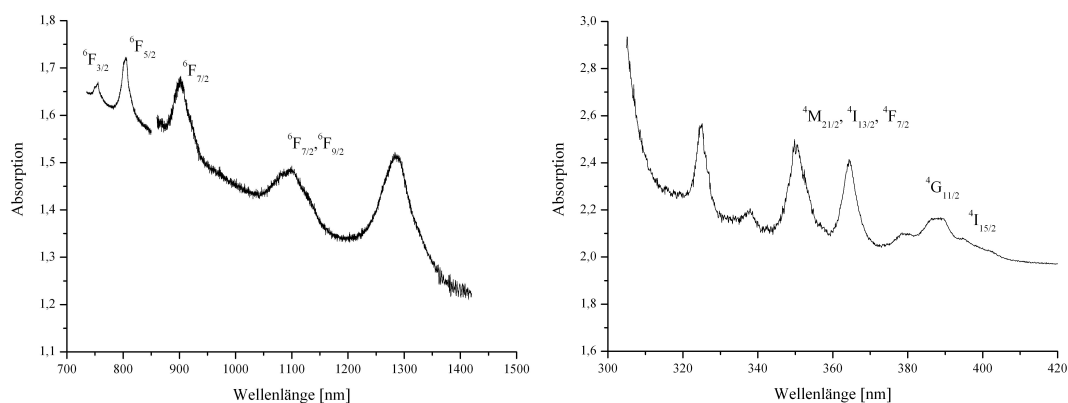


Abbildung 5.4.10: Absorptionsspektrum von  $\text{Dy}(\text{OBz})_3$ .

Das Anregungs- sowie das Absorptionsspektrum von  $\text{Dy}(\text{OBz})_3$  zeigen die Übergänge aus dem  ${}^6\text{H}_{15/2}$ -Grundzustand des Dysprosiumions in die angeregten Zustände. Die beiden Spektren zeigen die gleichen Charakteristika, welche andeuten, dass die Anregung in dem Bereich von 320-420 nm zu Lumineszenz führen.

#### 5.4.5 EDX-Messung von $\text{Dy}_x\text{Co}_{1-x}(\text{OBz})_3$

Die energiedispersive Röntgenspektroskopie von  $\text{Dy}_x\text{Co}_{1-x}(\text{OBz})_3$  bestätigt die Vermutung, dass es sich bei dieser Verbindung um eine statistische Einlagerung von Kobaltionen auf den Dysprosiumlagen handelt. Für die Metallatome der Verbindung ergab sich als prozentuales Verhältnis  $\text{Dy}:\text{Co} = 94,7:5,3$ . Dieses Ergebnis lässt sich mit der Röntgenstrukturanalyse jedoch nicht in Einklang bringen, da es dort erst gar nicht gelang, ein Verhältnis der Metallatome zueinander zu ermitteln.

#### 5.4.6 Experimentelles für $\text{M}(\text{OBz})_3$

##### **Tb(OBz)<sub>3</sub>**

Eine 10 cm lange Duranglasampulle mit einem Innendurchmesser von 10 mm wurde mit 74,6 mg (0,2 mmol)  $\text{TbCl}_3 \cdot 6 \text{H}_2\text{O}$  und 146,4 mg (1,2 mmol) Benzoesäure sowie 500,0 mg (3,73 mmol) 1,2,4,5-Tetramethylbenzol als Flussmittel befüllt und unter Vakuum verschlossen. Das Reaktionsgefäß wurde in einem Röhrenofen mit  $10^\circ\text{C}/\text{h}$  auf  $180^\circ\text{C}$  erhitzt, für 120 h dort gehalten, mit  $1^\circ\text{C}/\text{h}$  auf  $130^\circ\text{C}$  gekühlt, dort für weitere 48 h gehalten und mit  $5^\circ\text{C}/\text{h}$  auf Raumtemperatur abgekühlt.

**Dy(OBz)<sub>3</sub>**

Das Dysprosiumbenzoat konnte auf zwei verschiedenen Wegen synthetisiert werden. Eine 10 cm lange Duranglasampulle mit einem Innendurchmesser von 10 mm wurde mit 32,5 mg (0,2 mmol) Dysprosiumpulver und 122,1 mg (1,0 mmol) Benzoesäure unter inerten Bedingungen befüllt und unter Vakuum verschlossen. Das Reaktionsgefäß wurde in einem Röhrenofen mit 15°C/h auf 190°C erhitzt, für 80 h dort gehalten, mit 1°C/h auf 130°C/h gekühlt, dort für 48 h gehalten und mit 5°C/h wieder auf Raumtemperatur abgekühlt.

Desweiteren konnte die Verbindung durch Vereinigung der Lösungen von jeweils 750,0 mg (2,0 mmol) DyCl<sub>3</sub> · 6 H<sub>2</sub>O in 15 ml H<sub>2</sub>O und 860 mg (6,0 mmol) NaOBz in 15 ml H<sub>2</sub>O hergestellt werden. Das Dysprosiumbenzoat fiel als farbloser Niederschlag aus, wurde abfiltriert, mit kaltem Wasser gewaschen und bei 50°C getrocknet. Somit konnte die Verbindung auch in einem größeren Maßstab (Ausbeute = 85%) unter einfachen Bedingungen hergestellt werden.

**Dy<sub>x</sub>Co<sub>1-x</sub>(OBz)<sub>3</sub>**

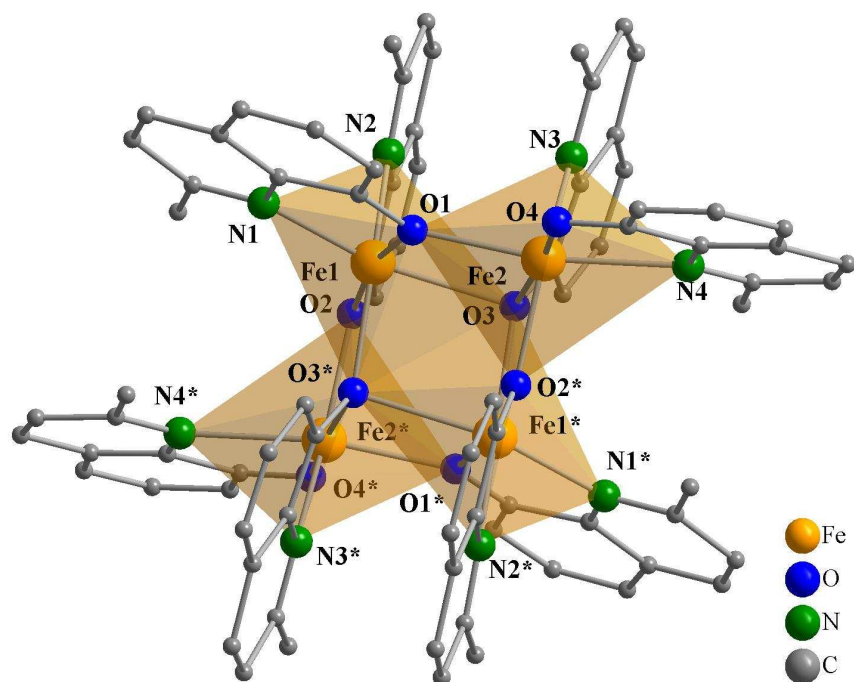
Eine 10 cm lange Duranglasampulle mit einem Innendurchmesser von 18 mm wurde mit 81,3 mg (0,5 mmol) Dysprosiumspänen, 29,5 mg (0,5 mmol) Kobaltpulver und 610,0 mg (5,0 mmol) Benzoesäure unter inerten Bedingungen befüllt und unter Vakuum verschlossen. Das Reaktionsgefäß wurde in einem Röhrenofen mit 5°C/h auf 230°C erhitzt, dort für 100 h gehalten, mit 2°C/h auf 130°C abgekühlt, dort für 62 h gehalten und mit 5°C/h wieder auf Raumtemperatur abgekühlt.

## 6 Eisen(II)-(8-hydroxychinaldinat)

8-Hydroxychinolin (HOQ), welches auch als Oxin bezeichnet wird, und seine Derivate wie das 2-Methyl-8-hydroxychinolin (HOMQ), oder 8-Hydroxychinaldin, sind in der Chemie schon lange bekannt. Das Oxin konnte in den frühen 1870ern erstmals synthetisiert werden und seit den späten 1920ern wurden die Verbindungen des Oxins und seiner Derivate umfangreich untersucht<sup>[96]</sup>. 8-Hydroxychinolin sowie 8-Hydroxychinaldin chelatisieren eine Reihe von Metallen. Die gebildeten Metall-Chelat-Komplexe weisen eine fünfgliedrige Ringkonformation auf<sup>[97]</sup>. Die Chinoline können entweder als phenolartige oder heterozyklische Amine aufgefasst werden, in denen der Sauerstoff als hartes Donoratom und der Stickstoff als weiches Donoratom fungieren. Trotz der langen Geschichte der Chinoline und deren Anwendung in der Gravimetrie, sind doch kaum Kristallstrukturen bekannt, da die Chinolate meist als röntgenamorphe Feststoffe anfallen. Die Synthese der meisten bekannten solvenshaltigen Chinolate erfolgte vorwiegend aus den einfachen Metallsalzen und der Säure in organischen Lösungsmitteln oder einem Alkalisalz der Säure in Wasser. Auf diesem Wege konnten die Verbindungen  $\text{Sc}(\text{OMQ})_3(\text{HOMQ})$  und  $\text{Sc}(\text{OMQ})_3$ <sup>[98]</sup>,  $\text{Fe}_2\text{O}(\text{OMQ})_4$ <sup>[99]</sup>,  $\text{Fe}(\text{OMQ})_3$ <sup>[100]</sup> und  $\text{M}(\text{OQ})_2$  mit  $\text{M} = \text{Ni}, \text{Cu}, \text{Zn}$ <sup>[101-103]</sup>, sowie die Verbindungen  $\text{Er}(\text{OQ})_3$ ,  $\text{Th}(\text{L})_4(\text{HL})$  und  $\text{Th}(\text{L})_4$  mit  $\text{L} = \text{OQ}$  und  $\text{OMQ}$ ,  $\text{UO}_2(\text{OMQ})_2(\text{HOMQ})$  sowie  $\text{UO}_2(\text{OMQ})_2$ <sup>[98, 104, 105]</sup> hergestellt werden.

Um weitere Verbindungen herzustellen, die lediglich den Liganden als Addukt in der Struktur aufweisen, ist man dazu übergegangen, die Chinolate direkt aus den Metallen und der Liebig-Säure oder im Falle der bimetalischen Verbindungen, ein Gemisch der zuvor gefällten Chinolate, oder eine Legierung wie  $\text{LaNi}_5$  mit dem Chinolin umzusetzen. Auf diesem Wege konnten  $\text{Ho}_3(\text{OQ})_9(\text{HOQ})$  sowie die bimetalischen Verbindungen  $\text{LaM}_2(\text{OQ})_7$  mit  $\text{M} = \text{Co}$  und  $\text{Ni}$ ,  $\text{SE}_2\text{Ca}(\text{OQ})_8$  mit  $\text{SE} = \text{Nd}$  und  $\text{Eu}$ , sowie  $\text{Nd}_2\text{Ca}(\text{OQ})_8(\text{HOQ})$  synthetisiert werden<sup>[23-25, 106]</sup>.

Bei der im Rahmen dieser Arbeit erhaltenen Verbindung handelt es sich um ein Eisen(II)-(2-methyl-8-hydroxychinolat),  $\text{Fe}(\text{OMQ})_2$ , welches in der triklinen Raumgruppe  $P\bar{1}$  mit den Gitterkonstanten  $a = 1209,0(3)$ ,  $b = 1278,8(3)$ ,  $c = 1307,7(3)$  pm,  $\alpha = 116,24(2)$ ,  $\beta = 104,28(2)$ ,  $\gamma = 100,06(2)^\circ$ ,  $Z = 2$  und  $R_1 = 0,0560$  für  $I_0 > 2\sigma(I_0)$  kristallisiert und dunkelrote, würfelartige Kristalle ausbildet. Dieses neue Chinolat wird von zwei kristallographisch unabhängigen Eisenatomen aufgebaut, welche jeweils von vier Sauerstoff- und zwei Stickstoffatomen oktaedrisch umgeben sind.

Abbildung 6.1: Koordinationssphäre der Eisenatome in  $[\text{Fe}(\text{OMQ})_2]_2$ .

Die Oktaeder bilden eine verzerrte Konfiguration aus, als eine Folge der fünfgliedrigen Ringe die sich durch die Chelatisierung der koordinierenden Chinolate ausbilden. Der mittlere Eisen-Sauerstoff-Abstand beträgt  $\langle \text{Fe-O} \rangle = 214,4 \text{ pm}$  und der mittlere Wert für die Eisen-Stickstoff-Bindungslängen beträgt  $\langle \text{Fe-N} \rangle = 226,5 \text{ pm}$ . Während die Bindungslängen zum Stickstoffatom noch gut mit jenen des bereits bekannten  $\text{Fe}(\text{OMQ})_3$ <sup>[100]</sup> übereinstimmen, so sind die mittleren Sauerstoffabstände des Eisen(III)-Chinolats bei  $\langle \text{Fe}^{\text{III}}\text{-O} \rangle = 194,0 \text{ pm}$ .

**Tabelle 6.1: Eisen-Sauerstoff und –Stickstoff Bindungslängen in  $\text{Fe}_2(\text{OMQ})_4$** 

Atome	d [pm]	Atome	d [pm]
Fe(1)-(O1)	201,9(6)	Fe(2)-(O1*)	219,5(6)
Fe(1)-(O2)	204,6(5)	Fe(2)-(O2)	213,6(6)
Fe(1)-(O3)	219,3(6)	Fe(2)-(O3)	216,3(5)
Fe(1)-(O3*)	241,4(7)	Fe(2)-(O4)	198,4(6)
Fe(1)-(N1)	218,8(7)	Fe(2)-(N3)	220,7(7)
Fe(1)-(N2)	226,5(7)	Fe(2)-(N4)	239,8(7)

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* = 1-x, 1-y, 1-z; # = -x, -y, 2-z.

Der kleinere Wert lässt sich durch den weiteren Strukturaufbau erklären. Während die Eisen(III)-Verbindung als von Chinaldinat dreifach koordiniertes Monomer vorliegt, wird in der hier vorgestellten Struktur das Fe(1)-Oktaeder über drei Kanten mit dem Fe(1\*), Fe(2) und dem Fe(2\*)-Oktaeder verknüpft, und es bildet sich ein Tetramer aus. Für das Fe(2)-Oktaeder ergibt sich eine zweifache Kantenverknüpfung zu den beiden äquivalenten Fe(1)-Oktaedern.

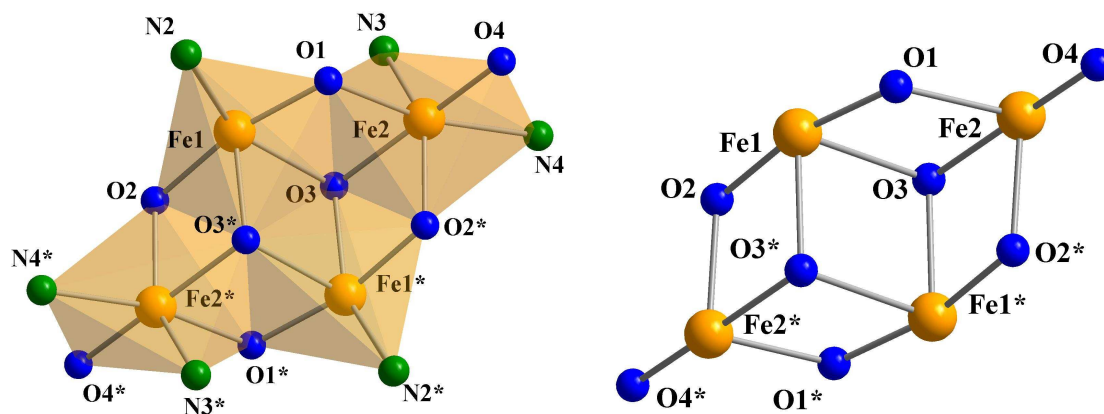


Abbildung 6.2: Oktaederverknüpfung und würfelförmige Form von  $[\text{Fe}(\text{OMQ})_2]_2$ .

Diese Verknüpfung der Oktaeder untereinander beinhaltet eine sterische Hinderung der koordinierenden 2-Methyl-8-hydroxychinolate und führt so zu der Verzerrung der Polyeder und zu einer Verlängerung der Bindungslängen. Das Sauerstoffatom O(4) koordiniert einfach an das Fe(2)-Atom und zeichnet sich somit durch den kürzesten Abstand aus. Das O(1)- sowie das O(2)-Atom koordinieren zweifach verbrückend und das O(3)-Atom bildet mit seiner dreifachen Verbrückung die größten Abstände aus. Die Abstände der Eisenatome zueinander betragen  $\text{Fe}(1)\text{-Fe}(1^*) = 349,2(2)$  pm,  $\text{Fe}(1)\text{-Fe}(2) = 339,2(2)$  pm und für  $\text{Fe}(1)\text{-Fe}(2^*) = 340,6(2)$  pm. Die tetranukleare Einheit bildet zwei würfelförmige Einheiten aus, welche über eine Fläche miteinander verknüpft sind und in denen jeweils eine Ecke fehlt. Ähnliche Struktur motive wurden zuvor für die Verbindungen  $[\text{Co}_4(\text{OMPpy})_6(\text{NO}_3)_2]$  (OMPpy = 6-Methyl-pyridin-2-methanol) und  $[\text{Co}_4(\text{OMQ})_6\text{Cl}_2]$  gefunden<sup>[107]</sup>, bei denen anstelle des hier dargestellten O(4)-Atoms entweder das Nitrat- oder das Chloridion koordinieren. Außerdem sind für das 8-Hydroxychinaldin Strukturen mit kompletter Würfelkonstruktion wie das  $[\text{M}_4(\text{OPiv})_4(\text{OMQ})_4]$  (OPiv = Pivalinsäure oder Trimethyl-essigsäure) mit  $\text{M} = \text{Co}$  und  $\text{Ni}$  bekannt<sup>[108]</sup>, bei denen der komplette Würfelaufbau durch die geringere sterische Hinderung der Pivalinsäure möglich ist.



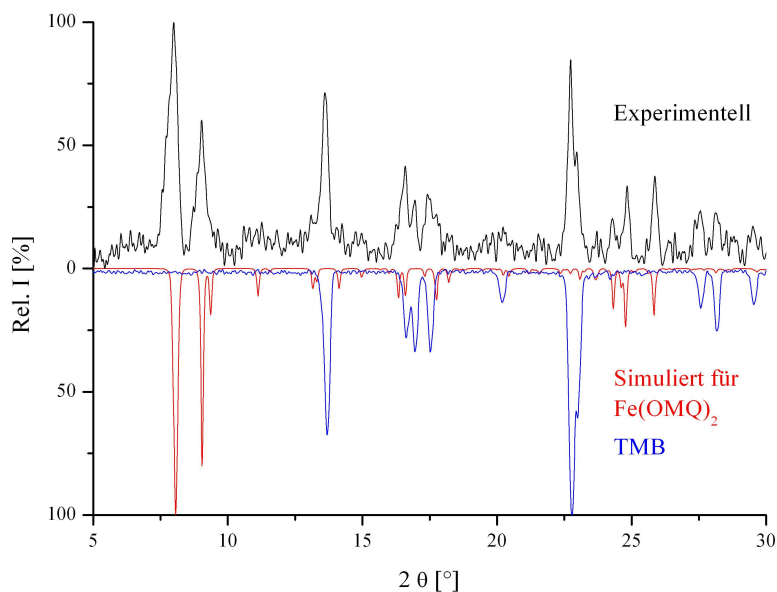


Abbildung 6.3: Pulverdiffraktogramm von Fe(OMQ)<sub>2</sub>.

Das Pulverdiffraktogramm von Fe(OMQ)<sub>2</sub> zeigt neben der guten Übereinstimmung mit den simulierten Daten aus dem Einkristall auch noch das Vorhandensein des eingesetzten TMB (1,2,4,5-Tetramethylbenzol).

### Experimentelles

Eine 10 cm lange Duranglasampulle mit einem Innendurchmesser von 10 mm wurde mit 0,1489 g (4,0 mmol) Fe(OMQ)<sub>2</sub> und 1,0 g (7,45 mmol) 1,2,4,5-Tetramethylbenzol als Flussmittel befüllt und unter Vakuum verschlossen. Das Reaktionsgefäß wurde in einem Röhrenofen mit 10°C/h auf 210°C erhitzt, dort für 7 d gehalten und mit 5°C/h auf Raumtemperatur abgekühlt.

**Tabelle 6.2: Kristallographische Daten für Fe(OMQ)<sub>4</sub>**

Summenformel	C <sub>40</sub> Fe <sub>2</sub> H <sub>32</sub> N <sub>4</sub> O <sub>4</sub>	
Molmasse	744,40 g/mol	
Messtemperatur	293(2) K	
Messgerät	STOE IPDS I	
Verwendete Strahlung	0,71073 Å (Mo-K <sub>α1</sub> )	
Kristallsystem, Raumgruppe	triklin, <i>P</i> $\bar{1}$ (Nr. 2)	
Gitterkonstanten	a = 1209,0(3) pm	$\alpha = 116,24(2)^\circ$
	b = 1278,8(3) pm	$\beta = 104,29(2)^\circ$
	c = 1307,7(3) pm	$\gamma = 100,06(2)^\circ$
Zellvolumen	1661,1(7) · 10 <sup>6</sup> pm <sup>3</sup>	
Z	2	
Berechnete Dichte	1,488 g/cm <sup>3</sup>	
Absorptionskorrektur	numerisch	
Absorptionskoeffizient	0,923 mm <sup>-1</sup>	
F(000)	768	
Messbereich	2,56° bis 25,00°	
Index-Bereich	-14 ≤ h ≤ 14, -15 ≤ k ≤ 15, -15 ≤ l ≤ 15	
Zahl der gemessenen Reflexe	14839	
davon symmetrieunabhängig	5489	
Beobachtete Reflexe [I <sub>0</sub> > 2σ(I)]	2064	
Verfeinerungsmethode	SIR92 <sup>[46]</sup> und SHELXL97 <sup>[47]</sup>	
Daten / Parameter	5489 / 454	
R <sub>int</sub>	0,1447	
Goof	0,677	
R Werte [I <sub>0</sub> > 2σ(I)]	R <sub>1</sub> = 0,0549 wR <sub>2</sub> = 0,0701	
R Werte (alle Daten)	R <sub>1all</sub> = 0,1714; wR <sub>2all</sub> = 0,0935	
Restelektronendichte	0,276 und -0,408 10 <sup>6</sup> e·pm <sup>-3</sup>	

## 7 Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Dissertation konnten zwölf neue Koordinationspolymere auf Basis von Metallkationen und verschiedenen Liebig-Säure-Anionen synthetisiert werden, von denen elf vollständig strukturell mit Hilfe der Einkristallstrukturanalyse charakterisiert werden konnten.

**Tabelle 7.1: Übersicht über die dargestellten Koordinationspolymere**

Verbindung	Kristallsystem	Raumgruppe	Beschreibung
$\text{Dy}_2(\text{OAc})_6(\text{H}_2\text{O})$	monoklin	$Cc$	Kettenstruktur
$[\text{Dy}_2\text{Mn}(\text{OAc})_8(\text{H}_2\text{O})_2](\text{HOAc})_2$	triklin	$P\bar{1}$	Kettenstruktur
$[\text{Dy}_2\text{Co}(\text{OAc})_8(\text{H}_2\text{O})_2](\text{HOAc})_2$	triklin	$P\bar{1}$	Kettenstruktur
$\text{Mn}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})$	orthorhombisch	$P2_12_12_1$	Kettenstruktur
$\text{Mn}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})_2$	orthorhombisch	$Pbca$	Kettenstruktur
$\text{Mn}_{19}(\text{OBz})_{38}(\text{HOBz})_2$	orthorhombisch	$P2_12_12$	3-dimensional
$\text{Fe}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})$	monoklin	$P2_1/c$	Kettenstruktur
$\text{Ni}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})_4$	triklin	$P\bar{1}$	Trimer
$\text{Tb}(\text{OBz})_3$	monoklin	$P2_1/n$	Kettenstruktur
$\text{Dy}(\text{OBz})_3$	monoklin	$P2_1/n$	Kettenstruktur
$\text{Dy}_x\text{Co}_{1-x}(\text{OBz})_3$	monoklin	$P2_1/n$	Kettenstruktur
$\text{Fe}(\text{OMQ})_2$	triklin	$P\bar{1}$	Tetramer

Die hier dargestellten Acetate weisen allesamt eine Kettenstruktur auf, in der die Koordinationspolyeder über je zwei Kanten miteinander verknüpft sind. Sie beinhalten außerdem koordinierende Wassermoleküle, und im Falle der bimetalischen Verbindungen enthalten sie außerdem ein koordinierendes Essigsäuremolekül. Die Wasserstoffatome der Hydroxylgruppen dieser Moleküle bilden innerhalb der Strukturen Wasserstoffbrückenbindungen aus, die maßgeblich für die Stabilität der Verbindungen sind und in  $\text{Dy}_2(\text{OAc})_6(\text{H}_2\text{O})$  werden die ausgebildeten Ketten durch diese verknüpft. Die Verbindungen sind an der Luft stabil und zeigen ein hohes Potential zur Darstellung neuer phasenreiner mono- oder bimetalischer Substanzen, die interessante Eigenschaften wie Magnetismus zeigen können und zur Darstellung neuer attraktiver Komponenten mittels thermischer Zersetzung geeignet sein könnten. Bei der direkten Umsetzung der Metalle mit

Essigsäure im Überschuss kann das gesamte Metall abreagieren und die überschüssige Säure wird durch einfaches Abdampfen entfernt.

Die Darstellung von bimetallicen Verbindungen der Selten-Erd- und 3d-Übergangsmetalle gestaltete sich schwierig. Dennoch ist es gelungen, zahlreiche neue Materialien der einzelnen Komponenten zu synthetisieren und zu charakterisieren. Die erhaltenen Substanzen der Übergangsmetalle enthalten alle ein oder mehrere koordinierende Benzoessäuremoleküle, welche mit dem Wasserstoffatom der Hydroxylgruppe Wasserstoffbrückenbindungen zu benachbarten Benzoationen ausbilden.

Insbesondere die Verwendung des Mangans zeichnete sich durch eine hohe strukturelle Vielfalt aus.  $\text{Mn}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})$  enthält zwei von Sauerstoffatomen sechsfach umgebene Manganatome und ein zur pentagonalen Bipyramide siebenfach koordiniertes Mangan(II)-ion. Die Polyeder sind jeweils über zwei Kanten miteinander verknüpft und die Verbindung kristallisiert in der azentrischen Raumgruppe  $P 2_1 2_1 2_1$ . Bei  $\text{Mn}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})_2$  weisen die Metallatome allesamt eine sechsfache Umgebung von Sauerstoffatomen auf. Die drei kristallographisch unabhängigen Manganatome bilden über zweifache Kantenverknüpfung Trimere aus, welche über Ecken zu Ketten verknüpft werden. Besonders hervorzuheben ist  $\text{Mn}_{19}(\text{OBz})_{38}(\text{HOBz})_2$ , in dem zehn kristallographisch unabhängige Manganatome vorliegen. Neben acht sechsfach koordinierten Metallatomen weist diese Verbindung ebenso ein siebenfach sowie ein achtfach koordiniertes Manganatom auf. Die Struktur baut durch drei Ecken-, sieben Kanten- und zwei Flächenverknüpfungen der Polyeder als einzige hier dargestellte Verbindung ein dreidimensionales Netzwerk auf und kristallisiert in der azentrischen Raumgruppe  $P 2_1 2_1 2$ . Außerdem zeichnet sie sich durch ihr antiferromagnetisches Verhalten mit einer Weiss-Konstanten von  $\Theta_p = -20,8 \text{ K}$  aus.

Im Eisenbenzoat  $\text{Fe}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})$  weisen die Metallatome allesamt eine sechsfache Umgebung von Sauerstoffatomen auf. Die drei kristallographisch unabhängigen Eisenatome bilden über zweifache Kantenverknüpfung Trimere, welche über Ecken zu Ketten verknüpft sind.  $\text{Ni}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})_4$  ist das einzige hier dargestellte Benzoat, welches durch drei eckenverknüpfte Oktaeder ein isoliertes Trimer ausbildet.

Die Seltenerdbenzoate,  $\text{M}(\text{OBz})_3$  ( $\text{M} = \text{Tb}, \text{Dy}$ ) sowie  $\text{Dy}_x\text{Co}_{1-x}(\text{OBz})_3$  haben jeweils drei kristallographisch unabhängige Metallatome, welche eine sechs-, sieben- und achtfache Koordination aufweisen. Das planar-quadratische Antiprisma bildet mit einer gegenüberliegenden Kanten- und einer Eckenverknüpfung ein Trimer aus, welches zu dem nächsten über drei zweizählig verbrückende Benzoationen zu den nächsten vernetzt und

somit Ketten ausbildet. Mit  $\text{Dy}_x\text{Co}_{1-x}(\text{OBz})_3$  gelang es hier erstmals, eine bimetallische, homoleptische, solvensfreie Substanz aus der direkten Umsetzung der Metalle mit Benzoesäure herzustellen. Auch wenn das Verhältnis der Metallatome noch unklar ist, stellt dieses Ergebnis doch einen Erfolg dar und deutet auf viele weitere Möglichkeiten hin, neue Verbindungen mit interessanten Eigenschaften zu synthetisieren. Außerdem konnte gezeigt werden, dass das paramagnetische  $\text{Dy}(\text{OBz})_3$  ein für Dysprosiumverbindungen typisches Emissionsverhalten zeigt. Die Darstellung des phasenreinen Terbiumbenzoats ist bisher noch nicht gelungen, wäre aber aufgrund des starken Emissionsverhaltens von besonderem Interesse.

Bei dem Versuch zur Synthese von neuen 8-Hydroxychinolin- und 8-Hydroxychinaldin-Verbindungen konnte lediglich das neue Eisen(II)-8-Hydroxychinaldinat erhalten werden. Es weist sich durch ein besonders interessantes Strukturmotiv aus, in dem vier oktaedrisch umgebene Eisenatome über insgesamt fünf Kantenverknüpfungen ein isoliertes Tetramer ausbilden, welches ein doppeltes würfelfartiges Motiv aufweist.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass fast alle kettenartigen Strukturen eine hexagonale Kettenumgebung aufweisen und im Falle der Carboxylate die Anionen eine große Vielfalt an Koordinationsmustern aufweisen. Die direkte Umsetzung der Metalle mit Liebig-Säuren erwies sich als hervorragende Methode, um neue Verbindungen zu synthetisieren. Um phasenreine Verbindungen zu erhalten ist es vorteilhaft, die Liebig-Säure im Überschuss einzusetzen damit das Metall vollständig abreagieren kann. Der Überschuss der Säure kann anschließend unter milden Bedingungen sublimiert und somit von dem Produkt entfernt werden.

Die weitere Optimierung der Reaktionsbedingungen wäre sinnvoll, um phasenreine Produkte zu erhalten, da weiterführende Untersuchungen der physikalischen Eigenschaften von großem Interesse sind. Wie zum Beispiel die Messung der Frequenzverdopplung (SHG = Second Harmonic Generation) <sup>[109]</sup> bei den azentrischen Verbindungen  $\text{Mn}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})$  und  $\text{Mn}_{19}(\text{OBz})_{38}(\text{HOBz})_2$ . Auch das thermische Zersetzungsverhalten der dargestellten Verbindungen könnte zu einer Reihe von neuen interessanten Substanzen führen. Um weitere bimetallische Verbindungen zu erhalten, könnte es sich als vorteilhaft erweisen, anstelle der einzelnen Metalle eine zuvor hergestellte Legierung zu verwenden, um das Diffusionspotential bei der Reaktion zu steigern. All die hier dargestellten Resultate zeigen viele weitere Aussichten auf, um neue attraktive Verbindungen zu synthetisieren. Die Möglichkeiten für weitere Materialien sind nahezu unbegrenzt.

## 8 Quellenangabe

- [1] X.-Y. Wang, H.-Y. Wei, Z.-M. Wang, Z.-D. Chen, S. Gao, *Inorg. Chem.*, **2005**, *44*, 572-583.
- [2] X. Zhang, D. Huang, F. Chen, C. Chen, Q. Liu, *Inorg. Chem. Commun.*, **2004**, *7*, 662-665.
- [3] S. Midollini, A. Orlandini, P. Rosa, L. Sorace, *Inorg. Chem.*, **2005**, *44*, 2060-2066.
- [4] S. G. Ang, B. W. Sun, S. Gao, *Inorg. Chem. Commun.*, **2004**, *7*, 795-798.
- [5] J. L. Manson, T. Lancaster, L. C. Chapon, S. J. Blundell, J. A. Schlueter, M. L. Brooks, F. L. Pratt, C. L. Nygren, J. S. Qualls, *Inorg. Chem.*, **2005**, *44*, 989-995.
- [6] J. -G. Mao, A. Clearfield, *Inorg. Chem.*, **2002**, *41*, 2319-2324.
- [7] I. Gil de Muro, F. A. Mautner, M. Insausti, L. Lezama, M. I. Arriortua, T. Rojo, *Inorg. Chem.*, **1998**, *37*, 3243-3251.
- [8] C. Ruiz-Pérez, Y. Rodríguez-Martin, M. Hernández-Molina, F. S. Delgado, J. Pasán, J. Sanchiz, F. Lloret, M. Julve, *Polyhedron*, **2003**, *22*, 2111-2123.
- [9] P. King, W. Wernsdorfer, K. A. Abboud, G. Christou, *Inorg. Chem.*, **2004**, *43*, 7315-7323.
- [10] H. Oshio, M. Nihei, A. Yoshida, H. Nojiri, M. Nakano, A. Yamaguchi, Y. Karaki, H. Ishimoto, *Chem.-Eur. J.*, **2005**, *11*, 843-848.
- [11] E. M. Rumberger, L. N. Zakharov, A. L. Rheingold, D. N. Hendrickson, *Inorg. Chem.*, **2004**, *43*, 6531-6533.
- [12] E. K. Brechin, E. C. Sanudo, W. Wernsdorfer, C. Bosovic, J. Yoo, D. N. Hendrickson, A. Yamaguchi, H. Ishimoto, T. E. Concolino, A. L. Rheingold, G. Christou, *Inorg. Chem.*, **2005**, *44*, 502-511.
- [13] E. C. Sanudo, W. Wernsdorfer, K. A. Abboud, G. Christou, *Inorg. Chem.*, **2004**, *43*, 4137-4144.
- [14] D. Gatteschi, R. Sessoli, *Angew. Chem., Int. Ed.*, **2003**, *42*, 268-297.
- [15] K. S. Gavrilenko, T. V. Mypnyuk, V. G. Il'in, S. M. Orlyk, V. V. Pavlishchuk, *Theor. Exp. Chem. (Rus. Ed.)*, **2002**, *38*, 110.
- [16] F. Millange, C. Serre, J. Marrot, N. Gardant, F. Pellé, G. Férey, *J. Mater. Chem.*, **2004**, *14*, 642-645.
- [17] B. Barjaa, R. Baggiob, M. T. Garlandc, P. F. Aramendiaa, O. Peñad, M. Perea, *Inorg. Chim. Acta*, **2003**, *346*, 187-196.
- [18] B. Yan, Q.-Y. Xie, *Inorg. Chem. Commun.*, **2003**, *6*, 1448-1450.

- [19] F.-Y. Li, L. Xu, G.-G. Gao, L.-H. Fan, B. Bi, *Eur. J. Inorg. Chem.*, **2007**, 3405-3409.
- [20] G. Meyer, *Z. Allg. Anorg. Chem.*, **2008**, 634, 201-222.
- [21] S. Gomez Torres, G. Meyer, *Z. Allg. Anorg. Chem.*, **2006**, 632, 1989-1994.
- [22] S. Gomez Torres, G. Meyer, *Z. Allg. Anorg. Chem.*, **2008**, 634, 231-233.
- [23] G. B. Deacon, P. C. Junk, S. G. Leary, *Z. Allg. Anorg. Chem.*, **2004**, 630, 1541-1543.
- [24] G. B. Deacon, P. C. Junk, C. M. Forsyth, S. G. Leary, *New J. Chem.*, **2006**, 30, 592-596.
- [25] S. G. Leary, G. B. Deacon, P. C. Junk, *Z. Allg. Anorg. Chem.*, **2005**, 631, 2647-2650.
- [26] S. Gomez Torres, *Dissertation*, **2007**, Universität zu Köln.
- [27] G. B. Deacon, C. M. Foyth, A. Gilitis, B. W. Skelton, A. H. White, *Dalton Trans.*, **2004**, 1239-1247.
- [28] G. B. Deacon, A. Gilitis, B.W. Skelton, A. H. White, *Chem. Commun.*, **1999**, 1213-1214.
- [29] K. Müller-Buschbaum, C. C. Quitmann, *Z. Anorg. Allg. Chem.*, **2004**, 360, 131-136.
- [30] K. Müller-Buschbaum, C. C. Quitmann, *Z. Anorg. Allg. Chem.*, **2005**, 631, 1191-1198.
- [31] K. Müller-Buschbaum, C. C. Quitmann, *Eur. J. Inorg. Chem.*, **2004**, 21, 4330-4337.
- [32] S. Gomez Torres, *Diplomarbeit*, **2005**, Universität zu Köln.
- [33] A. Ouchi, Y. Suzuki, Y. Ohki, Y. Koizumi, *Coord. Chem. Rev.*, **1988**, 92, 29-43.
- [34] H. B. Kagan, *Chem. Rev.*, **2002**, 102, 1805-1806.
- [35] R. Kempe, H. Noss, I. Torsten, *J. Organomet. Chem.*, **2002**, 647, 12-20.
- [36] Q. Su, H. Liang, C. Li, H. He, Y. Lu, J. Li, Y. Tao, *J. Lumin.*, **2007**, 122, 927-930.
- [37] A. M. Klonkowski, I. Szalkowska, S. Lis, *Optical Materials*, **2008**, 30, 1225-1232.
- [38] T. Yamaguchi, Y. Sunatsuki, H. Ishida, M. Kojima, H. Akashi, N. Re, N. Matsumoto, A. Pochaba, J. Mroziński, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **2008**, 81, 598-605.
- [39] K. Halbach, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res.*, **1981**, 187, 109-117.
- [40] Y. Z. Zheng, W. Xue, M. L. Tong, *Inorg. Chem.*, **2008**, 47, 4077-4087.
- [41] S. M. J. Aubin, M. W. Wemple, D. M. Adams, H.-L. Tsai, G. Christou, D. N. Hendrickson, *J. Am. Chem. Soc.*, **1996**, 118, 7746-7754.
- [42] H. Krischner, *Einführung in die Röntgenfeinstrukturanalyse*, **1990**, Vieweg Verlag.
- [43] W. Massa, *Kristallstrukturbestimmung*, **1996**, Stuttgart, B. G. Teubner.

- [44] X-Shape 1.06, *STOE Data Reduction Program*, **2001**, Darmstadt, STOE & Cie GmbH.
- [45] X-Red 1.22, *STOE Data Reduction Program*, **2001**, Darmstadt, STOE & Cie GmbH.
- [46] A. Altomare, G. Cascarano, C. Giacovazzo, A. Guagliardi, *J. Appl. Cryst.*, **1993**, 26, 343-350.
- [47] G. M. Sheldrick, *Acta Cryst.*, **2008**, A64, 112-122.
- [48] L. J. Farugia, *J. Appl. Cryst.*, **1999**, 32, 837-838.
- [49] T. Hahn, *International Tables for Crystallography, Volume A*, **1995**, Dordrecht-Boston-London, Kluwer Academic Publishers.
- [50] Brandenburg, K., *Diamond*, **1997-2006**, Crystal Impact Gbr.
- [51] R. Allmann, *Röntgenpulverdiffraktometrie*, **2002**, Springer Verlag.
- [52] *WinXPOW*, **2002**, Darmstadt, STOE & Cie GmbH.
- [53] G. Blasse, B. C. Grabmaier, *Luminescent Materials*, **1994**, Heidelberg, Springer-Verlag.
- [54] HGF, Hamburger Synchrotronstrahlungslabor HASYLAB am deutschen Elektronen Synchrotron DESY in der Hemholtz-Gemeinschaft, *Jahresbericht*, **2006**, Hamburg.
- [55] B. Beckhoff, B. Kanngießler, N. Langhoff, R. Wedell, H. Wolff, *Handbook of Practical X-Ray Fluorescence Analysis*, **2006**, Berlin, Springer.
- [56] W. F. Hemminger, H. K. Cammenga, *Methoden der Thermischen Analyse*, **1988**, Berlin-Heidelberg-New York, Springer Verlag.
- [57] H. Lueken, *Magnetochemie*, **1999**, Stuttgart/Leipzig, B. G. Teubner.
- [58] R. Fuchs, J. Strähle, *Z. Naturforsch. B*, **1984**, 39b, 1662-1663.
- [59] D. Gieseke-Vollmer, G. Meyer, *Z. Anorg. Allg. Chem.*, **1993**, 619, 1603-1608.
- [60] A. Lossin, G. Meyer, *Z. Allg. Anorg. Chem.*, **1993**, 619, 1609-1615.
- [61] A. Lossin, G. Meyer, *Z. Allg. Anorg. Chem.*, **1994**, 620, 438-443.
- [62] P. C. Junk, C. J. Kepert, L. Wei-Min, B. W. Skelton, A. H. White, *Aust. J. Chem.*, **1999**, 52, 437-457.
- [63] P. Lobinger, H. Jarzina, H. W. Roesky, S. Singh, S. S. Kumar, H.-G. Schmidt, M. Noltemeyer, H. C. Freyhardt, *Inorg. Chem.*, **2005**, 44, 9192-9196.
- [64] D. Deiters, *Dissertation*, **1995**, Universität Hannover.
- [65] A. Lossin, G. Meyer, *Z. Naturforsch. B*, **1992**, 47b, 179-182.
- [66] A. Gonzalez, A. Beltran, A. Le Bail, *Acta Cryst.*, **1991**, C47, 1624-1627.



- [67] N. Yu. Kozitsyna, S. E. Nefedov, M. N. Vargaftik, I. I. Moiseev, *Mendeleev Commun.*, **2005**, *15*, 223-224.
- [68] T. Steiner, *Angew. Chem.*, **2002**, *114*, 50-80.
- [69] R. D. Shannon, *Acta Cryst.*, **1976**, *A32*, 751-767.
- [70] A. Kappatsch, S. Quezel-Ambrunaz, J. Sivardière, *J. Phys. France*, **1970**, *31*, 369-376.
- [71] Z. B. Chachkhiani, A. S. Ilyushin, V. I. Cherchernikov, M. Hensch, L. G. Chachkhiani, *J. Phys. F*, **1971**, *1*, 679-685.
- [72] J. K. Yakinthos, D. E. Mentzafos, *Phys. Rev. B*, **1975**, *12*, 1928-1932.
- [73] W. A. J. J. Velge, K. H. J. Buschow, *J. Appl. Phys.*, **1968**, *39*, 1717-1720.
- [74] Y. Khan, *Acta Cryst.*, **1973**, *B29*, 2502-2507.
- [75] W. Adams, J. M. Moreau, E. Parthé, J. Schweizer, *Acta Cryst.*, **1976**, *B32*, 2697-2699.
- [76] G. B. Deacon, S. Hein, P. C. Junk, T. Jüstel, W. Lee and D. R. Turner, *CrystEngComm*, **2007**, *9*, 1110-1123.
- [77] H. Bußkamp, G. B. Deacon, M. Hilder, *Cryst. Eng. Comm.*, **2007**, *9*, 393-410.
- [78] F. A. Cotton, M. W. Extine, G. W. Rice, *Inorg. Chem.*, **1978**, *17*, 176-186.
- [79] I. M. Atkinson, C. Benelli, M. Murrie, S. Parsons, R. E. P. Winpenny, *Chem. Commun.*, **1999**, 285-286.
- [80] M. Spohn, J. Strähle, *Z. Naturforsch.*, **1988**, *43b*, 540-546.
- [81] M. G. B. Drew, D. A. Edwards, R. Richards, *J.C.S. Dalton*, **1977**, 299-303.
- [82] T. Kawata, H. Uekusa, S. Ohba, T. Furukara, T. Tokii, Y. Muto, M. Kato, *Acta Cryst.*, **1992**, *B48*, 253-261.
- [83] A. B. Charette, A. Beauchemin, S. Francoeur, *J. Am. Chem. Soc.*, **2001**, *123*, 8139-8140.
- [84] M. Spohn, J. Strähle, *Z. Kristallogr.*, **1987**, *179*, 205-207.
- [85] K. S. Gavrilenko, S. V. Punin, O. Cador, S. Golhen, L. Ouahab, V. V. Pavlishchuk, *J. Am. Chem. Soc.*, **2005**, *127*, 12246-12253.
- [86] S. Gomez Torres, G. Meyer, *J. Alloys Compd.*, **2008**, *451*, 433-435.
- [87] M. H. Rossouw, D. C. Liles, M. M. Thackeray, W. I. F. David, S. Hull, *Mater. Res. Bull.*, **1992**, *27*, 221-230.
- [88] S. Sasaki, K. Fujino, Y. Takeuchi, *J. Phys. Chem. Solids*, **1992**, *53*, 141-154.
- [89] L. I. Hill, A. Verbaere, *J. Solid State Chem.*, **2004**, *177*, 4706-4723.
- [90] S. Geller, *Phase Transition* **1992**, *38*, 127-220.

- [91] A. Simon, R. Dronskowski, B. Krebs, B. Hettich, *Z. Allg. Anorg. Chem.*, **1988**, 558, 7-20.
- [92] M. A. Monge, M. Angeles Monge, J. M. Amarilla, E. Gutierrez-Puebla, J. A. Campa, I. Rasines, *Chem. Phys. Chem.*, **2002**, 3, 367-370.
- [93] Y. Moritomo, Y. Ohishi, A. Kuriki, E. Nishibori, M. Takata, M. Sakata, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **2003**, 72, 765-766.
- [94] H. R. Oswald, M. J. Wampetich, *Helv. Chim. Acta*, **1967**, 50, 2023-2034.
- [95] Z. Hong, W. L. Li, D. Zhao, C. Liang, X. Liu, J. Peng, D. Zhao, *Synth. Met.*, **2000**, 111, 43-45.
- [96] R. G. W. Hollingshead, *Oxine and its derivatives*, **1954**, London, Butterworths.
- [97] R. C. Elderfield, *Heterocyclic Compounds*, **1952**, J. Wiley & Sons.
- [98] J. H. Van Tassel, W. W. Wendlandt, *J. Am. Chem. Soc.*, **1960**, 82, 4821-4823.
- [99] E. Silina, Yu. Bankovsky, V. Belsky, A. Stash, J. Ashaks, *Latv. Khim. Z. (Latv.) (Latvian J. Chem.)*, **1997**, 3.
- [100] F. Jian, Y. Wang, L. Lu, X. Yang, X. Wang, S. Chantrapromma, H.-K. Fun, I. A. Razak, *Acta Cryst.*, **2001**, C57, 714-716.
- [101] S. Ammor, G. Coquerel, G. Perez, F. Robert, *Eur. J. Solid State Inorg. Chem.*, **1992**, 29, 445.
- [102] A. T. Rane, V. V. Ravi, *Indian J. Chem., Sect. A.*, **1982**, 21, 311.
- [103] Y. Kai, M. Morita, N. Yasuoka, N. Kasai, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **1985**, 58, 1631-1635.
- [104] F. Artizzu, P. Deplano, L. Marchiò, M. L. Mercuri, L. Pilia, A. Serpe, F. Quochi, R. Orrù, F. Cordella, F. Meinardi, R. Tubino, A. Mura, G. Bongiovanni, *Inorg. Chem.*, **2005**, 44, 840-842.
- [105] W. W. Wendlandt, G. R. Horton, *J. Inorg. Nucl. Chem.*, **1962**, 24, 587-588.
- [106] G. B. Deacon, C. M. Forsyth, P. C. Junk, U. Kynast, G. Meyer, J. Moore, J. Sierau, A. Urbatsch, *J. Alloys Compd.*, **2008**, 451, 436-439.
- [107] S. G. Telfer, R. Kuroda, J. Lefebvre, D. B. Leznoff, *Inorg. Chem.*, **2006**, 45, 4592-4601.
- [108] G. Aromí, A. S. Batsanov, P. Christian, M. Helliwell, O. Roubeau, G. A. Timco, R. E. P. Winpenny, *Dalton Trans.*, **2003**, 4466-4471.
- [109] P. A. Franken, A. E. Hill, C. W. Peters, G. Weinreich, *Phys. Rev. Lett.*, **1961**, 7, 118-119.

## 9 Danksagung

An dieser Stelle möchte ich den Menschen danken, die zu dem Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Meinem Doktorvater Professor Dr. Gerd Meyer danke ich für die Möglichkeit, die Arbeit unter seiner Anleitung durchführen zu können, für die fachliche Unterstützung und die anregenden, nicht ausschließlich fachlichen Gespräche.

Professor Dr. Glen Deacon und Professor Dr. Peter Junk haben es mir durch Ihre Kooperation ermöglicht, gemeinsam mit Ihnen auf einem interessanten Forschungsgebiet zu arbeiten.

Peter Kliesen, Horst Schumacher, Ingrid Müller, Dr. Ingo Pantenberg und Nurgül Tosun für die vielen Messungen, ohne die die Anfertigung dieser Arbeit nicht möglich gewesen wäre.

Markus Kaiser aus dem Institut für Physikalische Chemie an der Universität zu Köln für die REM/EDX-Aufnahmen.

Frederick Casper von der Johannes Gutenberg-Universität in Mainz nicht nur für die magnetischen Messungen, sondern auch für die gute Unterhaltung während einiger gemeinsamer Konferenztage.

Oliver Fastje, Timo Taetz, Bert Mallick, Sina Zimmermann, Nina Herzmann und Christian Rustige, ohne die die Tage im Institut nur halb so schön gewesen wären und danke für die täglichen gemeinsamen Mensagänge.

Andrea Schuy, Sabrina Disch und Ruth Ahlers für die gemeinsamen Poker- und Bowlingrunden, sowie die seelische und fachliche Unterstützung.

Ganz besonderer Dank gilt Marika Heblinski und Simone Bliß, ohne die das gesamte Studium fast unmöglich gewesen wäre.

Der WG am Hohenstaufenring für die seelische Unterstützung, das Feierabendbier und für die Nahrungsaufnahme. Und danke Sascha für das Synonymwörterbuch.

Alice und Maria, die immer für mich da waren, wenn ich sie brauchte.

Und nicht zuletzt danke ich meiner Familie, die immer an mich geglaubt hat.

## 10 Appendix

### 10.1 Dy<sub>2</sub>(OAc)<sub>6</sub>(H<sub>2</sub>O)

Tabelle 10.1.1: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ( $\text{\AA}^2 \cdot 10^{-3}$ ) von Dy<sub>2</sub>(OAc)<sub>6</sub>(H<sub>2</sub>O)

Atom	Lage	x/a	y/b	z/c	U <sub>(eq)</sub>
Dy(1)	4a	0,55974(6)	0,14604(3)	0,49962(9)	0,0161(1)
Dy(2)	4a	0,30769(6)	0,24295(4)	0,2356(1)	0,0225(2)
O(1)	4a	0,1726(6)	0,2726(6)	0,271(1)	0,028(2)
O(2)	4a	0,1115(7)	0,3833(6)	0,313(2)	0,032(3)
O(3)	4a	0,5825(7)	0,2638(6)	0,372(2)	0,040(3)
O(4)	4a	0,7186(7)	0,3272(7)	0,489(2)	0,044(3)
O(5)	4a	0,2199(5)	0,3615(5)	0,052(2)	0,031(2)
O(6)	4a	0,3585(7)	0,3347(6)	0,074(2)	0,048(3)
O(7)	4a	0,3650(8)	0,3496(7)	0,450(2)	0,056(4)
O(8)	4a	0,4602(7)	0,2477(5)	0,527(2)	0,032(2)
O(9)	4a	0,2983(7)	0,1359(6)	0,392(2)	0,037(3)
O(10)	4a	0,4381(5)	0,0759(5)	0,525(1)	0,032(2)
O(11)	4a	0,4238(5)	0,1667(6)	0,214(2)	0,025(2)
O(12)	4a	0,5410(7)	0,1080(6)	0,200(2)	0,030(3)
O(13)	4a	0,5904(5)	0,0047(5)	0,517(1)	0,032(2)
C(1)	4a	0,1634(7)	0,3205(8)	0,375(2)	0,027(3)
C(2)	4a	0,205(2)	0,303(1)	0,569(3)	0,062(6)
C(3)	4a	0,6359(9)	0,3199(7)	0,377(2)	0,027(3)
C(4)	4a	0,595(1)	0,385(1)	0,240(3)	0,080(9)
C(5)	4a	0,2914(9)	0,3806(8)	0,031(2)	0,021(3)
C(6)	4a	0,291(2)	0,460(1)	-0,058(3)	0,048(5)
C(7)	4a	0,4399(9)	0,3203(9)	0,547(2)	0,027(3)
C(8)	4a	0,514(2)	0,368(2)	0,698(3)	0,082(9)
C(9)	4a	0,3528(7)	0,0822(7)	0,490(2)	0,022(3)
C(10)	4a	0,312(2)	0,020(1)	0,563(3)	0,044(5)
C(11)	4a	0,4655(9)	0,1436(8)	0,127(2)	0,021(3)
C(12)	4a	0,424(1)	0,164(1)	-0,072(2)	0,053(5)

**Tabelle 10.1.2: Anisotrope Auslenkungsparameter ( $\text{\AA}^2 \cdot 10^{-3}$ ) von  $\text{Dy}_2(\text{OAc})_6(\text{H}_2\text{O})$ .**

Atom	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{23}$	$U^{13}$	$U^{12}$
Dy(1)	0,0135(2)	0,0138(3)	0,0199(3)	0,0004(3)	0,0064(2)	-0,0001(3)
Dy(2)	0,0170(2)	0,0196(4)	0,0289(3)	0,0000(3)	0,0083(2)	0,0039(2)
O(1)	0,031(5)	0,023(5)	0,036(6)	0,000(4)	0,020(4)	0,011(4)
O(2)	0,037(7)	0,032(5)	0,031(6)	0,003(4)	0,017(5)	0,012(5)
O(3)	0,040(5)	0,028(5)	0,050(7)	0,008(5)	0,018(5)	-0,007(5)
O(4)	0,019(6)	0,035(6)	0,051(8)	0,013(5)	-0,009(5)	-0,008(5)
O(5)	0,017(4)	0,023(5)	0,046(6)	-0,001(4)	0,009(4)	0,003(3)
O(6)	0,034(5)	0,042(6)	0,079(9)	0,024(6)	0,033(6)	0,010(4)
O(7)	0,042(7)	0,041(7)	0,063(9)	-0,017(6)	-0,002(6)	0,003(5)
O(8)	0,032(5)	0,023(5)	0,044(7)	-0,009(4)	0,019(5)	0,005(4)
O(9)	0,025(6)	0,037(6)	0,050(8)	0,021(5)	0,015(5)	0,012(4)
O(10)	0,017(4)	0,026(5)	0,049(7)	0,008(4)	0,013(4)	0,000(3)
O(11)	0,013(4)	0,027(5)	0,030(6)	0,000(4)	0,007(4)	0,002(4)
O(12)	0,033(6)	0,032(6)	0,030(6)	-0,009(4)	0,017(5)	0,002(4)
O(13)	0,049(6)	0,017(4)	0,046(7)	0,000(4)	0,035(6)	0,001(3)
C(1)	0,005(5)	0,025(7)	0,041(9)	0,006(6)	0,000(5)	-0,001(5)
C(2)	0,09(2)	0,06(1)	0,04(1)	0,017(9)	0,03(1)	0,04(1)
C(3)	0,025(7)	0,019(6)	0,035(9)	-0,005(6)	0,011(6)	-0,008(5)
C(4)	0,05(1)	0,07(1)	0,08(2)	0,05(1)	-0,01(1)	-0,029(9)
C(5)	0,004(6)	0,028(7)	0,039(9)	0,003(6)	0,012(5)	-0,003(5)
C(6)	0,05(1)	0,04(1)	0,06(1)	0,011(9)	0,026(9)	0,000(8)
C(7)	0,018(7)	0,031(7)	0,028(9)	-0,010(6)	0,006(6)	-0,001(6)
C(8)	0,07(2)	0,04(2)	0,09(2)	-0,03(2)	-0,01(1)	0,01(1)
C(9)	0,015(6)	0,019(6)	0,035(8)	-0,007(5)	0,009(5)	0,002(4)
C(10)	0,05(1)	0,030(9)	0,06(2)	0,014(8)	0,027(9)	0,000(7)
C(11)	0,025(7)	0,018(6)	0,019(7)	-0,005(5)	0,010(5)	0,001(5)
C(12)	0,034(8)	0,10(2)	0,022(9)	0,003(9)	0,010(6)	0,016(9)

**Tabelle 10.1.3: Ausgewählte Bindungslängen [pm] von  $\text{Dy}_2(\text{OAc})_6(\text{H}_2\text{O})$ .**

Dy(1)-Dy(2)	398,6(2)	Dy(2)-O(1)	235,3(9)	O(4)-C(3)	125(2)
Dy(1)-Dy(2*)	401,5(2)	Dy(2)-O(4#)	226(1)	O(5)-C(5)	127(2)
Dy(1)-O(1*)	258,5(9)	Dy(2)-O(5)	251,6(9)	O(6)-C(5)	123(2)
Dy(1)-O(2*)	244(1)	Dy(2)-O(6)	241(1)	O(7)-C(7)	122(2)
Dy(1)-O(3)	234(1)	Dy(2)-O(7)	241(1)	O(8)-C(7)	128(2)
Dy(1)-O(5*)	239,9(8)	Dy(2)-O(8)	259(1)	O(9)-C(9)	127(2)
Dy(1)-O(8)	239,7(9)	Dy(2)-O(9)	226(1)	O(10)-C(9)	126(2)
Dy(1)-O(10)	235,1(8)	Dy(2)-O(11)	231,4(9)	O(11)-C(11)	125(2)
Dy(1)-O(11)	245,5(8)	O(1)-C(1)	124(2)	O(12)-C(11)	124(2)
Dy(1)-O(12)	249(1)	O(2)-C(1)	129(2)		
Dy(1)-O(13)	238,9(8)	O(3)-C(3)	125(2)		

Symmetrieoperationen zur Erzeugung äquivalenter Atome: \* = 0,5+x; 0,5-y; 0,5+z; # = -0,5+x; 0,5-y; -0,5+z

**Tabelle 10.1.4: Ausgewählte Winkel [grad] von Dy<sub>2</sub>(OAc)<sub>6</sub>(H<sub>2</sub>O).**

Dy(1)-Dy(2)-Dy(1#)	175,46(3)	O(2*)-Dy(1)-O(5*)	87,7(4)	O(1)-Dy(2)-O(8)	114,0(3)
Dy(2)-Dy(1)-Dy(2*)	128,77(3)	O(2*)-Dy(1)-O(8)	87,9(4)	O(1)-Dy(2)-O(9)	78,0(4)
Dy(1)-O(1*)-Dy(2*)	108,7(4)	O(2*)-Dy(1)-O(10)	73,0(3)	O(1)-Dy(2)-O(11)	158,8(3)
Dy(1)-O(5*)-Dy(2*)	109,6(4)	O(2*)-Dy(1)-O(11)	145,1(3)	O(4#)-Dy(2)-O(5)	83,2(4)
Dy(1)-O(8)-Dy(2)	106,0(4)	O(2*)-Dy(1)-O(12)	151,3(3)	O(4#)-Dy(2)-O(6)	92,3(5)
Dy(1)-O(11)-Dy(2)	113,4(4)	O(2*)-Dy(1)-O(13)	76,9(4)	O(4#)-Dy(2)-O(7)	161,6(3)
Dy(1)-O(1*)-C(1*)	92,0(7)	O(3)-Dy(1)-O(5*)	76,2(3)	O(4#)-Dy(2)-O(8)	146,9(3)
Dy(1)-O(2*)-C(1*)	97,5(9)	O(3)-Dy(1)-O(8)	72,4(4)	O(4#)-Dy(2)-O(9)	87,3(5)
Dy(1)-O(3)-C(3)	148,1(9)	O(3)-Dy(1)-O(10)	139,2(3)	O(4#)-Dy(2)-O(11)	81,5(4)
Dy(1)-O(5*)-C(5*)	159,7(9)	O(3)-Dy(1)-O(11)	71,5(3)	O(5)-Dy(2)-O(6)	52,6(3)
Dy(1)-O(8)-C(7)	153,3(9)	O(3)-Dy(1)-O(12)	73,7(4)	O(5)-Dy(2)-O(7)	79,1(4)
Dy(1)-O(10)-C(9)	141,6(8)	O(3)-Dy(1)-O(13)	141,4(4)	O(5)-Dy(2)-O(8)	126,7(3)
Dy(1)-O(11)-C(11)	93,5(7)	O(5*)-Dy(1)-O(8)	135,8(3)	O(5)-Dy(2)-O(9)	144,4(3)
Dy(1)-O(12)-C(11)	92,1(8)	O(5*)-Dy(1)-O(10)	144,3(3)	O(5)-Dy(2)-O(11)	129,1(3)
Dy(2)-O(1)-C(1)	128,4(8)	O(5*)-Dy(1)-O(11)	127,1(3)	O(6)-Dy(2)-O(7)	81,2(5)
Dy(2)-O(4#)-C(3#)	133(1)	O(5*)-Dy(1)-O(12)	79,6(3)	O(6)-Dy(2)-O(8)	96,1(3)
Dy(2)-O(5)-C(5)	89,2(7)	O(5*)-Dy(1)-O(13)	76,3(3)	O(6)-Dy(2)-O(9)	162,5(3)
Dy(2)-O(6)-C(5)	95,1(9)	O(8)-Dy(1)-O(10)	74,5(3)	O(6)-Dy(2)-O(11)	79,9(4)
Dy(2)-O(7)-C(7)	98,5(9)	O(8)-Dy(1)-O(11)	69,9(3)	O(7)-Dy(2)-O(8)	51,4(3)
Dy(2)-O(8)-C(7)	88,1(8)	O(8)-Dy(1)-O(12)	119,0(4)	O(7)-Dy(2)-O(9)	104,0(5)
Dy(2)-O(9)-C(9)	137,0(8)	O(8)-Dy(1)-O(13)	144,4(3)	O(7)-Dy(2)-O(11)	114,0(4)
Dy(2)-O(11)-C(11)	149,8(9)	O(10)-Dy(1)-O(11)	75,2(3)	O(8)-Dy(2)-O(9)	75,3(3)
O(1*)-Dy(1)-O(2*)	51,3(3)	O(10)-Dy(1)-O(12)	103,1(4)	O(8)-Dy(2)-O(11)	68,7(3)
O(1*)-Dy(1)-O(3)	77,3(3)	O(10)-Dy(1)-O(13)	70,3(3)	O(9)-Dy(2)-O(11)	82,7(4)
O(1*)-Dy(1)-O(5*)	65,8(3)	O(11)-Dy(1)-O(12)	51,8(3)	O(1)-C(1)-O(2)	119(1)
O(1*)-Dy(1)-O(8)	77,4(3)	O(11)-Dy(1)-O(13)	105,5(3)	O(3)-C(3)-O(4)	125(1)
O(1*)-Dy(1)-O(10)	117,6(3)	O(12)-Dy(1)-O(13)	75,1(4)	O(5)-C(5)-O(6)	122(1)
O(1*)-Dy(1)-O(11)	140,0(4)	O(1)-Dy(2)-O(4#)	88,8(4)	O(7)-C(7)-O(8)	121(2)
O(1*)-Dy(1)-O(12)	139,1(3)	O(1)-Dy(2)-O(5)	67,6(3)	O(9)-C(9)-O(10)	125(1)
O(1*)-Dy(1)-O(13)	114,5(3)	O(1)-Dy(2)-O(6)	119,5(3)	O(11)-C(11)-O(12)	121(1)
O(2*)-Dy(1)-O(3)	128,1(4)	O(1)-Dy(2)-O(7)	79,6(4)		

Symmetrieoperationen zur Erzeugung äquivalenter Atome: \* = 0,5+x; 0,5-y; 0,5+z; # = -0,5+x; 0,5-y; -0,5+z

## 10.2 $[\text{Dy}_2\text{Mn}(\text{OAc})_8(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot (\text{HOAc})_2$

**Tabelle 10.2.1: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ( $\text{\AA}^2 \cdot 10^{-3}$ ) von  $[\text{Dy}_2\text{Mn}(\text{OAc})_8(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot (\text{HOAc})_2$ .**

Atom	Lage	x/a	y/b	z/c	$U_{\text{(eq)}}$
Dy	2i	0,08849(4)	0,92786(4)	0,32162(3)	0,0332(1)
Mn	1a	0	1	0	0,0428(4)
O(1)	2i	-0,2137(7)	1,0493(9)	0,1292(6)	0,053(2)
O(2)	2i	-0,1671(6)	1,0325(8)	0,3242(6)	0,046(1)
O(3)	2i	0,0687(7)	0,8109(8)	0,1389(6)	0,045(2)
O(4)	2i	0,2641(8)	0,7083(8)	0,2247(7)	0,054(2)
O(5)	2i	0,1000(7)	1,1066(8)	0,1163(6)	0,047(2)
O(6)	2i	0,3080(7)	1,0221(9)	0,1866(7)	0,057(2)
O(7)	2i	-0,0227(8)	0,7156(8)	0,4231(7)	0,054(2)
O(8)	2i	-0,0579(6)	0,8750(7)	0,5613(6)	0,040(1)
O(9)	2i	0,549(1)	0,680(2)	0,392(2)	0,113(4)
O(10)	2i	0,538(1)	0,543(1)	0,2458(9)	0,075(2)
O(11)	2i	0,2673(8)	0,8449(9)	0,4477(7)	0,055(2)
C(1)	2i	-0,2574(9)	1,061(1)	0,2491(8)	0,040(2)
C(2)	2i	-0,424(1)	1,112(2)	0,302(1)	0,076(4)
C(3)	2i	0,192(2)	0,715(1)	0,1398(8)	0,047(2)
C(4)	2i	0,245(2)	0,603(2)	0,046(1)	0,083(4)
C(5)	2i	0,243(1)	1,101(1)	0,1043(9)	0,047(2)
C(6)	2i	0,329(2)	1,192(2)	-0,010(1)	0,068(3)
C(7)	2i	-0,0765(9)	0,751(1)	0,5354(8)	0,039(2)
C(8)	2i	-0,166(2)	0,654(2)	0,638(2)	0,066(3)
C(9)	2i	0,607(2)	0,582(2)	0,324(1)	0,067(3)
C(10)	2i	0,765(2)	0,499(2)	0,320(2)	0,095(5)

**Tabelle 10.2.2: Anisotrope Auslenkungsparameter ( $\text{\AA}^2 \cdot 10^{-3}$ ) von  $[\text{Dy}_2\text{Mn}(\text{OAc})_8(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot (\text{HOAc})_2$ .**

Atom	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{23}$	$U^{13}$	$U^{12}$
Dy	0,0351(2)	0,0407(2)	0,02536(2)	-0,0059(2)	-0,0112(1)	-0,0038(1)
Mn	0,0395(8)	0,063(2)	0,0251(8)	-0,0079(8)	-0,0134(7)	0,0001(8)
O(1)	0,042(3)	0,089(5)	0,031(3)	-0,020(3)	-0,014(3)	0,001(3)
O(2)	0,041(3)	0,072(4)	0,027(3)	-0,014(3)	-0,011(2)	-0,005(3)
O(3)	0,053(3)	0,051(4)	0,029(3)	-0,006(3)	-0,012(3)	0,000(3)
O(4)	0,059(3)	0,059(4)	0,046(4)	-0,016(3)	-0,023(3)	0,005(3)
O(5)	0,048(3)	0,052(4)	0,040(3)	-0,010(3)	-0,014(3)	-0,004(3)
O(6)	0,049(3)	0,075(5)	0,049(4)	-0,003(4)	-0,014(3)	-0,016(3)
O(7)	0,066(4)	0,057(4)	0,044(4)	-0,014(3)	-0,010(3)	-0,019(3)
O(8)	0,045(3)	0,039(3)	0,038(3)	-0,009(3)	-0,012(3)	-0,005(2)
O(9)	0,076(5)	0,15(1)	0,119(9)	-0,079(9)	-0,046(6)	0,050(6)
O(10)	0,064(4)	0,081(6)	0,079(6)	-0,020(5)	-0,021(4)	0,002(4)
O(11)	0,047(3)	0,079(5)	0,037(3)	-0,021(3)	-0,015(3)	0,007(3)
C(1)	0,034(3)	0,054(5)	0,034(4)	-0,006(4)	-0,012(3)	-0,005(3)
C(2)	0,040(4)	0,14(2)	0,054(6)	-0,032(7)	-0,017(5)	0,001(6)
C(3)	0,070(5)	0,042(5)	0,027(4)	-0,005(4)	-0,006(4)	-0,012(4)
C(4)	0,13(1)	0,066(8)	0,048(6)	-0,028(6)	-0,019(7)	0,009(8)
C(5)	0,055(5)	0,054(5)	0,033(4)	-0,009(4)	-0,001(4)	-0,022(4)
C(6)	0,080(7)	0,070(7)	0,047(6)	0,001(6)	0,000(5)	-0,024(6)
C(7)	0,045(4)	0,040(4)	0,031(4)	-0,006(3)	-0,007(3)	-0,010(3)

Atom	U <sup>11</sup>	U <sup>22</sup>	U <sup>33</sup>	U <sup>23</sup>	U <sup>13</sup>	U <sup>12</sup>
C(9)	0,051(5)	0,083(8)	0,056(7)	-0,013(6)	-0,010(5)	0,009(5)
C(10)	0,066(7)	0,10(1)	0,11(1)	-0,03(1)	-0,036(8)	0,027(7)

**Tabelle 10.2.3: Ausgewählte Bindungslängen [pm] von [Dy<sub>2</sub>Mn(OAc)<sub>8</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] · (HOAc)<sub>2</sub>.**

Dy-Dy*	408,66(8)	Dy-O(8)	260,3(6)	O(3)-C(3)	128(1)
Mn-Dy	368,40(6)	Dy-O(8*)	232,2(6)	O(4)-C(3)	125(1)
Dy-O(2)	233,6(6)	Dy-O(11)	232,6(6)	O(5)-C(5)	128(1)
Dy-O(3)	246,6(6)	Mn-O(1)	209,9(6)	O(6)-C(5)	125(2)
Dy-O(4)	249,9(7)	Mn-O(3)	220,4(6)	O(7)-C(7)	125(1)
Dy-O(5)	252,9(7)	Mn-O(5)	219,7(6)	O(8)-C(7)	129(1)
Dy-O(6)	240,9(6)	O(1)-C(1)	126(1)	O(9)-C(9)	121(2)
Dy-O(7)	239,5(6)	O(2)-C(1)	126,4(9)	O(10)-C(9)	132(2)

Symmetrieoperation zur Erzeugung äquivalenter Atome: \* = -x, 2-y, 1-z

**Tabelle 10.2.4: Ausgewählte Winkel [grad] von [Dy<sub>2</sub>Mn(OAc)<sub>8</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] · (HOAc)<sub>2</sub>.**

Dy-Mn-Dy#	180,0(1)	O(2)-Dy-O(8*)	80,5(2)	O(6)-Dy-O(8*)	85,0(2)
Dy-Dy*-Mn\$	138,4(1)	O(2)-Dy-O(11)	144,9(2)	O(6)-Dy-O(11)	78,3(2)
Dy-O(8)-Dy*	112,0(2)	O(3)-Dy-O(4)	52,5(2)	O(7)-Dy-O(8)	51,8(2)
Dy-O(3)-Mn	104,0(3)	O(3)-Dy-O(5)	68,0(2)	O(7)-Dy-O(8*)	119,6(2)
Dy-O(5)-Mn	102,2(2)	O(3)-Dy-O(6)	89,8(2)	O(7)-Dy-O(11)	87,0(3)
Dy-O(2)-C(1)	139,3(6)	O(3)-Dy-O(7)	75,9(2)	O(8)-Dy-O(8*)	68,0(2)
Dy-O(3)-C(3)	93,9(5)	O(3)-Dy-O(8)	125,1(2)	O(8)-Dy-O(11)	71,7(2)
Dy-O(4)-C(3)	93,0(6)	O(3)-Dy-O(8*)	154,8(2)	O(8*)-Dy-O(11)	76,6(2)
Dy-O(5)-C(5)	90,8(5)	O(3)-Dy-O(11)	126,4(2)	O(1)-Mn-O(1#)	180,0(5)
Dy-O(6)-C(5)	97,3(5)	O(4)-Dy-O(5)	97,9(2)	O(1)-Mn-O(3)	89,7(3)
Dy-O(7)-C(7)	99,9(5)	O(4)-Dy-O(6)	74,8(3)	O(1)-Mn-O(3#)	90,3(3)
Dy-O(8)-C(7)	89,2(5)	O(4)-Dy-O(7)	73,5(2)	O(1)-Mn-O(5)	89,3(2)
Dy-O(8*)-C(7*)	158,5(5)	O(4)-Dy-O(8)	115,2(2)	O(1)-Mn-O(5#)	90,7(2)
Mn-O(1)-C(1)	134,6(5)	O(4)-Dy-O(8*)	147,1(2)	O(3)-Mn-O(3#)	180,0(1)
Mn-O(3)-C(3)	133,8(6)	O(4)-Dy-O(11)	74,1(2)	O(3)-Mn-O(5)	78,8(2)
Mn-O(5)-C(5)	126,0(6)	O(5)-Dy-O(6)	52,4(2)	O(3)-Mn-O(5#)	101,2(2)
O(2)-Dy-O(3)	82,7(2)	O(5)-Dy-O(7)	139,1(2)	O(5)-Mn-O(5#)	180,0(2)
O(2)-Dy-O(4)	132,4(2)	O(5)-Dy-O(8)	145,6(2)	O(1)-C(1)-O(2)	123,3(7)
O(2)-Dy-O(5)	75,6(2)	O(5)-Dy-O(8*)	89,6(2)	O(3)-C(3)-O(4)	120,5(9)
O(2)-Dy-O(6)	125,9(2)	O(5)-Dy-O(11)	129,9(2)	O(5)-C(5)-O(6)	119,6(8)
O(2)-Dy-O(7)	81,5(2)	O(6)-Dy-O(7)	147,7(3)	O(7)-C(7)-O(8)	119,1(7)
O(2)-Dy-O(8)	75,2(2)	O(6)-Dy-O(8)	143,2(2)	O(9)-C(9)-O(10)	123(1)

Symmetrieoperationen zur Erzeugung äquivalenter Atome: # = -x, 2-y, -z; \* = -x, 2-y, 1-z; \$ = x, y, 1+z



### 10.3 $[\text{Dy}_2\text{Co}(\text{OAc})_8(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot (\text{HOAc})_2$

**Tabelle 10.3.1:** Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ( $\text{\AA}^2 \cdot 10^{-3}$ ) von  $[\text{Dy}_2\text{Co}(\text{OAc})_8(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot (\text{HOAc})_2$ .

Atom	Lage	x/a	y/b	z/c	$U_{\text{(eq)}}$
Dy	2i	0,08762(3)	0,92824(3)	0,32002(3)	0,0219(1)
Co	1a	0	1	0	0,0269(2)
O(1)	2i	-0,2110(4)	1,0530(5)	0,1202(4)	0,035(1)
O(2)	2i	-0,1689(4)	1,0330(5)	0,3210(4)	0,0314(9)
O(3)	2i	0,0619(5)	0,8167(4)	0,1374(4)	0,0348(9)
O(4)	2i	0,2594(5)	0,7108(5)	0,2199(5)	0,040(1)
O(5)	2i	0,0941(4)	1,1065(4)	0,1127(4)	0,0308(9)
O(6)	2i	0,3052(5)	1,0238(6)	0,1822(5)	0,044(1)
O(7)	2i	-0,0230(5)	0,7165(5)	0,4239(4)	0,038(1)
O(8)	2i	-0,0565(4)	0,8752(4)	0,5615(4)	0,0311(9)
O(9)	2i	0,5498(7)	0,6803(9)	0,3937(8)	0,100(3)
O(10)	2i	0,5356(6)	0,5415(6)	0,2464(6)	0,061(2)
O(11)	2i	0,2687(5)	0,8450(6)	0,4489(5)	0,044(1)
C(1)	2i	-0,2546(6)	1,0622(6)	0,2397(6)	0,030(2)
C(2)	2i	-0,4243(7)	1,115(1)	0,2925(8)	0,061(2)
C(3)	2i	0,1842(7)	0,7180(6)	0,1373(6)	0,035(2)
C(4)	2i	0,230(1)	0,6090(9)	0,0379(9)	0,069(3)
C(5)	2i	0,2369(7)	1,1021(7)	0,0982(6)	0,031(2)
C(6)	2i	0,3220(9)	1,1915(9)	-0,0156(8)	0,053(2)
C(7)	2i	-0,0768(6)	0,7533(6)	0,5370(6)	0,028(1)
C(8)	2i	-0,1634(9)	0,6574(8)	0,6427(8)	0,055(2)
C(9)	2i	0,6062(9)	0,580(1)	0,3256(9)	0,060(2)
C(10)	2i	0,767(1)	0,499(1)	0,325(1)	0,085(3)

**Tabelle 10.3.2:** Anisotrope Auslenkungsparameter ( $\text{\AA}^2 \cdot 10^{-3}$ ) von  $[\text{Dy}_2\text{Co}(\text{OAc})_8(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot (\text{HOAc})_2$ .

Atom	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{23}$	$U^{13}$	$U^{12}$
Dy	0,0215(2)	0,0292(1)	0,0145(2)	-0,00647(8)	-0,00446(8)	-0,00028(8)
Co	0,0248(5)	0,0407(6)	0,0147(6)	-0,0065(4)	-0,0072(4)	-0,0001(4)
O(1)	0,027(2)	0,061(3)	0,017(3)	-0,013(2)	-0,007(2)	-0,002(2)
O(2)	0,020(2)	0,054(3)	0,018(2)	-0,010(2)	-0,007(2)	0,005(2)
O(3)	0,044(2)	0,036(2)	0,022(3)	-0,006(2)	-0,010(2)	0,002(2)
O(4)	0,035(2)	0,051(3)	0,034(3)	-0,018(2)	-0,012(2)	0,007(2)
O(5)	0,033(2)	0,042(2)	0,020(2)	-0,011(2)	-0,004(2)	-0,008(2)
O(6)	0,029(2)	0,067(3)	0,034(3)	0,001(2)	-0,006(2)	-0,013(2)
O(7)	0,054(3)	0,037(2)	0,023(3)	-0,012(2)	-0,002(2)	-0,011(2)
O(8)	0,032(2)	0,032(2)	0,029(3)	-0,008(2)	-0,007(2)	-0,002(2)
O(9)	0,070(4)	0,120(6)	0,104(6)	-0,063(5)	-0,036(4)	0,052(4)
O(10)	0,049(3)	0,061(3)	0,072(5)	-0,017(3)	-0,018(3)	0,003(3)
O(11)	0,033(2)	0,068(3)	0,024(3)	-0,015(2)	-0,009(2)	0,013(2)
C(1)	0,022(2)	0,039(3)	0,028(4)	-0,007(2)	-0,005(2)	-0,004(2)
C(2)	0,021(3)	0,113(7)	0,051(5)	-0,028(5)	-0,009(3)	-0,006(3)
C(3)	0,045(3)	0,031(3)	0,023(4)	-0,009(2)	0,004(3)	-0,002(2)
C(4)	0,115(7)	0,049(4)	0,040(6)	-0,024(4)	-0,019(5)	0,007(5)
C(5)	0,038(3)	0,038(3)	0,020(4)	-0,010(2)	0,001(2)	-0,015(2)
C(6)	0,062(4)	0,058(5)	0,038(5)	-0,008(3)	0,006(3)	-0,025(4)

Atom	U <sup>11</sup>	U <sup>22</sup>	U <sup>33</sup>	U <sup>23</sup>	U <sup>13</sup>	U <sup>12</sup>
C(7)	0,033(3)	0,024(3)	0,025(3)	-0,003(2)	-0,006(2)	-0,002(2)
C(8)	0,062(4)	0,045(4)	0,049(5)	-0,011(3)	0,021(4)	-0,024(3)
C(9)	0,045(4)	0,064(5)	0,051(6)	-0,001(4)	-0,003(3)	0,018(4)
C(10)	0,061(5)	0,105(8)	0,066(7)	-0,017(5)	-0,019(4)	0,044(5)

**Tabelle 10.3.3: Ausgewählte Bindungslängen [pm] von [Dy<sub>2</sub>Co(OAc)<sub>8</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] · (HOAc)<sub>2</sub>.**

Dy-Dy*	407,58(9)	Dy-O(8)	258,6(4)	O(3)-C(3)	128,1(7)
Co-Dy	359,13(6)	Dy-O(8*)	233,0(4)	O(4)-C(3)	122,7(8)
Dy-O(2)	233,3(3)	Dy-O(11)	232,5(4)	O(5)-C(5)	127,3(7)
Dy-O(3)	243,4(4)	Co-O(1)	203,9(4)	O(6)-C(5)	125,1(8)
Dy-O(4)	249,1(4)	Co-O(3)	211,9(4)	O(7)-C(7)	125,1(7)
Dy-O(5)	251,4(4)	Co-O(5)	211,7(4)	O(8)-C(7)	127,7(7)
Dy-O(6)	241,1(4)	O(1)-C(1)	123,9(7)	O(9)-C(9)	122(1)
Dy-O(7)	240,3(4)	O(2)-C(1)	126,3(7)	O(10)-C(9)	132(1)

Symmetrioperation zur Erzeugung äquivalenter Atome: \* = -x, 2-y, 1-z

**Tabelle 10.3.4: Ausgewählte Winkel [grad] von [Dy<sub>2</sub>Co(OAc)<sub>8</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] · (HOAc)<sub>2</sub>.**

Dy-Co-Dy#	180,0(1)	O(2)-Dy-O(8*)	80,3(1)	O(6)-Dy-O(8*)	85,0(2)
Dy-Dy*-Co\$	138,36(1)	O(2)-Dy-O(11)	145,0(2)	O(6)-Dy-O(11)	78,7(2)
Dy-O(8)-Dy*	111,9(2)	O(3)-Dy-O(4)	52,3(2)	O(7)-Dy-O(8)	51,6(1)
Dy-O(3)-Co	103,9(2)	O(3)-Dy-O(5)	67,8(2)	O(7)-Dy-O(8*)	119,6(2)
Dy-O(5)-Co	101,4(2)	O(3)-Dy-O(6)	90,3(2)	O(7)-Dy-O(11)	87,1(2)
Dy-O(2)-C(1)	136,8(4)	O(3)-Dy-O(7)	75,8(2)	O(8)-Dy-O(8*)	68,1(2)
Dy-O(3)-C(3)	94,6(4)	O(3)-Dy-O(8)	124,5(2)	O(8)-Dy-O(11)	71,9(2)
Dy-O(4)-C(3)	93,3(3)	O(3)-Dy-O(8*)	153,9(1)	O(8*)-Dy-O(11)	76,8(2)
Dy-O(5)-C(5)	91,6(4)	O(3)-Dy-O(11)	127,4(2)	O(1)-Co-O(1#)	180,0(1)
Dy-O(6)-C(5)	97,0(3)	O(4)-Dy-O(5)	97,6(2)	O(1)-Co-O(3)	90,8(2)
Dy-O(7)-C(7)	99,4(3)	O(4)-Dy-O(6)	75,5(2)	O(1)-Co-O(3#)	89,2(2)
Dy-O(8)-C(7)	157,6(4)	O(4)-Dy-O(7)	73,3(2)	O(1)-Co-O(5)	89,8(2)
Dy-O(8*)-C(7*)	90,0(3)	O(4)-Dy-O(8)	115,7(2)	O(1)-Co-O(5#)	90,2(2)
Co-O(1)-C(1)	133,2(3)	O(4)-Dy-O(8*)	148,5(2)	O(3)-Co-O(3#)	180,0(2)
Co-O(3)-C(3)	132,7(4)	O(4)-Dy-O(11)	75,3(2)	O(3)-Co-O(5)	81,3(2)
Co-O(5)-C(5)	124,4(4)	O(5)-Dy-O(6)	52,4(2)	O(3)-Co-O(5#)	98,8(2)
O(2)-Dy-O(3)	81,6(2)	O(5)-Dy-O(7)	138,9(2)	O(5)-Co-O(5#)	180,0(1)
O(2)-Dy-O(4)	131,2(2)	O(5)-Dy-O(8)	145,1(1)	O(1)-C(1)-O(2)	125,4(5)
O(2)-Dy-O(5)	75,0(2)	O(5)-Dy-O(8*)	89,4(2)	O(3)-C(3)-O(4)	119,7(5)
O(2)-Dy-O(6)	125,3(2)	O(5)-Dy-O(11)	130,3(2)	O(5)-C(5)-O(6)	119,0(5)
O(2)-Dy-O(7)	81,6(2)	O(6)-Dy-O(7)	148,1(2)	O(7)-C(7)-O(8)	119,0(5)
O(2)-Dy-O(8)	75,2(1)	O(6)-Dy-O(8)	143,6(2)	O(9)-C(9)-O(10)	123,7(7)

Symmetrioperationen zur Erzeugung äquivalenter Atome: # = -x, 2-y, -z; \* = -x, 2-y, 1-z; \$ = x, y, 1+z

## 10.4 $\text{Mn}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})$

**Tabelle 10.4.1:** Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ( $\text{\AA}^2 \cdot 10^{-3}$ ) von  $\text{Mn}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})$ .

Atom	Lage	x/a	y/b	z/c	$U_{\text{(eq)}}$
Mn(1)	4a	0,8738(2)	0,48295(6)	0,21263(5)	0,0455(3)
Mn(2)	4a	0,5460(2)	0,55961(5)	0,18402(5)	0,0447(3)
Mn(3)	4a	0,2077(2)	0,48079(6)	0,14436(5)	0,0424(3)
O(1)	4a	0,6598(7)	0,4711(3)	0,1636(2)	0,063(2)
O(2)	4a	0,4223(8)	0,4472(3)	0,1687(2)	0,074(2)
O(3)	4a	0,4813(7)	0,5699(2)	0,0928(2)	0,054(2)
O(4)	4a	0,3006(7)	0,5058(2)	0,0645(2)	0,059(2)
O(5)	4a	0,5368(7)	0,6583(2)	0,1866(2)	0,054(2)
O(6)	4a	0,413(1)	0,6831(3)	0,1068(3)	0,130(4)
O(7)	4a	0,2902(6)	0,5621(2)	0,1986(2)	0,052(2)
O(8)	4a	0,1160(6)	0,5038(2)	0,2370(2)	0,047(2)
O(9)	4a	0,1079(7)	0,3971(2)	0,1430(2)	0,061(2)
O(10)	4a	-0,0642(8)	0,3966(2)	0,2151(3)	0,062(2)
O(11)	4a	0,9828(6)	0,5219(2)	0,1266(2)	0,046(1)
O(12)	4a	0,8111(7)	0,5750(2)	0,1746(2)	0,054(2)
O(13)	4a	0,7827(7)	0,4979(2)	0,2940(2)	0,055(2)
O(14)	4a	0,5752(7)	0,5531(3)	0,2742(2)	0,063(2)
C(1)	4a	0,555(1)	0,4356(4)	0,1500(3)	0,052(2)
C(2)	4a	0,580(1)	0,3856(3)	0,1103(3)	0,048(2)
C(3)	4a	0,720(1)	0,3738(5)	0,0890(4)	0,082(3)
C(4)	4a	0,748(2)	0,3256(6)	0,0511(5)	0,109(5)
C(5)	4a	0,630(2)	0,2938(5)	0,0341(5)	0,095(4)
C(6)	4a	0,491(2)	0,3024(6)	0,0543(6)	0,142(6)
C(7)	4a	0,466(2)	0,3530(5)	0,0896(6)	0,123(5)
C(8)	4a	0,395(1)	0,5467(4)	0,0531(3)	0,052(2)
C(9)	4a	0,410(1)	0,5705(3)	-0,0076(3)	0,047(2)
C(10)	4a	0,515(1)	0,6101(4)	-0,0218(4)	0,073(3)
C(11)	4a	0,517(2)	0,6325(5)	-0,0792(6)	0,100(4)
C(12)	4a	0,420(2)	0,6110(6)	-0,1207(5)	0,102(4)
C(13)	4a	0,317(2)	0,5698(5)	-0,1070(4)	0,091(4)
C(14)	4a	0,313(2)	0,5452(4)	-0,0506(4)	0,076(3)
C(15)	4a	0,475(1)	0,6957(3)	0,1578(4)	0,062(3)
C(16)	4a	0,470(2)	0,7590(3)	0,1742(4)	0,055(2)
C(17)	4a	0,555(2)	0,7774(4)	0,2186(5)	0,095(4)
C(18)	4a	0,556(2)	0,8337(5)	0,2359(5)	0,115(5)
C(19)	4a	0,475(2)	0,8758(4)	0,2052(5)	0,091(4)
C(20)	4a	0,393(2)	0,8584(5)	0,1600(5)	0,116(5)
C(21)	4a	0,388(2)	0,7986(4)	0,1450(5)	0,105(4)
C(22)	4a	0,199(1)	0,5497(4)	0,2404(3)	0,047(2)
C(23)	4a	0,1882(9)	0,5899(3)	0,2923(4)	0,047(2)
C(24)	4a	0,262(1)	0,6420(4)	0,2940(4)	0,069(3)
C(25)	4a	0,250(1)	0,6804(4)	0,3416(4)	0,070(3)
C(26)	4a	0,164(2)	0,6637(5)	0,3871(5)	0,097(4)
C(27)	4a	0,085(1)	0,6096(5)	0,3880(4)	0,078(3)
C(28)	4a	0,099(1)	0,5726(4)	0,3394(3)	0,064(3)
C(29)	4a	0,030(1)	0,3703(3)	0,1831(4)	0,055(2)
C(30)	4a	0,062(1)	0,3065(3)	0,1923(3)	0,047(2)
C(31)	4a	0,147(2)	0,2751(4)	0,1537(5)	0,083(3)

Atom	Lage	x/a	y/b	z/c	$U_{(eq)}$
C(32)	4a	0,180(2)	0,2149(5)	0,1665(6)	0,104(5)
C(33)	4a	0,126(2)	0,1908(5)	0,2163(8)	0,117(6)
C(34)	4a	0,038(2)	0,2203(4)	0,2521(6)	0,104(5)
C(35)	4a	0,003(1)	0,2796(4)	0,2412(4)	0,079(3)
C(36)	4a	0,9041(9)	0,5700(4)	0,1324(3)	0,045(2)
C(37)	4a	0,925(1)	0,6182(3)	0,0906(3)	0,044(2)
C(38)	4a	1,015(1)	0,6135(4)	0,0419(4)	0,075(3)
C(39)	4a	1,036(2)	0,6615(5)	0,0048(4)	0,120(5)
C(40)	4a	0,960(2)	0,7117(5)	0,0151(5)	0,112(5)
C(41)	4a	0,867(2)	0,7178(4)	0,0632(5)	0,087(3)
C(42)	4a	0,849(1)	0,6713(4)	0,1016(4)	0,062(3)
C(43)	4a	0,669(1)	0,5270(4)	0,3091(3)	0,052(2)
C(44)	4a	0,639(1)	0,5348(3)	0,3739(3)	0,051(2)
C(45)	4a	0,732(1)	0,5048(3)	0,4138(3)	0,064(3)
C(46)	4a	0,6968(2)	0,5102(5)	0,4734(4)	0,093(4)
C(47)	4a	0,576(2)	0,5448(6)	0,4915(4)	0,116(5)
C(48)	4a	0,488(2)	0,5748(5)	0,4515(4)	0,089(4)
C(49)	4a	0,520(1)	0,5691(4)	0,3929(4)	0,065(3)

**Tabelle 10.4.2: Anisotrope Auslenkungsparameter ( $\text{\AA}^2 \cdot 10^{-3}$ ) von  $\text{Mn}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})$ .**

Atom	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{23}$	$U^{13}$	$U^{12}$
Mn(1)	0,0412(9)	0,0478(7)	0,0476(7)	0,0020(7)	0,0041(6)	-0,0001(7)
Mn(2)	0,0453(9)	0,0425(7)	0,0462(7)	0,0022(6)	-0,0002(6)	0,0007(7)
Mn(3)	0,0384(8)	0,0444(7)	0,0444(6)	0,0021(6)	0,0022(6)	-0,0010(6)
O(1)	0,058(5)	0,065(4)	0,064(4)	-0,017(3)	-0,009(3)	-0,015(3)
O(2)	0,042(5)	0,108(5)	0,071(4)	-0,024(4)	-0,008(3)	0,026(4)
O(3)	0,056(5)	0,053(4)	0,052(3)	0,009(3)	-0,001(3)	-0,003(3)
O(4)	0,069(4)	0,055(4)	0,054(3)	0,006(3)	0,005(3)	-0,019(3)
O(5)	0,056(4)	0,043(3)	0,064(3)	-0,001(3)	-0,001(3)	0,003(3)
O(6)	0,22(1)	0,050(4)	0,123(6)	-0,005(4)	-0,113(7)	0,017(5)
O(7)	0,047(4)	0,059(3)	0,049(3)	0,000(3)	-0,003(3)	0,003(3)
O(8)	0,045(4)	0,041(3)	0,055(3)	-0,005(2)	0,002(3)	-0,008(3)
O(9)	0,064(5)	0,048(3)	0,070(4)	0,009(3)	0,012(4)	-0,007(3)
O(10)	0,065(5)	0,041(3)	0,080(4)	0,002(3)	0,023(4)	-0,004(3)
O(11)	0,048(4)	0,037(3)	0,053(3)	0,008(3)	-0,002(2)	0,008(3)
O(12)	0,049(4)	0,066(4)	0,047(3)	0,010(3)	0,010(3)	0,001(3)
O(13)	0,050(4)	0,064(4)	0,052(3)	0,002(3)	0,012(3)	0,013(3)
O(14)	0,061(5)	0,081(4)	0,045(3)	-0,002(3)	0,004(3)	0,021(4)
C(1)	0,047(6)	0,064(5)	0,044(4)	0,000(5)	-0,014(5)	0,006(5)
C(2)	0,049(7)	0,042(5)	0,054(5)	-0,010(4)	0,003(4)	-0,002(4)
C(3)	0,061(8)	0,106(8)	0,081(7)	-0,033(6)	0,005(6)	0,013(7)
C(4)	0,09(1)	0,14(2)	0,101(9)	-0,059(8)	0,022(7)	0,021(9)
C(5)	0,13(1)	0,068(8)	0,090(9)	-0,015(6)	0,008(9)	0,029(8)
C(6)	0,15(2)	0,12(1)	0,16(2)	-0,08(1)	0,04(1)	-0,05(1)
C(7)	0,063(9)	0,14(1)	0,17(2)	-0,08(1)	0,043(8)	-0,043(8)
C(8)	0,057(7)	0,057(6)	0,043(4)	-0,003(4)	0,006(4)	-0,001(5)
C(9)	0,061(7)	0,034(5)	0,047(5)	0,003(4)	0,010(4)	-0,005(4)
C(10)	0,092(9)	0,065(6)	0,062(6)	0,008(5)	0,024(5)	-0,011(6)
C(11)	0,12(1)	0,082(8)	0,099(9)	0,029(7)	0,038(8)	-0,001(8)
C(12)	0,14(2)	0,101(9)	0,067(8)	0,024(7)	0,032(8)	0,019(9)
C(13)	0,12(1)	0,110(9)	0,039(5)	0,009(6)	0,002(6)	0,018(8)
C(14)	0,069(8)	0,103(9)	0,057(6)	0,005(5)	0,012(5)	0,012(6)

Atom	U <sup>11</sup>	U <sup>22</sup>	U <sup>33</sup>	U <sup>23</sup>	U <sup>13</sup>	U <sup>12</sup>
C(15)	0,082(8)	0,037(5)	0,067(6)	-0,005(4)	-0,023(5)	0,012(5)
C(16)	0,071(7)	0,040(5)	0,053(5)	-0,008(4)	0,003(5)	0,005(5)
C(17)	0,13(1)	0,027(5)	0,123(9)	-0,017(6)	-0,057(9)	0,022(6)
C(18)	0,15(2)	0,087(9)	0,113(9)	-0,034(7)	-0,063(9)	0,045(9)
C(19)	0,12(1)	0,050(6)	0,101(8)	-0,016(6)	-0,028(8)	0,027(6)
C(20)	0,16(1)	0,057(7)	0,13(1)	-0,010(7)	-0,06(1)	0,039(7)
C(21)	0,16(2)	0,045(6)	0,107(8)	0,009(6)	-0,060(9)	0,026(7)
C(22)	0,034(6)	0,056(6)	0,049(5)	-0,004(4)	-0,009(4)	0,004(5)
C(23)	0,044(6)	0,038(4)	0,059(5)	-0,005(4)	-0,009(5)	-0,002(4)
C(24)	0,053(7)	0,090(7)	0,064(6)	-0,010(5)	-0,004(5)	0,012(5)
C(25)	0,086(9)	0,055(6)	0,068(7)	-0,030(5)	0,002(6)	0,009(5)
C(26)	0,10(2)	0,11(1)	0,080(8)	-0,047(7)	-0,013(7)	0,024(8)
C(27)	0,081(9)	0,078(7)	0,077(7)	-0,008(6)	0,006(6)	0,017(6)
C(28)	0,058(7)	0,088(7)	0,047(5)	-0,006(5)	0,003(4)	0,010(5)
C(29)	0,053(6)	0,048(5)	0,063(5)	0,000(5)	-0,012(5)	-0,010(5)
C(30)	0,060(6)	0,023(4)	0,057(5)	-0,003(4)	-0,006(4)	-0,005(4)
C(31)	0,078(9)	0,062(7)	0,110(8)	-0,008(6)	0,011(7)	-0,001(5)
C(32)	0,10(1)	0,030(6)	0,18(2)	-0,017(7)	-0,010(9)	0,000(6)
C(33)	0,10(1)	0,030(7)	0,23(2)	0,022(9)	-0,09(2)	-0,005(6)
C(34)	0,137(2)	0,035(6)	0,14(1)	0,029(7)	-0,063(9)	-0,016(7)
C(35)	0,091(9)	0,069(7)	0,078(7)	0,007(6)	-0,026(6)	-0,029(6)
C(36)	0,026(6)	0,067(6)	0,043(5)	-0,004(4)	-0,005(4)	0,000(4)
C(37)	0,054(6)	0,030(4)	0,049(5)	0,011(4)	0,006(4)	0,007(4)
C(38)	0,12(1)	0,044(5)	0,060(6)	0,016(5)	0,024(6)	0,017(6)
C(39)	0,18(2)	0,11(1)	0,070(7)	0,055(7)	0,058(8)	0,01(1)
C(40)	0,18(2)	0,051(6)	0,106(9)	0,028(6)	0,043(9)	0,004(8)
C(41)	0,11(1)	0,046(6)	0,102(8)	0,018(6)	0,015(7)	0,023(6)
C(42)	0,065(8)	0,073(7)	0,049(5)	0,008(5)	0,003(5)	-0,005(5)
C(43)	0,048(7)	0,059(6)	0,050(5)	-0,004(5)	0,001(4)	-0,012(4)
C(44)	0,040(6)	0,070(6)	0,043(5)	-0,009(4)	0,007(4)	0,008(4)
C(45)	0,078(8)	0,062(6)	0,053(5)	0,016(5)	0,007(5)	0,012(5)
C(46)	0,11(1)	0,107(9)	0,056(6)	0,027(6)	0,003(7)	0,036(8)
C(47)	0,10(1)	0,21(2)	0,040(6)	-0,009(7)	0,008(6)	0,01(1)
C(48)	0,10(1)	0,111(9)	0,060(6)	-0,021(6)	0,006(6)	0,025(7)
C(49)	0,077(9)	0,073(7)	0,045(5)	0,005(5)	-0,002(5)	0,006(5)

Tabelle 10.4.3: Ausgewählte Bindungslängen [pm] von Mn<sub>3</sub>(OBz)<sub>6</sub>(HOBz).

Mn(1)-Mn(2)	342,0(2)	Mn(2)-O(5)	223,3(5)	O(3)-C(8)	129(1)
Mn(1)-Mn(3*)	331,5(2)	Mn(2)-O(7)	226,8(6)	O(4)-C(8)	127(1)
Mn(2)-Mn(3)	357,6(2)	Mn(2)-O(12)	236,0(7)	O(5)-C(15)	119,9(8)
Mn(1)-O(1)	219,9(6)	Mn(2)-O(14)	207,2(5)	O(6)-C(15)	131,3(9)
Mn(1)-O(8)	224,5(6)	Mn(3)-O(2)	210,4(6)	O(7)-C(22)	127,4(9)
Mn(1)-O(10)	202,9(6)	Mn(3)-O(4)	207,0(5)	O(8)-C(22)	127,1(9)
Mn(1)-O(11)	235,0(5)	Mn(3)-O(7)	233,0(5)	O(9)-C(29)	129(1)
Mn(1)-O(12)	232,0(5)	Mn(3)-O(8)	231,5(5)	O(10)-C(29)	125(1)
Mn(1)-O(13)	204,5(5)	Mn(3)-O(9)	208,5(5)	O(11)-C(36)	129,5(9)
Mn(2)-O(1)	228,4(6)	Mn(3)-O(11#)	221,7(5)	O(12)-C(36)	126,6(8)
Mn(2)-O(2)	278,4(7)	O(1)-C(1)	125,8(9)	O(13)-C(43)	124,3(9)
Mn(2)-O(3)	216,5(5)	O(2)-C(1)	127(1)	O(14)-C(43)	128,8(9)

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* = -1+x; y; z; # = 1+x; y; z.

**Tabelle 10.4.4: Ausgewählte Winkel [grad] von Mn<sub>3</sub>(OBz)<sub>6</sub>(HOBz).**

Mn(1)-Mn(2)-Mn(3)	119,52(4)	O(1)-Mn(1)-O(10)	97,2(2)	O(5)-Mn(2)-O(7)	86,3(2)
Mn(1)-Mn(3*)-Mn(2*)	127,37(5)	O(1)-Mn(1)-O(11)	88,3(2)	O(5)-Mn(2)-O(12)	83,7(2)
Mn(2)-Mn(1)-Mn(3*)	131,37(5)	O(1)-Mn(1)-O(12)	73,6(2)	O(5)-Mn(2)-O(14)	92,8(2)
Mn(1)-O(1)-Mn(2)	99,4(2)	O(1)-Mn(1)-O(13)	98,4(2)	O(7)-Mn(2)-O(12)	169,6(2)
Mn(1)-O(8*)-Mn(3*)	93,3(2)	O(8*)-Mn(1)-O(10)	86,7(2)	O(7)-Mn(2)-O(14)	88,8(2)
Mn(1)-O(11)-Mn(3*)	93,0(2)	O(8*)-Mn(1)-O(11)	75,1(2)	O(12)-Mn(2)-O(14)	88,7(2)
Mn(1)-O(12)-Mn(2)	93,9(2)	O(8*)-Mn(1)-O(12)	97,4(2)	O(2)-Mn(3)-O(4)	88,7(2)
Mn(2)-O(2)-Mn(3)	93,0(2)	O(8*)-Mn(1)-O(13)	96,4(2)	O(2)-Mn(3)-O(7)	82,4(2)
Mn(2)-O(7)-Mn(3)	102,1(2)	O(10)-Mn(1)-O(11)	105,9(2)	O(2)-Mn(3)-O(8)	98,7(2)
Mn(1)-O(1)-C(1)	145,5(6)	O(10)-Mn(1)-O(12)	159,6(2)	O(2)-Mn(3)-O(9)	93,0(3)
Mn(1)-O(8*)-C(22*)	136,8(5)	O(10)-Mn(1)-O(13)	103,8(2)	O(2)-Mn(3)-O(11#)	174,3(2)
Mn(1)-O(10)-C(29)	128,2(5)	O(11)-Mn(1)-O(12)	56,6(2)	O(4)-Mn(3)-O(7)	97,3(2)
Mn(1)-O(11)-C(36)	90,8(4)	O(11)-Mn(1)-O(13)	148,4(2)	O(4)-Mn(3)-O(8)	151,0(2)
Mn(1)-O(12)-C(36)	92,9(5)	O(12)-Mn(1)-O(13)	95,6(2)	O(4)-Mn(3)-O(9)	113,6(2)
Mn(1)-O(13)-C(43)	130,6(5)	O(1)-Mn(2)-O(2)	49,1(2)	O(4)-Mn(3)-O(11#)	94,3(2)
Mn(2)-O(1)-C(1)	106,9(6)	O(1)-Mn(2)-O(3)	90,8(2)	O(7)-Mn(3)-O(8)	56,5(2)
Mn(2)-O(2)-C(1)	82,7(5)	O(1)-Mn(2)-O(5)	153,7(2)	O(7)-Mn(3)-O(9)	148,7(2)
Mn(2)-O(3)-C(8)	141,4(5)	O(1)-Mn(2)-O(7)	118,9(2)	O(7)-Mn(3)-O(11#)	92,4(2)
Mn(2)-O(5)-C(15)	134,9(6)	O(1)-Mn(2)-O(12)	71,3(2)	O(8)-Mn(3)-O(9)	94,1(2)
Mn(2)-O(7)-C(22)	136,4(5)	O(1)-Mn(2)-O(14)	94,9(2)	O(8)-Mn(3)-O(11#)	76,3(2)
Mn(2)-O(12)-C(36)	133,7(5)	O(2)-Mn(2)-O(3)	82,9(2)	O(9)-Mn(3)-O(11#)	90,2(2)
Mn(2)-O(14)-C(43)	136,3(5)	O(2)-Mn(2)-O(5)	154,3(2)	O(1)-C(1)-O(2)	117,1(8)
Mn(3)-O(2)-C(1)	144,0(5)	O(2)-Mn(2)-O(7)	69,9(2)	O(3)-C(8)-O(4)	122,5(7)
Mn(3)-O(4)-C(8)	129,4(5)	O(2)-Mn(2)-O(12)	120,4(2)	O(5)-C(15)-O(6)	121,2(7)
Mn(3)-O(7)-C(22)	91,6(5)	O(2)-Mn(2)-O(14)	96,2(2)	O(7)-C(22)-O(8)	119,5(7)
Mn(3)-O(8)-C(22)	92,4(5)	O(3)-Mn(2)-O(5)	84,8(2)	O(9)-C(29)-O(10#)	122,5(7)
Mn(3)-O(9)-C(29)	129,6(5)	O(3)-Mn(2)-O(7)	83,0(2)	O(11)-C(36)-O(12)	119,7(7)
Mn(3)-O(11#)-C(36#)	143,8(5)	O(3)-Mn(2)-O(12)	98,9(2)	O(13)-C(43)-O(14)	125,8(7)
O(1)-Mn(1)-O(8*)	163,3(2)	O(3)-Mn(2)-O(14)	171,6(2)		

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* = -1+x; y; z; # = 1+x; y; z.

## 10.5 $\text{Mn}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})_2$

**Tabelle 10.5.1:** Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ( $\text{\AA}^2 \cdot 10^{-3}$ ) von  $\text{Mn}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})_2$ .

Atom	Lage	x/a	y/b	z/c	$U_{\text{(eq)}}$
Mn(1)	8c	0,25810(7)	0,15803(4)	0,18529(3)	0,0377(3)
Mn(2)	8c	0,43382(7)	0,10132(5)	0,23094(4)	0,0384(3)
Mn(3)	8c	0,54064(7)	0,14581(4)	0,33110(4)	0,0381(3)
O(1)	8c	0,4855(3)	0,1579(2)	0,4045(2)	0,050(2)
O(2)	8c	0,4402(4)	0,0757(3)	0,4290(2)	0,071(2)
O(3)	8c	0,4681(3)	0,0304(2)	0,2669(2)	0,050(2)
O(4)	8c	0,5066(3)	0,0592(2)	0,3418(2)	0,046(2)
O(5)	8c	0,7044(3)	0,0349(2)	0,3803(2)	0,052(2)
O(6)	8c	0,6623(3)	0,1181(2)	0,3567(2)	0,039(2)
O(7)	8c	0,0789(3)	0,2275(2)	0,1707(2)	0,053(2)
O(8)	8c	0,2167(3)	0,2357(2)	0,1622(2)	0,047(2)
O(9)	8c	0,5523(3)	0,1410(2)	0,2501(2)	0,037(1)
O(10)	8c	0,6880(3)	0,1604(2)	0,2475(2)	0,053(2)
O(11)	8c	0,1960(3)	0,0137(2)	0,2098(2)	0,062(2)
O(12)	8c	0,2982(3)	0,0718(2)	0,2282(2)	0,048(1)
O(13)	8c	0,3396(3)	0,1358(2)	0,1276(2)	0,044(2)
O(14)	8c	0,4430(3)	0,0847(2)	0,1570(2)	0,041(1)
O(15)	8c	0,3649(3)	0,1828(2)	0,2303(2)	0,041(2)
O(16)	8c	0,4110(3)	0,1573(2)	0,3032(2)	0,048(2)
C(1)	8c	0,4444(5)	0,1295(4)	0,4328(3)	0,054(2)
C(2)	8c	0,3909(6)	0,1531(5)	0,4734(3)	0,057(2)
C(3)	8c	0,4015(6)	0,2076(5)	0,4824(3)	0,074(3)
C(4)	8c	0,3492(9)	0,2318(4)	0,5179(4)	0,097(4)
C(5)	8c	0,2914(8)	0,2002(7)	0,5411(4)	0,101(5)
C(6)	8c	0,2811(7)	0,1464(6)	0,5314(4)	0,095(4)
C(7)	8c	0,3322(6)	0,1205(4)	0,4966(3)	0,072(3)
C(8)	8c	0,4915(5)	0,0202(3)	0,3111(3)	0,050(2)
C(9)	8c	0,4996(5)	-0,0367(3)	0,3264(3)	0,050(2)
C(10)	8c	0,4712(7)	-0,0775(4)	0,2973(3)	0,110(4)
C(11)	8c	0,4804(9)	-0,1309(5)	0,3090(5)	0,159(6)
C(12)	8c	0,5212(8)	-0,1454(5)	0,3509(5)	0,124(5)
C(13)	8c	0,5497(7)	-0,1057(5)	0,3805(4)	0,100(4)
C(14)	8c	0,5391(6)	-0,0512(4)	0,3687(3)	0,070(3)
C(15)	8c	0,6769(5)	0,0816(4)	0,3902(3)	0,049(2)
C(16)	8c	0,6639(4)	0,0965(4)	0,4426(3)	0,045(2)
C(17)	8c	0,6615(5)	0,1505(5)	0,4579(3)	0,073(3)
C(18)	8c	0,6504(8)	0,1646(6)	0,5059(5)	0,115(5)
C(19)	8c	0,636(1)	0,1248(8)	0,5400(6)	0,152(9)
C(20)	8c	0,6382(9)	0,0720(7)	0,5266(5)	0,134(6)
C(21)	8c	0,6504(6)	0,0562(4)	0,4773(3)	0,085(3)
C(22)	8c	0,1432(6)	0,2565(3)	0,1652(3)	0,045(2)
C(23)	8c	0,1355(5)	0,3157(3)	0,1634(2)	0,040(2)
C(24)	8c	0,0595(6)	0,3407(4)	0,1678(3)	0,066(2)
C(25)	8c	0,0526(8)	0,3973(5)	0,1663(4)	0,104(4)
C(26)	8c	0,120(1)	0,4299(5)	0,1601(4)	0,095(5)
C(27)	8c	0,1952(7)	0,4052(4)	0,1555(3)	0,076(3)
C(28)	8c	0,2046(5)	0,3488(4)	0,1575(2)	0,058(2)
C(29)	8c	0,6188(5)	0,1584(3)	0,2270(3)	0,042(2)

Atom	Lage	x/a	y/b	z/c	$U_{(eq)}$
C(30)	8c	0,6092(5)	0,1758(3)	0,1748(3)	0,047(2)
C(31)	8c	0,5362(6)	0,1996(3)	0,1579(3)	0,054(2)
C(32)	8c	0,5285(6)	0,2154(3)	0,1092(3)	0,064(3)
C(33)	8c	0,5936(8)	0,2057(4)	0,0767(3)	0,081(3)
C(34)	8c	0,6670(8)	0,1850(4)	0,0940(4)	0,098(4)
C(35)	8c	0,6754(5)	0,1688(4)	0,1430(3)	0,079(3)
C(36)	8c	0,2436(5)	0,0386(3)	0,2410(3)	0,046(2)
C(37)	8c	0,2292(5)	0,0239(3)	0,2940(3)	0,044(2)
C(38)	8c	0,1627(6)	-0,0071(4)	0,3068(4)	0,082(3)
C(39)	8c	0,1468(7)	-0,0195(5)	0,3557(4)	0,118(5)
C(40)	8c	0,1987(7)	-0,0021(4)	0,3905(4)	0,076(3)
C(41)	8c	0,2643(7)	0,0288(4)	0,3786(3)	0,092(3)
C(42)	8c	0,2797(5)	0,0431(4)	0,3298(3)	0,071(3)
C(43)	8c	0,4023(5)	0,1069(3)	0,1224(3)	0,043(2)
C(44)	8c	0,4344(5)	0,0960(3)	0,0704(2)	0,040(2)
C(45)	8c	0,3881(5)	0,1117(3)	0,0301(3)	0,070(3)
C(46)	8c	0,4208(7)	0,1065(4)	-0,0170(3)	0,090(3)
C(47)	8c	0,4966(8)	0,0836(5)	-0,0235(4)	0,103(4)
C(48)	8c	0,5436(7)	0,0683(4)	0,0163(4)	0,106(4)
C(49)	8c	0,5112(6)	0,0746(4)	0,0642(3)	0,072(3)
C(50)	8c	0,3751(5)	0,1925(4)	0,2766(3)	0,048(2)
C(51)	8c	0,3447(5)	0,2444(4)	0,2978(3)	0,051(2)
C(52)	8c	0,3101(6)	0,2825(4)	0,2689(4)	0,090(4)
C(53)	8c	0,2803(8)	0,3312(5)	0,2881(4)	0,128(5)
C(54)	8c	0,2812(7)	0,3390(5)	0,3380(5)	0,115(4)
C(55)	8c	0,3152(7)	0,2999(5)	0,3676(4)	0,094(4)
C(56)	8c	0,3477(5)	0,2530(4)	0,3471(4)	0,074(3)

**Tabelle 10.5.2: Anisotrope Auslenkungsparameter ( $\text{\AA}^2 \cdot 10^{-3}$ ) von  $\text{Mn}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})_2$ .**

Atom	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{23}$	$U^{13}$	$U^{12}$
Mn(1)	0,0262(7)	0,0461(7)	0,0408(6)	-0,0039(6)	0,0000(6)	0,0000(6)
Mn(2)	0,0334(8)	0,0452(7)	0,0365(6)	-0,0043(6)	-0,0027(5)	0,0019(6)
Mn(3)	0,0318(7)	0,0471(7)	0,0356(6)	-0,0023(6)	-0,0001(6)	-0,0019(6)
O(1)	0,049(4)	0,062(4)	0,038(3)	-0,005(3)	0,008(3)	-0,001(3)
O(2)	0,083(5)	0,067(4)	0,063(4)	0,003(3)	0,015(4)	-0,016(4)
O(3)	0,065(4)	0,040(3)	0,046(3)	0,008(3)	-0,013(3)	0,007(3)
O(4)	0,047(4)	0,035(3)	0,056(4)	0,000(3)	-0,001(3)	-0,009(3)
O(5)	0,070(4)	0,038(4)	0,046(4)	0,010(3)	0,000(3)	0,005(3)
O(6)	0,026(3)	0,047(3)	0,045(3)	0,019(3)	-0,001(2)	0,001(2)
O(7)	0,050(4)	0,040(3)	0,069(4)	-0,004(3)	0,002(3)	-0,010(3)
O(8)	0,041(4)	0,039(3)	0,060(4)	0,008(3)	0,002(3)	0,003(3)
O(9)	0,026(3)	0,055(3)	0,030(3)	-0,002(2)	0,006(2)	-0,010(3)
O(10)	0,029(4)	0,091(4)	0,037(3)	0,009(3)	-0,004(2)	-0,007(3)
O(11)	0,067(4)	0,059(4)	0,060(4)	0,004(3)	-0,011(3)	-0,017(3)
O(12)	0,031(4)	0,063(4)	0,050(3)	0,000(3)	-0,006(3)	-0,009(3)
O(13)	0,032(4)	0,057(4)	0,044(3)	-0,008(3)	0,010(3)	0,014(3)
O(14)	0,043(4)	0,056(3)	0,024(3)	-0,009(2)	0,003(3)	0,008(3)
O(15)	0,031(3)	0,054(3)	0,037(3)	-0,011(3)	-0,008(3)	0,004(2)
O(16)	0,037(4)	0,059(4)	0,047(3)	-0,002(3)	-0,004(3)	0,009(3)
C(1)	0,030(6)	0,083(8)	0,049(6)	-0,008(6)	-0,010(5)	-0,004(6)



Atom	U <sup>11</sup>	U <sup>22</sup>	U <sup>33</sup>	U <sup>23</sup>	U <sup>13</sup>	U <sup>12</sup>
C(2)	0,055(7)	0,083(8)	0,034(5)	0,000(6)	-0,008(4)	0,001(6)
C(3)	0,078(8)	0,086(8)	0,059(7)	-0,010(6)	-0,003(5)	0,012(6)
C(4)	0,13(1)	0,078(9)	0,081(9)	-0,007(7)	-0,018(8)	0,023(8)
C(5)	0,10(2)	0,16(2)	0,046(7)	0,004(9)	0,018(6)	0,05(1)
C(6)	0,086(9)	0,15(1)	0,049(7)	0,014(8)	0,004(6)	0,008(9)
C(7)	0,058(8)	0,120(9)	0,038(6)	-0,007(6)	0,002(5)	0,004(6)
C(8)	0,041(6)	0,043(6)	0,068(7)	0,005(5)	0,009(5)	-0,004(4)
C(9)	0,053(6)	0,045(6)	0,051(6)	0,009(5)	-0,002(5)	-0,007(4)
C(10)	0,19(2)	0,057(7)	0,080(7)	0,008(6)	-0,052(8)	-0,003(8)
C(11)	0,29(2)	0,044(8)	0,14(2)	0,007(7)	-0,10(1)	-0,03(1)
C(12)	0,17(2)	0,051(8)	0,15(2)	0,022(8)	-0,04(1)	0,005(8)
C(13)	0,14(1)	0,071(8)	0,093(8)	0,045(7)	-0,039(7)	-0,019(8)
C(14)	0,080(8)	0,061(7)	0,071(7)	0,009(5)	-0,016(6)	0,000(6)
C(15)	0,048(7)	0,053(7)	0,044(6)	-0,007(5)	-0,005(4)	-0,013(5)
C(16)	0,035(6)	0,056(6)	0,045(5)	0,006(5)	-0,004(4)	0,010(5)
C(17)	0,072(7)	0,087(8)	0,061(7)	-0,010(6)	-0,006(5)	0,021(6)
C(18)	0,12(1)	0,14(2)	0,09(1)	-0,05(1)	-0,014(9)	0,01(1)
C(19)	0,11(1)	0,29(3)	0,06(1)	-0,04(1)	-0,004(8)	0,07(2)
C(20)	0,15(2)	0,20(2)	0,06(1)	0,06(1)	0,024(8)	0,03(1)
C(21)	0,091(8)	0,117(9)	0,046(7)	0,033(6)	-0,007(6)	-0,001(7)
C(22)	0,051(7)	0,054(6)	0,029(5)	0,001(4)	-0,002(4)	-0,010(5)
C(23)	0,048(6)	0,034(5)	0,036(5)	-0,002(4)	0,003(4)	0,000(4)
C(24)	0,061(7)	0,058(6)	0,079(6)	-0,007(5)	-0,015(5)	0,006(5)
C(25)	0,13(1)	0,071(9)	0,112(8)	-0,011(8)	-0,034(8)	0,045(8)
C(26)	0,18(2)	0,039(8)	0,065(7)	-0,005(6)	-0,015(9)	0,031(8)
C(27)	0,13(1)	0,045(7)	0,057(6)	-0,009(5)	0,015(6)	-0,024(7)
C(28)	0,072(7)	0,055(6)	0,048(5)	-0,006(5)	0,007(4)	-0,007(5)
C(29)	0,041(6)	0,051(5)	0,035(5)	-0,010(4)	-0,011(4)	0,012(5)
C(30)	0,036(6)	0,065(6)	0,039(5)	-0,006(4)	-0,003(4)	-0,010(4)
C(31)	0,061(7)	0,052(6)	0,049(6)	0,013(4)	-0,008(5)	-0,009(5)
C(32)	0,086(8)	0,046(6)	0,061(6)	0,008(5)	-0,013(6)	-0,011(5)
C(33)	0,12(1)	0,085(8)	0,036(6)	0,020(5)	-0,012(7)	-0,022(7)
C(34)	0,09(1)	0,15(1)	0,053(7)	0,018(7)	0,025(6)	-0,017(8)
C(35)	0,045(7)	0,144(9)	0,049(6)	0,029(6)	0,008(5)	-0,013(6)
C(36)	0,028(6)	0,051(6)	0,059(6)	-0,010(5)	-0,004(5)	-0,001(5)
C(37)	0,035(6)	0,049(5)	0,049(6)	0,008(4)	-0,005(4)	-0,009(4)
C(38)	0,091(8)	0,105(8)	0,051(7)	0,008(6)	-0,021(6)	-0,055(7)
C(39)	0,11(1)	0,17(1)	0,076(9)	0,018(8)	-0,010(8)	-0,095(9)
C(40)	0,065(8)	0,108(9)	0,057(7)	0,020(6)	0,011(6)	-0,006(7)
C(41)	0,069(9)	0,16(1)	0,053(7)	0,013(7)	-0,002(6)	-0,027(8)
C(42)	0,054(7)	0,108(8)	0,052(6)	0,011(6)	0,001(5)	-0,011(6)
C(43)	0,031(6)	0,035(5)	0,062(6)	-0,010(5)	0,001(5)	-0,016(4)
C(44)	0,027(5)	0,051(5)	0,042(5)	-0,003(4)	0,007(4)	0,002(4)
C(45)	0,060(7)	0,104(8)	0,046(6)	-0,006(5)	-0,009(5)	0,015(6)
C(46)	0,11(1)	0,125(9)	0,036(6)	0,006(6)	0,008(6)	0,019(8)
C(47)	0,13(2)	0,13(1)	0,047(7)	-0,025(7)	0,021(7)	0,020(9)
C(48)	0,090(9)	0,17(1)	0,062(7)	-0,033(7)	0,029(7)	0,042(8)
C(49)	0,069(8)	0,098(8)	0,048(6)	-0,013(5)	0,008(5)	0,018(6)
C(50)	0,016(5)	0,061(6)	0,066(7)	-0,005(6)	0,004(5)	-0,012(4)
C(51)	0,043(6)	0,052(6)	0,057(6)	-0,008(5)	-0,004(5)	0,001(5)
C(52)	0,12(1)	0,077(8)	0,077(7)	-0,031(7)	-0,029(7)	0,035(7)
C(53)	0,20(2)	0,086(9)	0,099(9)	-0,032(8)	-0,042(9)	0,066(9)
C(54)	0,15(1)	0,077(9)	0,12(1)	-0,051(8)	-0,012(9)	0,047(8)

Atom	U <sup>11</sup>	U <sup>22</sup>	U <sup>33</sup>	U <sup>23</sup>	U <sup>13</sup>	U <sup>12</sup>
C(55)	0,11(1)	0,11(1)	0,070(8)	-0,045(7)	0,006(7)	0,018(8)
C(56)	0,058(7)	0,097(8)	0,068(7)	-0,022(6)	-0,002(5)	0,020(6)

**Tabelle 10.5.3: Ausgewählte Bindungslängen [pm] von Mn<sub>3</sub>(OBz)<sub>6</sub>(HOBz)<sub>2</sub>.**

Mn(1)-Mn(2)	337,3(2)	Mn(2)-O(15)	227,2(5)	O(6)-C(15)	129,1(9)
Mn(1)-Mn(3*)	352,9(2)	Mn(2)-O(16)	241,0(5)	O(7)-C(22)	125,9(8)
Mn(2)-Mn(3)	338,3(2)	Mn(3)-O(1)	219,3(5)	O(8)-C(22)	128,6(8)
Mn(1)-O(6*)	214,4(5)	Mn(3)-O(4)	220,0(5)	O(9)-C(29)	130,8(8)
Mn(1)-O(8)	210,2(5)	Mn(3)-O(6)	217,8(5)	O(10)-C(29)	124,3(7)
Mn(1)-O(10*)	213,7(5)	Mn(3)-O(7#)	208,4(5)	O(11)-C(36)	128,7(8)
Mn(1)-O(12)	248,5(5)	Mn(3)-O(9)	220,2(4)	O(12)-C(36)	124,2(8)
Mn(1)-O(13)	210,7(5)	Mn(3)-O(16)	223,0(5)	O(13)-C(43)	123,5(8)
Mn(1)-O(15)	218,6(5)	O(1)-C(1)	122,4(9)	O(14)-C(43)	126,3(8)
Mn(2)-O(3)	205,8(5)	O(2)-C(1)	131,8(9)	O(15)-C(50)	128,5(8)
Mn(2)-O(9)	219,3(5)	O(3)-C(8)	127,7(9)	O(16)-C(50)	125,8(8)
Mn(2)-O(12)	229,2(5)	O(4)-C(8)	128,5(8)		
Mn(2)-O(14)	204,6(4)	O(5)-C(15)	124,9(8)		

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* = -0,5+x; y; 0,5-z; # = 0,5+x; y; 0,5-z.

**10.5.4: Ausgewählte Winkel [grad] von Mn<sub>3</sub>(OBz)<sub>6</sub>(HOBz)<sub>2</sub>.**

Mn(1)-Mn(2)-Mn(3)	125,79(4)	O(6*)-Mn(1)-O(10*)	94,9(2)	O(14)-Mn(2)-O(16)	156,2(2)
Mn(1)-Mn(3*)-Mn(2*)	115,29(4)	O(6*)-Mn(1)-O(12)	92,8(2)	O(15)-Mn(2)-O(16)	55,8(2)
Mn(2)-Mn(1)-Mn(3*)	145,87(4)	O(6*)-Mn(1)-O(13)	86,3(2)	O(1)-Mn(3)-O(4)	84,8(2)
Mn(1)-O(6)-Mn(3*)	109,4(2)	O(6*)-Mn(1)-O(15)	167,0(2)	O(1)-Mn(3)-O(6)	96,6(2)
Mn(1)-O(12)-Mn(2)	89,8(2)	O(8)-Mn(1)-O(10*)	93,6(2)	O(1)-Mn(3)-O(7#)	90,6(2)
Mn(1)-O(15)-Mn(2)	98,3(2)	O(8)-Mn(1)-O(12)	169,2(2)	O(1)-Mn(3)-O(9)	160,4(2)
Mn(2)-O(9)-Mn(3)	100,7(2)	O(8)-Mn(1)-O(13)	102,0(2)	O(1)-Mn(3)-O(16)	85,1(2)
Mn(2)-O(16)-Mn(3)	93,6(2)	O(8)-Mn(1)-O(15)	99,5(2)	O(4)-Mn(3)-O(6)	83,3(2)
Mn(1)-O(6*)-C(15*)	123,7(5)	O(10*)-Mn(1)-O(12)	76,2(2)	O(4)-Mn(3)-O(7#)	173,2(2)
Mn(1)-O(8)-C(22)	128,7(5)	O(10*)-Mn(1)-O(13)	164,4(2)	O(4)-Mn(3)-O(9)	95,8(2)
Mn(1)-O(10*)-C(29*)	148,1(5)	O(10*)-Mn(1)-O(15)	86,1(2)	O(4)-Mn(3)-O(16)	86,2(2)
Mn(1)-O(12)-C(36)	119,9(5)	O(12)-Mn(1)-O(13)	88,2(2)	O(6)-Mn(3)-O(7#)	92,3(2)
Mn(1)-O(13)-C(43)	137,4(5)	O(12)-Mn(1)-O(15)	76,7(2)	O(6)-Mn(3)-O(9)	102,9(2)
Mn(1)-O(15)-C(50)	133,9(5)	O(13)-Mn(1)-O(15)	89,8(2)	O(6)-Mn(3)-O(16)	169,1(2)
Mn(2)-O(3)-C(8)	133,2(5)	O(3)-Mn(2)-O(9)	91,6(2)	O(7#)-Mn(3)-O(9)	90,2(2)
Mn(2)-O(9)-C(29)	137,5(4)	O(3)-Mn(2)-O(12)	90,3(2)	O(7#)-Mn(3)-O(16)	98,4(2)
Mn(2)-O(12)-C(36)	149,9(5)	O(3)-Mn(2)-O(14)	106,0(2)	O(9)-Mn(3)-O(16)	75,4(2)
Mn(2)-O(14)-C(43)	126,9(5)	O(3)-Mn(2)-O(15)	150,2(2)	O(1)-C(1)-O(2)	122,7(8)
Mn(2)-O(15)-C(50)	95,2(5)	O(3)-Mn(2)-O(16)	97,7(2)	O(3)-C(8)-O(4)	121,1(7)
Mn(2)-O(16)-C(50)	89,6(5)	O(9)-Mn(2)-O(12)	165,4(2)	O(5)-C(15)-O(6)	122,7(7)
Mn(3)-O(1)-C(1)	135,0(6)	O(9)-Mn(2)-O(14)	104,8(2)	O(7)-C(22)-O(8)	122,6(8)
Mn(3)-O(4)-C(8)	132,1(5)	O(9)-Mn(2)-O(15)	92,2(2)	O(9)-C(29)-O(10#)	121,9(7)
Mn(3)-O(6)-C(15)	126,8(5)	O(9)-Mn(2)-O(16)	72,0(2)	O(11)-C(36)-O(12)	122,9(8)
Mn(3)-O(7#)-C(22#)	140,7(5)	O(12)-Mn(2)-O(14)	88,6(2)	O(13)-C(43)-O(14)	125,6(7)
Mn(3)-O(9)-C(29)	121,8(4)	O(12)-Mn(2)-O(15)	79,2(2)	O(15)-C(50)-O(16)	119,3(8)
Mn(3)-O(16)-C(50)	134,9(5)	O(12)-Mn(2)-O(16)	93,4(2)		
O(6*)-Mn(1)-O(8)	91,4(2)	O(14)-Mn(2)-O(15)	101,6(2)		

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* = -0,5+x; y; 0,5-z; # = 0,5+x; y; 0,5-z.

## 10.6 Mn<sub>19</sub>(OBz)<sub>38</sub>(HOBz)<sub>2</sub>

Tabelle 10.6.1: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ( $\text{\AA}^2 \cdot 10^{-3}$ ) von Mn<sub>19</sub>(OBz)<sub>38</sub>(HOBz)<sub>2</sub>.

Atom	Lage	x/a	y/b	z/c	U <sub>(eq)</sub>
Mn(1)	2b	0	0,5	0,3735(1)	0,0730(6)
Mn(2)	4c	0,08077(4)	0,57376(9)	0,36735(8)	0,0768(4)
Mn(3)	4c	0,14687(4)	0,54554(9)	0,25569(8)	0,0776(4)
Mn(4)	4c	0,18219(4)	0,53240(8)	0,09494(8)	0,0715(4)
Mn(5)	4c	0,25699(4)	0,46358(8)	0,11697(8)	0,0728(4)
Mn(6)	4c	0,32438(4)	0,33310(8)	0,12393(8)	0,0740(4)
Mn(7)	4c	0,33004(4)	0,16995(8)	0,03935(8)	0,0719(4)
Mn(8)	4c	0,37712(4)	0,31170(9)	0,24782(9)	0,0868(5)
Mn(9)	4c	0,43010(5)	0,3475(2)	0,3937(1)	0,1210(7)
Mn(10)	4c	0,42965(4)	0,2138(1)	0,53103(9)	0,0891(5)
O(1)	4c	0,0399(2)	0,5050(5)	0,4478(4)	0,105(3)
O(2)	4c	0,0688(2)	0,5969(6)	0,4894(5)	0,123(3)
O(3)	4c	-0,0039(2)	0,6173(4)	0,3613(4)	0,084(2)
O(4)	4c	0,0478(2)	0,6736(4)	0,3672(3)	0,082(2)
O(5)	4c	0,0432(2)	0,5107(4)	0,3021(4)	0,089(2)
O(6)	4c	0,0948(2)	0,5093(5)	0,2568(4)	0,103(2)
O(7)	4c	0,1162(2)	0,6827(5)	0,4155(4)	0,109(3)
O(8)	4c	0,1243(2)	0,6391(4)	0,3113(5)	0,105(3)
O(9)	4c	0,1125(2)	0,4947(5)	0,4068(4)	0,119(3)
O(10)	4c	0,1607(2)	0,4847(5)	0,3430(4)	0,098(2)
O(11)	4c	0,1368(2)	0,5924(4)	0,1539(4)	0,085(2)
O(12)	4c	0,1632(2)	0,6521(4)	0,0713(3)	0,074(2)
O(13)	4c	0,1955(2)	0,5962(4)	0,2521(4)	0,093(2)
O(14)	4c	0,2267(2)	0,5582(4)	0,1627(3)	0,071(2)
O(15)	4c	0,1635(2)	0,4563(4)	0,1852(4)	0,084(2)
O(16)	4c	0,2071(2)	0,4112(4)	0,1282(4)	0,079(2)
O(17)	4c	0,1497(2)	0,4860(4)	0,0220(4)	0,089(2)
O(18)	4c	0,3499(2)	0,0656(4)	0,0656(4)	0,082(2)
O(19)	4c	0,2797(2)	0,1279(4)	0,0222(3)	0,077(2)
O(20)	4c	0,2289(2)	0,5176(4)	0,0298(4)	0,076(2)
O(21)	4c	0,2714(2)	0,3510(4)	0,0782(4)	0,079(2)
O(22)	4c	0,3095(2)	0,2807(4)	0,0221(3)	0,078(2)
O(23)	4c	0,3026(2)	0,5177(4)	0,0922(3)	0,080(2)
O(24)	4c	0,3414(2)	0,4278(4)	0,0729(4)	0,083(2)
O(25)	4c	0,2760(2)	0,4253(4)	0,2140(4)	0,088(2)
O(26)	4c	0,3272(2)	0,3741(4)	0,2272(4)	0,083(2)
O(27)	4c	0,3781(2)	0,2252(4)	0,0485(4)	0,085(2)
O(28)	4c	0,3774(2)	0,3083(4)	0,1363(4)	0,083(2)
O(29)	4c	0,3166(2)	0,2116(4)	0,1497(4)	0,089(2)
O(30)	4c	0,3499(2)	0,2143(5)	0,2461(4)	0,113(3)
O(31)	4c	0,4006(2)	0,4120(4)	0,2481(4)	0,099(2)
O(32)	4c	0,4420(2)	0,4304(6)	0,3288(4)	0,118(3)
O(33)	4c	0,4312(2)	0,2584(5)	0,2814(5)	0,48(2)
O(34)	4c	0,4807(3)	0,2353(6)	0,2866(5)	0,190(7)
O(35)	4c	0,3775(2)	0,3073(4)	0,3586(4)	0,090(2)
O(36)	4c	0,4047(2)	0,2367(5)	0,4309(4)	0,110(3)
O(37)	4c	0,4168(2)	0,4097(5)	0,4801(6)	0,129(3)
O(38)	4c	0,4192(3)	0,3247(6)	0,5617(5)	0,132(3)

Atom	Lage	x/a	y/b	z/c	U <sub>(eq)</sub>
O(39)	4c	0,4798(2)	0,3078(6)	0,4087(5)	0,120(3)
O(40)	4c	0,4804(2)	0,2326(7)	0,5006(6)	0,142(4)
C(1)	4c	0,0530(3)	0,5366(7)	0,4991(6)	0,078(3)
C(2)	4c	0,0497(3)	0,5045(7)	0,5683(6)	0,081(3)
C(3)	4c	0,0356(4)	0,4365(9)	0,5738(9)	0,139(6)
C(4)	4c	0,0330(9)	0,398(2)	0,634(3)	0,48(4)
C(5)	4c	0,0434(8)	0,444(2)	0,690(2)	0,37(4)
C(6)	4c	0,0633(7)	0,510(2)	0,684(1)	0,23(1)
C(7)	4c	0,0650(4)	0,5426(9)	0,6216(7)	0,125(5)
C(8)	4c	0,0147(3)	0,6722(8)	0,3551(5)	0,084(3)
C(9)	4c	-0,0015(3)	0,7477(6)	0,3316(6)	0,090(3)
C(10)	4c	-0,0347(4)	0,7436(8)	0,3117(9)	0,129(5)
C(11)	4c	-0,0510(5)	0,814(1)	0,287(1)	0,182(8)
C(12)	4c	-0,0328(7)	0,880(1)	0,300(2)	0,24(2)
C(13)	4c	0,0012(5)	0,878(1)	0,310(1)	0,173(8)
C(14)	4c	0,0165(4)	0,8137(7)	0,3320(8)	0,128(5)
C(15)	4c	0,0639(3)	0,4890(6)	0,2545(6)	0,082(3)
C(16)	4c	0,0514(4)	0,4454(9)	0,1974(7)	0,121(5)
C(17)	4c	0,0188(3)	0,4144(8)	0,1930(6)	0,109(4)
C(18)	4c	0,0085(4)	0,373(1)	0,139(1)	0,164(7)
C(19A)	4c	0,0211(7)	0,390(2)	0,078(2)	0,11(1)
C(19B)	4c	0,040(2)	0,322(3)	0,113(2)	0,19(2)
C(20A)	4c	0,0528(8)	0,435(2)	0,068(2)	0,12(1)
C(20B)	4c	0,0761(7)	0,339(3)	0,127(2)	0,17(2)
C(21A)	4c	0,0659(5)	0,463(1)	0,126(1)	0,082(7)
C(21B)	4c	0,086(1)	0,389(2)	0,175(2)	0,17(2)
C(22)	4c	0,1314(3)	0,6860(6)	0,3593(6)	0,080(3)
C(23)	4c	0,1571(3)	0,7434(6)	0,3503(6)	0,087(3)
C(24)	4c	0,1705(4)	0,7802(8)	0,4036(8)	0,126(5)
C(25)	4c	0,1943(5)	0,838(1)	0,3971(8)	0,148(6)
C(26)	4c	0,2050(4)	0,858(1)	0,333(1)	0,164(7)
C(27)	4c	0,1907(4)	0,8232(9)	0,2744(9)	0,129(5)
C(28)	4c	0,1663(3)	0,7656(7)	0,2829(7)	0,105(4)
C(29)	4c	0,1428(4)	0,4714(7)	0,3963(8)	0,102(4)
C(30)	4c	0,1593(3)	0,4224(7)	0,4518(6)	0,096(3)
C(31)	4c	0,1415(4)	0,4132(7)	0,5141(7)	0,106(4)
C(32)	4c	0,1566(5)	0,374(1)	0,5624(9)	0,135(6)
C(33)	4c	0,1842(7)	0,3426(8)	0,5538(9)	0,148(7)
C(34)	4c	0,2050(4)	0,3471(9)	0,493(1)	0,135(6)
C(35)	4c	0,1907(4)	0,3879(8)	0,4421(8)	0,126(5)
C(36)	4c	0,1406(3)	0,6511(5)	0,1183(6)	0,076(3)
C(37)	4c	0,1182(3)	0,7185(6)	0,1306(5)	0,077(3)
C(38)	4c	0,0895(3)	0,7109(7)	0,1721(6)	0,091(3)
C(39)	4c	0,0702(3)	0,7776(8)	0,1854(7)	0,104(4)
C(40)	4c	0,0785(3)	0,8458(8)	0,1621(6)	0,099(4)
C(41)	4c	0,1070(3)	0,8507(6)	0,1172(7)	0,107(4)
C(42)	4c	0,1272(3)	0,7898(6)	0,1041(6)	0,079(3)
C(43)	4c	0,2242(3)	0,5876(6)	0,2232(7)	0,085(3)
C(44)	4c	0,2554(3)	0,6141(5)	0,2592(6)	0,080(3)
C(45)	4c	0,2522(4)	0,6395(7)	0,3269(8)	0,123(5)
C(46)	4c	0,2791(5)	0,6655(9)	0,3631(8)	0,131(5)
C(47)	4c	0,3111(5)	0,6618(8)	0,332(1)	0,134(6)
C(48)	4c	0,3160(3)	0,6381(6)	0,2655(8)	0,103(4)

Atom	Lage	x/a	y/b	z/c	U <sub>(eq)</sub>
C(49)	4c	0,2872(3)	0,6131(6)	0,2266(7)	0,089(3)
C(50)	4c	0,1857(3)	0,4058(5)	0,1762(6)	0,073(3)
C(51)	4c	0,1866(3)	0,3372(7)	0,2214(6)	0,096(3)
C(52)	4c	0,1614(4)	0,3216(8)	0,2672(9)	0,138(6)
C(53)	4c	0,1643(5)	0,2600(9)	0,3126(9)	0,145(6)
C(54)	4c	0,1932(6)	0,2158(9)	0,306(1)	0,147(7)
C(55)	4c	0,2177(5)	0,2270(8)	0,263(1)	0,140(6)
C(56)	4c	0,2158(3)	0,2889(7)	0,2180(8)	0,110(4)
C(57)	4c	0,1437(2)	0,5030(6)	-0,0412(6)	0,075(3)
C(58)	4c	0,1272(3)	0,4451(6)	-0,0852(7)	0,090(3)
C(59)	4c	0,1106(3)	0,3849(6)	-0,0534(7)	0,103(4)
C(60)	4c	0,0965(4)	0,3274(8)	-0,100(1)	0,144(6)
C(61)	4c	0,0993(4)	0,3332(9)	-0,1707(9)	0,123(5)
C(62)	4c	0,1149(4)	0,3929(9)	-0,1944(8)	0,140(6)
C(63)	4c	0,1294(3)	0,4509(8)	-0,1533(7)	0,110(4)
C(64)	4c	0,2379(3)	0,5676(7)	-0,0136(5)	0,079(3)
C(65)	4c	0,2694(2)	0,5571(5)	-0,0546(5)	0,069(2)
C(66)	4c	0,2833(3)	0,6181(7)	-0,0868(6)	0,094(3)
C(67)	4c	0,3129(3)	0,6054(8)	-0,1313(7)	0,108(4)
C(68)	4c	0,3251(3)	0,5344(9)	-0,1349(7)	0,119(4)
C(69)	4c	0,3112(3)	0,4741(8)	-0,1067(6)	0,105(4)
C(70)	4c	0,2816(3)	0,4859(6)	-0,0644(5)	0,077(3)
C(71)	4c	0,2792(3)	0,3117(6)	0,0251(5)	0,071(3)
C(72)	4c	0,2543(2)	0,3016(5)	-0,0317(6)	0,072(3)
C(73)	4c	0,2208(3)	0,3248(6)	-0,0256(7)	0,090(3)
C(74)	4c	0,1976(3)	0,3197(7)	-0,0769(8)	0,104(4)
C(75)	4c	0,2101(4)	0,2921(7)	-0,1405(8)	0,110(4)
C(76)	4c	0,2429(4)	0,2681(7)	-0,1462(6)	0,099(4)
C(77)	4c	0,2656(3)	0,2735(6)	-0,0930(6)	0,084(3)
C(78)	4c	0,3311(2)	0,4948(6)	0,0694(5)	0,069(2)
C(79)	4c	0,3538(3)	0,5533(6)	0,0374(6)	0,092(3)
C(80)	4c	0,3457(3)	0,6289(7)	0,0347(7)	0,105(4)
C(81)	4c	0,3664(5)	0,6795(8)	0,001(1)	0,144(6)
C(82)	4c	0,3968(4)	0,656(1)	-0,029(1)	0,150(6)
C(83)	4c	0,4069(4)	0,583(1)	-0,025(1)	0,157(7)
C(84)	4c	0,3847(3)	0,5295(7)	0,0067(6)	0,096(3)
C(85)	4c	0,3024(3)	0,4120(6)	0,2496(6)	0,079(3)
C(86)	4c	0,3021(3)	0,4396(6)	0,3217(6)	0,088(3)
C(87)	4c	0,2723(4)	0,4506(7)	0,3560(6)	0,104(4)
C(88)	4c	0,2718(4)	0,4749(9)	0,4237(7)	0,123(5)
C(89)	4c	0,3040(5)	0,4863(8)	0,4582(8)	0,136(5)
C(90)	4c	0,3351(4)	0,4760(7)	0,4200(7)	0,115(4)
C(91)	4c	0,3336(4)	0,4517(6)	0,3523(6)	0,102(4)
C(92)	4c	0,3920(3)	0,2777(7)	0,0870(7)	0,087(3)
C(93)	4c	0,4268(3)	0,3041(6)	0,0629(6)	0,087(3)
C(94)	4c	0,4457(3)	0,2721(7)	0,0123(8)	0,114(4)
C(95)	4c	0,4771(4)	0,299(1)	-0,0052(9)	0,150(6)
C(96)	4c	0,4877(4)	0,367(2)	0,021(1)	0,162(7)
C(97)	4c	0,4710(4)	0,400(1)	0,0760(9)	0,144(6)
C(98)	4c	0,4405(3)	0,3694(7)	0,0944(8)	0,116(4)
C(99)	4c	0,3283(4)	0,1847(7)	0,2107(7)	0,100(4)
C(100)	4c	0,3153(3)	0,1058(6)	0,2288(6)	0,093(3)
C(101)	4c	0,2889(3)	0,0710(7)	0,1922(6)	0,097(3)

Atom	Lage	x/a	y/b	z/c	$U_{(eq)}$
C(102)	4c	0,2802(4)	-0,0010(9)	0,2133(9)	0,132(5)
C(103)	4c	0,2936(4)	-0,0337(9)	0,2719(8)	0,130(5)
C(104)	4c	0,3175(4)	0,0026(8)	0,3061(7)	0,122(5)
C(105)	4c	0,3295(4)	0,0719(8)	0,2865(7)	0,114(4)
C(106)	4c	0,4244(3)	0,4506(8)	0,2749(7)	0,095(3)
C(107)	4c	0,4342(3)	0,5233(7)	0,2414(7)	0,102(4)
C(108)	4c	0,4149(4)	0,5511(8)	0,1861(7)	0,107(4)
C(109)	4c	0,4244(4)	0,6149(9)	0,1570(9)	0,136(6)
C(110)	4c	0,4532(5)	0,655(1)	0,177(1)	0,158(7)
C(111)	4c	0,4736(6)	0,626(1)	0,229(2)	0,21(1)
C(112)	4c	0,4639(4)	0,563(1)	0,260(1)	0,159(7)
C(113)	4c	0,4528(3)	0,2302(9)	0,2560(6)	0,28(2)
C(114)	4c	0,4609(4)	0,1795(7)	0,2033(6)	0,105(4)
C(115)	4c	0,4318(4)	0,1462(9)	0,165(1)	0,136(5)
C(116)	4c	0,4356(5)	0,0995(9)	0,108(1)	0,143(6)
C(117)	4c	0,4678(6)	0,0795(9)	0,087(1)	0,167(8)
C(118)	4c	0,4971(4)	0,1110(9)	0,1150(9)	0,136(5)
C(119)	4c	0,4927(4)	0,1583(8)	0,1758(7)	0,115(4)
C(120)	4c	0,3767(3)	0,2527(7)	0,4034(6)	0,081(3)
C(121)	4c	0,3460(3)	0,2142(6)	0,4164(6)	0,083(3)
C(122)	4c	0,3141(3)	0,2448(7)	0,3956(6)	0,096(3)
C(123)	4c	0,2844(3)	0,2078(9)	0,4141(8)	0,125(5)
C(124)	4c	0,2841(4)	0,1402(8)	0,4503(7)	0,110(4)
C(125)	4c	0,3148(4)	0,1096(8)	0,4678(7)	0,111(4)
C(126)	4c	0,3452(3)	0,1453(7)	0,4511(6)	0,097(4)
C(127)	4c	0,4131(4)	0,3910(1)	0,5464(8)	0,125(5)
C(128)	4c	0,4012(4)	0,4463(8)	0,5885(8)	0,106(4)
C(129)	4c	0,3990(6)	0,517(1)	0,5739(9)	0,177(9)
C(130)	4c	0,3869(5)	0,571(1)	0,617(2)	0,174(8)
C(131)	4c	0,3747(6)	0,551(1)	0,683(1)	0,188(9)
C(132)	4c	0,3783(5)	0,477(2)	0,7023(8)	0,169(7)
C(133)	4c	0,3904(4)	0,4271(9)	0,648(2)	0,155(7)
C(134)	4c	0,4940(3)	0,274(1)	0,4579(9)	0,122(5)
C(135)	4c	0,5345(3)	0,278(2)	0,463(1)	0,137(6)
C(136)	4c	0,5495(4)	0,327(1)	0,421(1)	0,162(7)
C(137)	4c	0,5890(5)	0,330(2)	0,436(2)	0,26(2)
C(138)	4c	0,6060(6)	0,289(2)	0,474(2)	0,27(2)
C(139)	4c	0,5871(5)	0,249(2)	0,510(1)	0,18(1)
C(140)	4c	0,5532(4)	0,240(1)	0,5114(8)	0,142(6)

**Tabelle 10.6.2: Anisotrope Auslenkungsparameter ( $\text{\AA}^2 \cdot 10^{-3}$ ) von  $\text{Mn}_{19}(\text{OBz})_{38}(\text{HOBz})_2$ .**

Atom	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{23}$	$U^{13}$	$U^{12}$
Mn(1)	0,072(2)	0,086(2)	0,061(2)	0	0	-0,005(1)
Mn(2)	0,0800(9)	0,090(1)	0,061(1)	-0,0024(8)	0,0014(8)	-0,0052(8)
Mn(3)	0,0793(9)	0,081(1)	0,072(1)	0,0016(9)	0,0101(8)	-0,0005(8)
Mn(4)	0,0738(9)	0,0728(9)	0,068(1)	0,0009(8)	0,0013(7)	-0,0008(7)
Mn(5)	0,0761(8)	0,0743(9)	0,069(1)	-0,0021(8)	0,0020(8)	0,0029(7)
Mn(6)	0,0844(9)	0,0735(9)	0,064(1)	-0,0016(8)	-0,0004(8)	0,0042(7)
Mn(7)	0,0806(9)	0,0699(9)	0,066(1)	0,0000(8)	0,0030(8)	0,0011(7)
Mn(8)	0,100(1)	0,092(1)	0,069(1)	0,0027(9)	-0,0084(9)	0,0076(9)
Mn(9)	0,109(2)	0,157(2)	0,097(2)	0,026(2)	-0,018(2)	-0,013(1)
Mn(10)	0,094(1)	0,106(1)	0,067(1)	0,0135(9)	0,0038(9)	0,0117(9)

Atom	U <sup>11</sup>	U <sup>22</sup>	U <sup>33</sup>	U <sup>23</sup>	U <sup>13</sup>	U <sup>12</sup>
O(1)	0,085(5)	0,146(7)	0,084(6)	-0,038(5)	-0,013(4)	0,023(4)
O(2)	0,109(6)	0,147(8)	0,117(7)	0,060(6)	-0,030(5)	-0,037(6)
O(3)	0,102(5)	0,083(5)	0,068(5)	0,004(4)	-0,013(4)	-0,006(4)
O(4)	0,109(5)	0,086(4)	0,053(4)	0,001(4)	-0,005(4)	0,002(4)
O(5)	0,085(4)	0,109(5)	0,072(5)	-0,014(4)	0,017(4)	-0,015(4)
O(6)	0,089(5)	0,122(6)	0,099(6)	-0,009(5)	0,020(5)	-0,010(4)
O(7)	0,101(5)	0,144(7)	0,081(6)	0,027(5)	0,027(5)	-0,009(5)
O(8)	0,095(5)	0,080(5)	0,138(8)	-0,008(5)	-0,010(5)	-0,003(4)
O(9)	0,098(6)	0,158(8)	0,098(6)	0,035(6)	0,034(5)	0,026(5)
O(10)	0,086(5)	0,121(6)	0,087(6)	0,017(5)	0,005(4)	-0,002(4)
O(11)	0,102(5)	0,073(4)	0,082(5)	0,016(4)	0,021(4)	0,008(4)
O(12)	0,067(4)	0,086(4)	0,065(4)	-0,003(3)	0,008(3)	-0,001(3)
O(13)	0,085(5)	0,109(5)	0,085(5)	-0,021(5)	0,028(4)	-0,008(4)
O(14)	0,078(4)	0,081(4)	0,053(4)	-0,006(3)	-0,003(3)	-0,008(3)
O(15)	0,085(4)	0,079(4)	0,089(5)	-0,002(4)	0,001(4)	0,000(4)
O(16)	0,080(4)	0,091(4)	0,067(5)	-0,009(4)	0,020(4)	-0,006(3)
O(17)	0,083(4)	0,090(5)	0,092(6)	-0,001(4)	0,006(4)	-0,003(4)
O(18)	0,098(5)	0,072(4)	0,076(5)	0,003(4)	0,000(4)	-0,001(4)
O(19)	0,091(4)	0,076(4)	0,063(5)	-0,002(4)	0,008(4)	-0,007(4)
O(20)	0,083(4)	0,074(4)	0,073(5)	0,001(4)	0,006(4)	0,002(3)
O(21)	0,080(4)	0,079(4)	0,075(5)	-0,005(4)	0,001(4)	-0,001(3)
O(22)	0,079(4)	0,081(4)	0,072(5)	0,004(4)	0,017(3)	0,002(3)
O(23)	0,085(4)	0,072(4)	0,080(5)	-0,011(4)	0,004(4)	0,003(3)
O(24)	0,075(4)	0,078(5)	0,096(5)	0,005(4)	0,005(4)	0,006(3)
O(25)	0,097(5)	0,077(4)	0,088(5)	-0,008(4)	-0,002(4)	0,000(4)
O(26)	0,083(4)	0,097(5)	0,069(5)	-0,008(4)	0,001(4)	0,000(4)
O(27)	0,086(4)	0,083(5)	0,086(5)	-0,001(4)	-0,004(4)	-0,002(4)
O(28)	0,092(5)	0,092(5)	0,064(5)	-0,007(4)	0,007(4)	0,004(4)
O(29)	0,091(5)	0,089(5)	0,086(6)	0,005(4)	-0,008(4)	0,000(4)
O(30)	0,155(7)	0,115(6)	0,066(5)	-0,004(5)	-0,027(5)	-0,033(5)
O(31)	0,107(5)	0,104(5)	0,086(6)	0,006(5)	0,010(5)	-0,007(5)
O(32)	0,098(5)	0,169(8)	0,087(6)	0,022(6)	-0,020(5)	-0,041(5)
O(33)	0,28(2)	0,27(2)	1,52(9)	0,56(4)	0,59(4)	0,24(2)
O(34)	0,37(2)	0,107(7)	0,089(8)	-0,001(6)	0,08(1)	0,06(1)
O(35)	0,099(5)	0,098(5)	0,076(5)	0,000(4)	-0,013(4)	0,004(4)
O(36)	0,083(5)	0,163(8)	0,082(6)	0,016(5)	-0,021(4)	0,008(5)
O(37)	0,142(7)	0,121(7)	0,124(8)	-0,001(6)	0,020(6)	0,006(6)
O(38)	0,153(8)	0,103(6)	0,136(8)	0,018(6)	-0,023(6)	0,024(6)
O(39)	0,092(5)	0,164(8)	0,101(7)	0,016(6)	-0,020(5)	-0,014(5)
O(40)	0,082(6)	0,22(2)	0,117(8)	0,014(8)	0,010(5)	-0,001(6)
C(1)	0,073(6)	0,086(7)	0,075(8)	-0,002(6)	-0,001(6)	-0,004(6)
C(2)	0,083(7)	0,097(8)	0,064(8)	0,011(6)	-0,004(6)	-0,009(6)
C(3)	0,15(1)	0,10(1)	0,16(2)	0,05(1)	-0,03(1)	-0,01(1)
C(4)	0,43(5)	0,22(3)	0,9(1)	0,34(5)	-0,42(7)	-0,18(3)
C(5)	0,33(4)	0,35(5)	0,47(6)	0,25(5)	0,33(5)	0,14(4)
C(6)	0,32(3)	0,26(3)	0,09(2)	-0,03(2)	-0,05(2)	0,13(2)
C(7)	0,17(2)	0,15(1)	0,061(8)	0,015(9)	-0,020(8)	0,01(1)
C(8)	0,080(7)	0,113(9)	0,054(7)	0,001(6)	0,000(5)	0,012(7)
C(9)	0,112(9)	0,079(7)	0,082(8)	-0,005(6)	0,005(7)	-0,004(7)
C(10)	0,104(9)	0,10(1)	0,17(2)	0,01(1)	-0,02(1)	0,008(8)
C(11)	0,21(2)	0,11(1)	0,24(2)	0,05(2)	-0,02(2)	0,03(1)
C(12)	0,22(2)	0,07(1)	0,47(5)	0,03(2)	-0,01(3)	0,03(2)
C(13)	0,13(1)	0,13(2)	0,26(2)	0,06(2)	-0,02(2)	-0,02(1)

Atom	U <sup>11</sup>	U <sup>22</sup>	U <sup>33</sup>	U <sup>23</sup>	U <sup>13</sup>	U <sup>12</sup>
C(14)	0,13(1)	0,075(8)	0,18(2)	0,032(9)	0,02(1)	0,003(8)
C(15)	0,079(7)	0,086(7)	0,080(8)	-0,007(6)	0,010(6)	-0,021(5)
C(16)	0,13(1)	0,15(1)	0,085(9)	-0,051(9)	0,049(8)	-0,04(1)
C(17)	0,105(9)	0,15(1)	0,074(8)	-0,022(8)	-0,007(7)	-0,048(8)
C(18)	0,16(2)	0,19(2)	0,15(2)	-0,09(2)	0,03(1)	-0,08(1)
C(19A)	0,09(2)	0,19(3)	0,07(2)	-0,01(2)	0,00(2)	-0,01(2)
C(19B)	0,24(4)	0,24(5)	0,09(2)	-0,04(3)	0,02(3)	-0,11(4)
C(20A)	0,15(3)	0,16(3)	0,05(2)	0,00(2)	-0,03(2)	-0,06(2)
C(20B)	0,10(2)	0,32(5)	0,12(3)	-0,01(3)	0,04(2)	-0,07(3)
C(21A)	0,07(1)	0,14(2)	0,04(1)	0,02(2)	0,01(1)	0,03(1)
C(21B)	0,24(4)	0,11(2)	0,16(3)	-0,02(2)	-0,04(3)	-0,08(2)
C(22)	0,079(7)	0,081(7)	0,078(8)	0,004(6)	0,004(6)	-0,013(5)
C(23)	0,095(7)	0,085(7)	0,085(9)	-0,012(7)	0,011(6)	-0,012(6)
C(24)	0,15(2)	0,12(1)	0,10(1)	-0,013(9)	0,02(1)	-0,044(9)
C(25)	0,21(2)	0,17(2)	0,08(1)	0,00(1)	0,00(1)	-0,08(2)
C(26)	0,14(2)	0,17(2)	0,18(2)	0,01(2)	0,04(2)	-0,08(1)
C(27)	0,12(1)	0,13(1)	0,14(2)	0,01(1)	0,02(1)	-0,027(9)
C(28)	0,114(9)	0,12(1)	0,080(9)	0,015(7)	-0,002(7)	-0,025(8)
C(29)	0,107(9)	0,088(8)	0,11(1)	0,019(7)	-0,022(8)	-0,003(7)
C(30)	0,119(9)	0,095(8)	0,076(9)	0,003(7)	-0,005(7)	-0,014(7)
C(31)	0,16(1)	0,085(8)	0,075(9)	0,014(7)	-0,016(9)	-0,010(8)
C(32)	0,16(2)	0,15(2)	0,10(2)	0,01(1)	-0,01(1)	0,04(1)
C(33)	0,26(2)	0,075(9)	0,10(1)	0,012(8)	-0,04(2)	-0,01(1)
C(34)	0,15(2)	0,14(2)	0,12(1)	0,02(1)	-0,05(1)	0,05(1)
C(35)	0,12(1)	0,15(2)	0,12(2)	-0,01(1)	-0,023(9)	0,030(9)
C(36)	0,075(6)	0,062(6)	0,088(8)	-0,011(6)	-0,014(6)	-0,005(5)
C(37)	0,088(7)	0,077(7)	0,066(7)	0,000(6)	-0,009(6)	0,004(5)
C(38)	0,082(7)	0,124(9)	0,071(8)	0,009(7)	0,019(6)	0,010(7)
C(39)	0,091(8)	0,13(1)	0,10(1)	-0,016(9)	0,020(7)	-0,002(8)
C(40)	0,106(9)	0,091(9)	0,097(9)	0,000(7)	0,018(7)	0,011(7)
C(41)	0,108(8)	0,078(7)	0,14(2)	0,005(8)	0,006(9)	0,013(6)
C(42)	0,082(6)	0,068(6)	0,084(8)	-0,013(6)	0,000(6)	-0,002(5)
C(43)	0,082(7)	0,087(7)	0,085(9)	0,005(6)	0,001(6)	-0,017(6)
C(44)	0,096(8)	0,071(6)	0,071(8)	-0,005(5)	-0,007(6)	-0,004(5)
C(45)	0,16(2)	0,101(9)	0,11(1)	-0,014(8)	0,02(1)	-0,011(9)
C(46)	0,14(1)	0,14(1)	0,11(2)	-0,03(1)	-0,02(1)	-0,04(1)
C(47)	0,13(1)	0,10(1)	0,16(2)	0,01(1)	-0,08(2)	-0,012(9)
C(48)	0,089(8)	0,090(8)	0,13(1)	-0,021(8)	-0,028(8)	0,008(6)
C(49)	0,069(6)	0,091(7)	0,106(9)	0,001(7)	0,004(6)	-0,002(5)
C(50)	0,092(7)	0,062(6)	0,068(7)	-0,008(5)	-0,012(6)	0,005(6)
C(51)	0,119(9)	0,111(9)	0,060(7)	0,010(7)	-0,004(7)	-0,009(8)
C(52)	0,15(1)	0,10(1)	0,16(2)	0,00(1)	0,07(1)	-0,018(9)
C(53)	0,20(2)	0,09(1)	0,15(2)	0,01(1)	0,08(1)	-0,01(1)
C(54)	0,26(2)	0,08(1)	0,11(2)	0,03(1)	-0,04(2)	-0,04(2)
C(55)	0,17(2)	0,10(1)	0,16(2)	0,06(1)	-0,05(2)	-0,02(1)
C(56)	0,110(9)	0,087(8)	0,14(1)	-0,002(8)	-0,034(8)	-0,010(7)
C(57)	0,067(6)	0,078(7)	0,079(8)	0,001(6)	-0,009(6)	-0,002(5)
C(58)	0,108(8)	0,063(6)	0,10(1)	0,006(6)	-0,009(7)	-0,010(6)
C(59)	0,118(9)	0,084(8)	0,10(1)	0,000(7)	-0,010(7)	-0,020(7)
C(60)	0,16(1)	0,083(9)	0,18(2)	0,00(1)	-0,07(1)	-0,032(8)
C(61)	0,15(1)	0,12(2)	0,10(2)	-0,02(1)	-0,05(1)	0,00(1)
C(62)	0,18(2)	0,12(1)	0,12(2)	-0,01(1)	-0,04(1)	-0,05(1)
C(63)	0,14(1)	0,12(1)	0,064(8)	0,000(8)	-0,003(7)	-0,009(9)



Atom	U <sup>11</sup>	U <sup>22</sup>	U <sup>33</sup>	U <sup>23</sup>	U <sup>13</sup>	U <sup>12</sup>
C(64)	0,093(7)	0,080(7)	0,063(7)	-0,002(6)	-0,005(6)	-0,009(6)
C(65)	0,077(6)	0,067(6)	0,067(7)	0,001(5)	-0,005(5)	0,000(5)
C(66)	0,066(6)	0,102(8)	0,11(1)	0,014(7)	-0,013(6)	-0,003(6)
C(67)	0,094(8)	0,12(1)	0,11(1)	0,021(9)	0,008(8)	0,003(7)
C(68)	0,12(1)	0,13(1)	0,11(1)	0,006(9)	0,041(8)	0,021(9)
C(69)	0,104(8)	0,12(1)	0,088(9)	0,017(8)	0,018(7)	0,017(8)
C(70)	0,082(6)	0,084(7)	0,067(7)	-0,012(5)	-0,006(5)	-0,009(5)
C(71)	0,075(6)	0,078(7)	0,060(7)	0,001(5)	0,014(5)	-0,004(5)
C(72)	0,072(6)	0,066(6)	0,078(7)	0,002(5)	0,000(6)	-0,001(5)
C(73)	0,095(8)	0,075(7)	0,099(9)	-0,006(6)	0,004(7)	-0,004(6)
C(74)	0,105(8)	0,092(8)	0,11(1)	-0,010(8)	-0,028(8)	-0,006(7)
C(75)	0,12(1)	0,101(9)	0,10(1)	0,003(8)	-0,036(8)	0,016(8)
C(76)	0,14(1)	0,103(8)	0,053(7)	-0,003(6)	-0,013(7)	0,017(8)
C(77)	0,111(8)	0,082(7)	0,063(7)	0,000(6)	-0,001(7)	0,020(6)
C(78)	0,055(5)	0,086(7)	0,068(6)	0,002(6)	0,003(5)	-0,003(5)
C(79)	0,088(7)	0,082(7)	0,104(9)	0,007(7)	0,007(7)	-0,003(6)
C(80)	0,097(8)	0,099(9)	0,12(1)	0,007(8)	0,001(8)	0,003(7)
C(81)	0,15(1)	0,090(9)	0,20(2)	0,02(1)	-0,01(2)	-0,038(9)
C(82)	0,11(1)	0,12(1)	0,21(2)	0,03(2)	0,04(1)	-0,028(9)
C(83)	0,11(1)	0,12(2)	0,24(2)	-0,01(2)	0,04(1)	-0,04(1)
C(84)	0,072(6)	0,105(8)	0,11(1)	0,005(7)	0,004(6)	0,002(6)
C(85)	0,091(8)	0,074(7)	0,077(8)	0,002(6)	-0,010(7)	-0,004(6)
C(86)	0,113(9)	0,089(8)	0,059(7)	-0,010(6)	-0,008(7)	0,008(6)
C(87)	0,13(1)	0,108(9)	0,070(8)	-0,023(7)	0,004(7)	0,025(7)
C(88)	0,16(2)	0,15(1)	0,065(9)	0,000(8)	0,006(8)	0,01(1)
C(89)	0,20(2)	0,11(1)	0,09(1)	0,018(9)	0,02(2)	0,03(1)
C(90)	0,14(1)	0,12(1)	0,080(9)	-0,024(8)	-0,016(8)	0,021(8)
C(91)	0,15(1)	0,083(7)	0,078(9)	-0,014(6)	-0,039(8)	0,031(7)
C(92)	0,069(6)	0,098(9)	0,10(1)	0,037(8)	-0,002(7)	-0,003(6)
C(93)	0,084(7)	0,098(8)	0,072(7)	-0,010(6)	0,003(6)	-0,007(6)
C(94)	0,078(7)	0,13(1)	0,14(1)	-0,043(9)	0,023(8)	-0,013(7)
C(95)	0,10(1)	0,20(2)	0,17(2)	-0,08(2)	0,02(1)	-0,02(1)
C(96)	0,12(2)	0,22(2)	0,15(2)	-0,02(2)	0,00(1)	-0,07(2)
C(97)	0,11(1)	0,19(2)	0,13(2)	-0,03(1)	0,029(9)	-0,06(1)
C(98)	0,108(9)	0,105(9)	0,14(1)	0,008(9)	0,004(9)	-0,013(7)
C(99)	0,13(1)	0,086(8)	0,082(9)	0,025(7)	0,002(8)	0,003(7)
C(100)	0,14(1)	0,072(7)	0,069(8)	-0,010(6)	0,018(7)	-0,012(7)
C(101)	0,109(8)	0,095(8)	0,083(9)	0,007(7)	0,011(7)	-0,014(7)
C(102)	0,16(2)	0,11(1)	0,13(1)	-0,02(1)	0,03(1)	-0,047(9)
C(103)	0,19(2)	0,11(1)	0,09(1)	0,025(9)	-0,01(1)	-0,02(1)
C(104)	0,19(2)	0,088(9)	0,09(1)	0,018(8)	-0,01(1)	-0,01(1)
C(105)	0,17(2)	0,10(1)	0,074(9)	0,010(7)	-0,022(8)	0,005(9)
C(106)	0,092(8)	0,12(1)	0,079(9)	-0,007(8)	0,011(7)	0,010(8)
C(107)	0,114(9)	0,085(8)	0,10(1)	-0,026(8)	0,017(8)	-0,019(7)
C(108)	0,15(1)	0,089(9)	0,09(1)	0,011(8)	-0,020(8)	0,007(8)
C(109)	0,11(1)	0,12(1)	0,17(2)	-0,02(1)	-0,04(1)	-0,004(9)
C(110)	0,18(2)	0,11(2)	0,19(2)	-0,01(1)	0,05(2)	-0,02(2)
C(111)	0,20(2)	0,18(2)	0,24(3)	0,07(2)	-0,11(2)	-0,08(2)
C(112)	0,14(1)	0,14(2)	0,20(2)	0,01(2)	-0,07(2)	-0,05(1)
C(113)	0,37(3)	0,38(3)	0,10(2)	0,15(2)	-0,17(2)	-0,29(3)
C(114)	0,13(1)	0,12(1)	0,078(9)	0,015(8)	-0,041(8)	-0,014(9)
C(115)	0,13(1)	0,12(1)	0,18(2)	0,04(2)	-0,01(2)	0,00(1)
C(116)	0,17(2)	0,10(1)	0,16(2)	-0,00(1)	-0,07(2)	-0,01(1)

---

Atom	U <sup>11</sup>	U <sup>22</sup>	U <sup>33</sup>	U <sup>23</sup>	U <sup>13</sup>	U <sup>12</sup>
C(117)	0,19(2)	0,12(1)	0,19(2)	-0,04(1)	-0,09(2)	0,03(2)
C(118)	0,11(1)	0,17(2)	0,12(2)	-0,02(2)	0,01(1)	0,02(1)
C(119)	0,12(1)	0,13(1)	0,107(1)	0,002(9)	0,008(9)	-0,001(8)
C(120)	0,081(7)	0,094(8)	0,070(8)	0,000(6)	0,016(6)	0,024(6)
C(121)	0,091(8)	0,082(7)	0,070(7)	0,000(6)	0,000(6)	0,008(6)
C(122)	0,091(8)	0,112(8)	0,087(9)	-0,003(7)	0,019(7)	0,009(7)
C(123)	0,088(8)	0,14(1)	0,14(2)	0,03(1)	-0,016(8)	0,002(8)
C(124)	0,103(9)	0,13(1)	0,09(1)	0,007(8)	0,006(8)	-0,007(8)
C(125)	0,13(1)	0,12(1)	0,09(1)	0,029(8)	0,016(8)	0,019(9)
C(126)	0,087(8)	0,12(1)	0,085(9)	-0,004(8)	-0,014(6)	-0,010(7)
C(127)	0,18(2)	0,12(1)	0,07(1)	0,01(1)	0,00(1)	0,01(1)
C(128)	0,16(1)	0,080(9)	0,08(1)	-0,006(8)	0,008(9)	-0,006(8)
C(129)	0,32(3)	0,08(1)	0,12(2)	0,00(1)	0,00(2)	0,00(1)
C(130)	0,23(2)	0,09(1)	0,19(2)	0,04(2)	-0,04(2)	-0,03(1)
C(131)	0,36(3)	0,10(1)	0,11(2)	-0,03(1)	-0,04(2)	0,05(2)
C(132)	0,25(2)	0,16(2)	0,10(2)	-0,03(1)	0,03(1)	0,05(2)
C(133)	0,15(2)	0,12(1)	0,20(2)	-0,01(2)	0,06(2)	-0,01(1)
C(134)	0,071(8)	0,20(2)	0,10(2)	-0,02(1)	0,000(8)	0,017(9)
C(135)	0,064(8)	0,22(2)	0,13(2)	-0,05(1)	0,007(9)	-0,007(9)
C(136)	0,10(1)	0,20(2)	0,19(2)	-0,04(2)	0,00(1)	-0,01(1)
C(137)	0,09(2)	0,23(3)	0,51(7)	-0,13(4)	0,13(2)	-0,04(2)
C(138)	0,07(2)	0,39(4)	0,35(4)	-0,21(3)	0,06(2)	0,02(2)
C(139)	0,09(1)	0,28(3)	0,16(2)	-0,06(2)	-0,01(1)	0,07(2)
C(140)	0,10(1)	0,24(2)	0,09(1)	-0,01(1)	0,009(8)	0,04(1)

---

**Tabelle 10.6.3: Ausgewählte Bindungslängen [pm] von Mn<sub>19</sub>(OBz)<sub>38</sub>(HOBz)<sub>2</sub>.**

Mn(1)-Mn(2)	341,0(2)	Mn(5)-O(14)	223,7(7)	O(3)-C(8)	123(2)
Mn(2)-Mn(3)	341,3(2)	Mn(5)-O(16)	216,3(6)	O(4)-C(8)	131(1)
Mn(2)-Mn(10§)	320,7(2)	Mn(5)-O(20)	223,9(7)	O(5)-C(15)	129(2)
Mn(3)-Mn(4)	343,9(2)	Mn(5)-O(21)	220,9(7)	O(6)-C(15)	126(1)
Mn(4)-Mn(5)	318,8(2)	Mn(5)-O(23)	207,2(7)	O(7)-C(22)	125(1)
Mn(4)-Mn(7")	361,5(2)	Mn(5)-O(25)	215,0(8)	O(8)-C(22)	129(1)
Mn(5)-Mn(6)	350,2(2)	Mn(6)-O(21)	227,2(6)	O(9)-C(29)	127(2)
Mn(6)-Mn(7)	334,0(2)	Mn(6)-O(22)	227,1(7)	O(10)-C(29)	127(2)
Mn(6)-Mn(8)	319,8(2)	Mn(6)-O(24)	206,0(7)	O(11)-C(36)	127(2)
Mn(8)-Mn(9)	357,6(3)	Mn(6)-O(26)	214,7(7)	O(12)-C(36)	127(1)
Mn(9)-Mn(10)	358,1(3)	Mn(6)-O(28)	212,7(7)	O(13)-C(43)	126(1)
Mn(1)-O(1)	212,7(8)	Mn(6)-O(29)	223,4(7)	O(14)-C(43)	130(1)
Mn(1)-O(1*)	212,7(8)	Mn(7)-O(12#)	219,7(7)	O(15)-C(50)	126(1)
Mn(1)-O(3)	209,8(7)	Mn(7)-O(18)	207,0(7)	O(16)-C(50)	126(1)
Mn(1)-O(3*)	209,8(7)	Mn(7)-O(19)	212,8(7)	O(17)-C(57)	130(1)
Mn(1)-O(5)	219,7(7)	Mn(7)-O(22)	214,6(7)	O(18)-C(57#)	124(1)
Mn(1)-O(5*)	219,7(7)	Mn(7)-O(27)	211,6(7)	O(19)-C(64#)	127(2)
Mn(2)-O(1)	255,6(9)	Mn(7)-O(29)	233,6(8)	O(20)-C(64)	128(1)
Mn(2)-O(2)	247(1)	Mn(8)-O(26)	227,2(7)	O(21)-C(71)	129(1)
Mn(2)-O(4)	218,8(7)	Mn(8)-O(28)	218,3(8)	O(22)-C(71)	131(1)
Mn(2)-O(5)	223,6(7)	Mn(8)-O(30)	203,4(8)	O(23)-C(78)	127(1)
Mn(2)-O(6)	250,3(8)	Mn(8)-O(31)	199,9(8)	O(24)-C(78)	126(1)
Mn(2)-O(7)	256,0(9)	Mn(8)-O(33)	238,8(8)	O(25)-C(85)	126(2)
Mn(2)-O(8)	232,8(8)	Mn(8)-O(35)	216,5(8)	O(26)-C(85)	126(2)
Mn(2)-O(9)	202,2(9)	Mn(9)-O(32)	200,1(9)	O(27)-C(92)	131(2)
Mn(3)-O(6)	212,8(8)	Mn(9)-O(33)	269,8(9)	O(28)-C(92)	124(2)
Mn(3)-O(8)	217,1(8)	Mn(9)-O(35)	227,0(7)	O(29)-C(99)	137(2)
Mn(3)-O(10)	208,9(8)	Mn(9)-O(36)	231,1(9)	O(30)-C(99)	120(2)
Mn(3)-O(11)	219,2(7)	Mn(9)-O(37)	209(1)	O(31)-C(106)	127(2)
Mn(3)-O(13)	209,6(7)	Mn(9)-O(39)	209,1(9)	O(32)-C(106)	131(2)
Mn(3)-O(15)	219,7(7)	Mn(10)-O(2\$)	211(1)	O(33)-C(113)	113,7(9)
Mn(4)-O(11)	236,9(7)	Mn(10)-O(4\$)	228,9(7)	O(34)-C(113)	124,0(9)
Mn(4)-O(12)	229,5(6)	Mn(10)-O(7\$)	214,5(8)	O(35)-C(120)	132(2)
Mn(4)-O(14)	223,5(6)	Mn(10)-O(36)	222,0(8)	O(36)-C(120)	126(1)
Mn(4)-O(15)	233,7(7)	Mn(10)-O(38)	210(1)	O(37)-C(127)	134,7(2)
Mn(4)-O(16)	244,6(7)	Mn(10)-O(40)	209(1)	O(38)-C(127)	124(2)
Mn(4)-O(17)	207,4(8)	O(1)-C(1)	126(1)	O(39)-C(134)	127(2)
Mn(4)-O(20)	223,2(7)	O(2)-C(1)	125(2)	O(40)-C(134)	122(2)

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* = -x; 1-y; z; # = 0,5-x; -0,5+y; -z, \$ = 0,5-x; -0,5+y; 1-z,

§ = 0,5-x; 0,5+y; 1-z, “ = 0,5-x; 0,5+y; -z.

Tabelle 10.6.4: Ausgewählte Winkel [grad] von Mn<sub>19</sub>(OBz)<sub>38</sub>(HOBz)<sub>2</sub>.

Mn(1)-Mn(2)-Mn(3)	131,49(6)	Mn(3)-O(6)-C(15)	177,0(8)	O(1)-Mn(1)-O(5*)	175,4(3)
Mn(1)-Mn(2)-Mn(10#)	99,13(6)	Mn(3)-O(8)-C(22)	140,8(7)	O(1*)-Mn(1)-O(3)	93,6(3)
Mn(2)-Mn(1)-Mn(2*)	179,98(6)	Mn(3)-O(10)-C(29)	128,5(7)	O(1*)-Mn(1)-O(3*)	95,2(3)
Mn(2)-Mn(3)-Mn(4)	153,70(6)	Mn(3)-O(11)-C(36)	142,9(7)	O(1*)-Mn(1)-O(5)	175,4(3)
Mn(2)-Mn(10#)-Mn(9#)	167,87(8)	Mn(3)-O(13)-C(43)	139,9(7)	O(1*)-Mn(1)-O(5*)	82,7(3)
Mn(3)-Mn(2)-Mn(10#)	127,25(6)	Mn(3)-O(15)-C(50)	143,5(7)	O(3)-Mn(1)-O(3*)	167,2(4)
Mn(3)-Mn(4)-Mn(5)	105,54(6)	Mn(4)-O(11)-C(36)	90,3(6)	O(3)-Mn(1)-O(5)	84,2(3)
Mn(3)-Mn(4)-Mn(7\$)	124,40(6)	Mn(4)-O(12)-C(36)	93,6(6)	O(3)-Mn(1)-O(5*)	87,7(3)
Mn(4)-Mn(5)-Mn(6)	160,62(6)	Mn(4)-O(14)-C(43)	124,1(6)	O(3*)-Mn(1)-O(5)	87,7(3)
Mn(4)-Mn(7\$)-Mn(6\$)	159,29(6)	Mn(4)-O(15)-C(50)	95,5(6)	O(3*)-Mn(1)-O(5*)	84,2(3)
Mn(5)-Mn(4)-Mn(7\$)	118,48(6)	Mn(4)-O(16)-C(50)	90,3(6)	O(5)-Mn(1)-O(5*)	101,2(4)
Mn(5)-Mn(6)-Mn(7)	127,06(6)	Mn(4)-O(17)-C(57)	132,2(7)	O(1)-Mn(2)-O(2)	50,6(3)
Mn(5)-Mn(6)-Mn(8)	126,10(6)	Mn(4)-O(20)-C(64)	121,1(6)	O(1)-Mn(2)-O(4)	91,2(3)
Mn(6)-Mn(8)-Mn(9)	162,41(7)	Mn(5)-O(14)-C(43)	135,5(7)	O(1)-Mn(2)-O(5)	72,9(2)
Mn(7)-Mn(6)-Mn(8)	103,27(5)	Mn(5)-O(16)-C(50)	134,8(6)	O(1)-Mn(2)-O(6)	116,7(3)
Mn(8)-Mn(9)-Mn(10)	118,53(7)	Mn(5)-O(20)-C(64)	132,3(6)	O(1)-Mn(2)-O(7)	118,2(3)
Mn(1)-O(1)-Mn(2)	93,0(3)	Mn(5)-O(21)-C(71)	145,6(6)	O(1)-Mn(2)-O(8)	169,8(3)
Mn(1)-O(1*)-Mn(2*)	93,0(3)	Mn(5)-O(23)-C(78)	133,5(6)	O(1)-Mn(2)-O(9)	79,5(3)
Mn(1)-O(5)-Mn(2)	100,5(3)	Mn(5)-O(25)-C(85)	145,4(7)	O(2)-Mn(2)-O(4)	75,7(3)
Mn(1)-O(5*)-Mn(2*)	100,5(3)	Mn(6)-O(21)-C(71)	91,6(6)	O(2)-Mn(2)-O(5)	120,8(3)
Mn(2)-O(2)-Mn(10#)	88,7(3)	Mn(6)-O(22)-C(71)	91,1(6)	O(2)-Mn(2)-O(6)	162,2(3)
Mn(2)-O(4)-Mn(10#)	91,5(3)	Mn(6)-O(24)-C(78)	134,1(6)	O(2)-Mn(2)-O(7)	67,6(3)
Mn(2)-O(6)-Mn(3)	94,6(3)	Mn(6)-O(26)-C(85)	118,1(7)	O(2)-Mn(2)-O(8)	120,7(3)
Mn(2)-O(7)-Mn(10#)	85,4(3)	Mn(6)-O(28)-C(92)	116,3(7)	O(2)-Mn(2)-O(9)	82,3(3)
Mn(2)-O(8)-Mn(3)	98,6(3)	Mn(6)-O(29)-C(99)	119,1(7)	O(4)-Mn(2)-O(5)	91,1(3)
Mn(3)-O(11)-Mn(4)	97,8(3)	Mn(7)-O(12\$)-C(36\$)	142,1(6)	O(4)-Mn(2)-O(6)	119,8(3)
Mn(3)-O(15)-Mn(4)	98,6(3)	Mn(7)-O(18)-C(57#)	141,5(7)	O(4)-Mn(2)-O(7)	72,9(3)
Mn(4)-O(12)-Mn(7\$)	107,1(3)	Mn(7)-O(19)-C(64#)	143,5(7)	O(4)-Mn(2)-O(8)	91,3(3)
Mn(4)-O(14)-Mn(5)	90,9(2)	Mn(7)-O(22)-C(71)	135,8(6)	O(4)-Mn(2)-O(9)	157,1(3)
Mn(4)-O(16)-Mn(5)	87,3(2)	Mn(7)-O(27)-C(92)	137,8(7)	O(5)-Mn(2)-O(6)	54,8(2)
Mn(4)-O(20)-Mn(5)	91,0(3)	Mn(7)-O(29)-C(99)	128,3(7)	O(5)-Mn(2)-O(7)	160,0(3)
Mn(5)-O(21)-Mn(6)	102,8(3)	Mn(8)-O(26)-C(85)	148,8(7)	O(5)-Mn(2)-O(8)	117,0(3)
Mn(6)-O(22)-Mn(7)	98,2(3)	Mn(8)-O(28)-C(92)	142,5(7)	O(5)-Mn(2)-O(9)	105,7(4)
Mn(6)-O(26)-Mn(8)	92,7(3)	Mn(8)-O(30)-C(99)	137,8(8)	O(6)-Mn(2)-O(7)	123,0(3)
Mn(6)-O(28)-Mn(8)	95,8(3)	Mn(8)-O(31)-C(106)	145,0(8)	O(6)-Mn(2)-O(8)	70,2(3)
Mn(6)-O(29)-Mn(7)	93,9(3)	Mn(8)-O(33)-C(113)	134(1)	O(6)-Mn(2)-O(9)	82,9(3)
Mn(8)-O(33)-Mn(9)	89,1(2)	Mn(8)-O(35)-C(120)	133,9(7)	O(7)-Mn(2)-O(8)	53,4(3)
Mn(8)-O(35)-Mn(9)	107,4(3)	Mn(9)-O(32)-C(106)	126,5(8)	O(7)-Mn(2)-O(9)	93,0(3)
Mn(9)-C(36)-Mn(10)	104,4(3)	Mn(9)-O(33)-C(113)	128,9(9)	O(8)-Mn(2)-O(9)	94,6(3)
Mn(1)-O(1)-C(1)	149,2(7)	Mn(9)-O(35)-C(120)	93,4(6)	O(6)-Mn(3)-O(8)	80,7(3)
Mn(1)-O(1*)-C(1*)	149,2(7)	Mn(9)-O(36)-C(120)	93,2(7)	O(6)-Mn(3)-O(10)	94,5(3)
Mn(1)-O(3)-C(8)	139,4(7)	Mn(9)-O(37)-C(127)	133(1)	O(6)-Mn(3)-O(11)	87,3(3)
Mn(1)-O(3*)-C(8*)	139,4(7)	Mn(9)-O(39)-C(134)	131,6(9)	O(6)-Mn(3)-O(13)	172,0(3)
Mn(1)-O(5)-C(15)	155,3(7)	Mn(10)-O(2\$)-C(1\$)	152,0(8)	O(6)-Mn(3)-O(15)	94,1(3)
Mn(1)-O(5*)-C(15*)	155,3(7)	Mn(10)-O(4\$)-C(8\$)	122,7(6)	O(8)-Mn(3)-O(10)	95,2(3)
Mn(2)-O(1)-C(1)	90,9(7)	Mn(10)-O(7\$)-C(22\$)	143,7(8)	O(8)-Mn(3)-O(11)	95,1(3)
Mn(2)-O(2)-C(1)	95,5(8)	Mn(10)-O(36)-C(120)	143,2(8)	O(8)-Mn(3)-O(13)	93,2(3)
Mn(2)-O(4)-C(8)	124,3(7)	Mn(10)-O(38)-C(127)	150(1)	O(8)-Mn(3)-O(15)	170,0(3)
Mn(2)-O(5)-C(15)	99,1(6)	Mn(10)-O(40)-C(134)	134(1)	O(10)-Mn(3)-O(11)	169,7(3)
Mn(2)-O(6)-C(15)	87,3(7)	O(1)-Mn(1)-O(1*)	93,5(4)	O(10)-Mn(3)-O(13)	91,1(3)
Mn(2)-O(7)-C(22)	88,0(7)	O(1)-Mn(1)-O(3)	95,2(3)	O(10)-Mn(3)-O(15)	93,7(3)
Mn(2)-O(8)-C(22)	97,8(7)	O(1)-Mn(1)-O(3*)	93,6(3)	O(11)-Mn(3)-O(13)	88,2(3)
Mn(2)-O(9)-C(29)	137,2(8)	O(1)-Mn(1)-O(5)	82,7(3)	O(11)-Mn(3)-O(15)	76,0(3)

O(13)-Mn(3)-O(15)	91,2(3)	O(22)-Mn(6)-O(28)	105,1(3)	O(33)-Mn(9)-O(36)	75,1(3)
O(11)-Mn(4)-O(12)	56,1(2)	O(22)-Mn(6)-O(29)	76,5(3)	O(33)-Mn(9)-O(37)	165,0(3)
O(11)-Mn(4)-O(14)	101,5(3)	O(24)-Mn(6)-O(26)	99,3(3)	O(33)-Mn(9)-O(39)	84,8(3)
O(11)-Mn(4)-O(15)	70,1(2)	O(24)-Mn(6)-O(28)	85,0(3)	O(35)-Mn(9)-O(36)	56,4(3)
O(11)-Mn(4)-O(16)	124,2(2)	O(24)-Mn(6)-O(29)	159,7(3)	O(35)-Mn(9)-O(37)	100,7(3)
O(11)-Mn(4)-O(17)	93,1(3)	O(26)-Mn(6)-O(28)	85,1(3)	O(35)-Mn(9)-O(39)	140,9(3)
O(11)-Mn(4)-O(20)	159,9(2)	O(26)-Mn(6)-O(29)	97,1(3)	O(36)-Mn(9)-O(37)	95,0(4)
O(12)-Mn(4)-O(14)	100,4(2)	O(28)-Mn(6)-O(29)	84,6(3)	O(36)-Mn(9)-O(39)	94,0(3)
O(12)-Mn(4)-O(15)	126,0(3)	O(12#)-Mn(7)-O(18)	94,1(3)	O(37)-Mn(9)-O(39)	107,4(4)
O(12)-Mn(4)-O(16)	173,7(2)	O(12#)-Mn(7)-O(19)	84,5(2)	O(2\$)-Mn(10)-O(4\$)	81,2(3)
O(12)-Mn(4)-O(17)	91,9(3)	O(12#)-Mn(7)-O(22)	91,2(2)	O(2\$)-Mn(10)-O(7\$)	82,2(4)
O(12)-Mn(4)-O(20)	104,7(2)	O(12#)-Mn(7)-O(27)	92,6(3)	O(2\$)-Mn(10)-O(36)	91,7(4)
O(14)-Mn(4)-O(15)	84,9(2)	O(12#)-Mn(7)-O(29)	167,9(2)	O(2\$)-Mn(10)-O(38)	168,7(4)
O(14)-Mn(4)-O(16)	73,3(2)	O(18)-Mn(7)-O(19)	94,1(3)	O(2\$)-Mn(10)-O(40)	94,4(4)
O(14)-Mn(4)-O(17)	164,5(3)	O(18)-Mn(7)-O(22)	174,5(3)	O(4\$)-Mn(10)-O(7\$)	79,5(3)
O(14)-Mn(4)-O(20)	74,3(2)	O(18)-Mn(7)-O(27)	93,5(3)	O(4\$)-Mn(10)-O(36)	172,1(3)
O(15)-Mn(4)-O(16)	54,2(2)	O(18)-Mn(7)-O(29)	97,9(3)	O(4\$)-Mn(10)-O(38)	96,9(3)
O(15)-Mn(4)-O(17)	95,6(3)	O(19)-Mn(7)-O(22)	87,3(3)	O(4\$)-Mn(10)-O(40)	86,0(4)
O(15)-Mn(4)-O(20)	127,9(3)	O(19)-Mn(7)-O(27)	172,0(3)	O(7\$)-Mn(10)-O(36)	96,3(3)
O(16)-Mn(4)-O(17)	94,4(3)	O(19)-Mn(7)-O(29)	92,8(2)	O(7\$)-Mn(10)-O(38)	86,5(4)
O(16)-Mn(4)-O(20)	74,1(2)	O(22)-Mn(7)-O(27)	85,3(3)	O(7\$)-Mn(10)-O(40)	165,5(4)
O(17)-Mn(4)-O(20)	93,6(3)	O(22)-Mn(7)-O(29)	76,8(3)	O(36)-Mn(10)-O(38)	89,5(4)
O(14)-Mn(5)-O(16)	79,0(2)	O(27)-Mn(7)-O(29)	88,5(3)	O(36)-Mn(10)-O(40)	97,9(4)
O(14)-Mn(5)-O(20)	74,1(2)	O(26)-Mn(8)-O(28)	80,9(3)	O(38)-Mn(10)-O(40)	96,5(5)
O(14)-Mn(5)-O(21)	161,7(2)	O(26)-Mn(8)-O(30)	88,0(3)	O(1)-C(1)-O(2)	118(1)
O(14)-Mn(5)-O(23)	101,3(2)	O(26)-Mn(8)-O(31)	87,6(3)	O(3)-C(8)-O(4)	126(1)
O(14)-Mn(5)-O(25)	93,7(2)	O(26)-Mn(8)-O(33)	172,3(3)	O(5)-C(15)-O(6)	119(1)
O(16)-Mn(5)-O(20)	79,7(3)	O(26)-Mn(8)-O(35)	101,7(3)	O(7)-C(22)-O(8)	121(1)
O(16)-Mn(5)-O(21)	82,8(2)	O(28)-Mn(8)-O(30)	87,9(3)	O(9)-C(29)-O(10)	126(1)
O(16)-Mn(5)-O(23)	171,8(3)	O(28)-Mn(8)-O(31)	91,5(3)	O(11)-C(36)-O(12)	119,9(9)
O(16)-Mn(5)-O(25)	94,8(3)	O(28)-Mn(8)-O(33)	105,9(3)	O(13)-C(43)-O(14)	122(1)
O(20)-Mn(5)-O(21)	104,6(2)	O(28)-Mn(8)-O(35)	176,3(3)	O(15)-C(50)-O(16)	120,0(9)
O(20)-Mn(5)-O(23)	92,4(3)	O(30)-Mn(8)-O(31)	175,6(4)	O(17)-C(57)-O(18")	123(1)
O(20)-Mn(5)-O(25)	167,3(3)	O(30)-Mn(8)-O(33)	96,0(4)	O(19"-C(64)-O(20)	122(1)
O(21)-Mn(5)-O(23)	97,0(2)	O(30)-Mn(8)-O(35)	89,5(3)	O(21)-C(71)-O(22)	118,5(9)
O(21)-Mn(5)-O(25)	85,9(3)	O(31)-Mn(8)-O(33)	88,4(3)	O(23)-C(78)-O(24)	124,2(9)
O(23)-Mn(5)-O(25)	93,3(3)	O(31)-Mn(8)-O(35)	91,4(3)	O(25)-C(85)-O(26)	122(1)
O(21)-Mn(6)-O(22)	58,8(2)	O(33)-Mn(8)-O(35)	71,8(3)	O(27)-C(92)-O(28)	124,5(9)
O(21)-Mn(6)-O(24)	89,3(2)	O(32)-Mn(9)-O(33)	86,1(4)	O(29)-C(99)-O(30)	126(1)
O(21)-Mn(6)-O(26)	111,7(3)	O(32)-Mn(9)-O(35)	104,3(3)	O(31)-C(106)-O(32)	124(1)
O(21)-Mn(6)-O(28)	163,0(3)	O(32)-Mn(9)-O(36)	157,4(3)	O(33)-C(113)-O(34)	114(1)
O(21)-Mn(6)-O(29)	95,6(2)	O(32)-Mn(9)-O(37)	100,7(4)	O(35)-C(120)-O(36)	115(1)
O(22)-Mn(6)-O(24)	89,5(3)	O(32)-Mn(9)-O(39)	96,7(4)	O(37)-C(127)-O(38)	116(2)
O(22)-Mn(6)-O(26)	167,1(3)	O(33)-Mn(9)-O(35)	64,5(3)	O(39)-C(134)-O(40)	129(1)

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* = -x; 1-y; z; # = 0,5-x; -0,5+y; -z, \$ = 0,5-x; -0,5+y; 1-z,

§ = 0,5-x; 0,5+y; 1-z, “ = 0,5-x; 0,5+y; -z.

## 10.7 Fe<sub>3</sub>(OBz)<sub>6</sub>(HOBz)

**Tabelle 10.7.1:** Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ( $\text{\AA}^2 \cdot 10^{-3}$ ) von Fe<sub>3</sub>(OBz)<sub>6</sub>(HOBz).

Atom	Lage	x/a	y/b	z/c	U <sub>(eq)</sub>
Fe(1)	4e	0,78498(2)	0,11401(5)	0,01708(2)	0,0458(1)
Fe(2)	4e	0,72934(2)	0,41392(5)	0,07101(2)	0,0465(2)
Fe(3)	4e	0,72561(2)	0,75006(5)	0,01210(2)	0,0423(1)
O(1)	4e	0,6903(2)	-0,1544(3)	-0,0656(1)	0,0619(7)
O(2)	4e	0,7171(1)	0,0850(3)	-0,0617(1)	0,0616(7)
O(3)	4e	0,8251(1)	0,7681(3)	0,0133(1)	0,0600(7)
O(4)	4e	0,8506(2)	0,9939(3)	-0,0103(1)	0,0646(7)
O(5)	4e	0,7659(1)	0,6492(2)	0,09790(9)	0,0475(6)
O(6)	4e	0,8598(1)	0,7611(4)	0,1289(1)	0,083(1)
O(7)	4e	0,64305(2)	0,4894(3)	0,0725(1)	0,0520(6)
O(8)	4e	0,6374(2)	0,7031(3)	0,0241(1)	0,0529(6)
O(9)	4e	0,7978(2)	0,3348(3)	-0,0006(1)	0,0710(8)
O(10)	4e	0,7269(2)	0,5129(3)	-0,0111(1)	0,0595(7)
O(11)	4e	0,8461(1)	0,1470(3)	0,1007(1)	0,0526(6)
O(12)	4e	0,8046(2)	0,3479(3)	0,1328(1)	0,0633(7)
O(13)	4e	0,7317(1)	-0,0419(2)	0,05929(9)	0,0457(5)
O(14)	4e	0,7024(1)	0,1904(2)	0,0516(1)	0,0497(6)
C(1)	4e	0,6867(2)	-0,0249(4)	-0,0862(2)	0,0477(8)
C(2)	4e	0,6431(2)	-0,0050(4)	-0,1453(1)	0,0469(8)
C(3)	4e	0,6421(2)	0,1298(4)	-0,1730(2)	0,063(1)
C(4)	4e	0,6029(3)	0,1484(6)	-0,2286(2)	0,084(2)
C(5)	4e	0,5658(2)	0,0337(7)	-0,2558(2)	0,086(2)
C(6)	4e	0,5654(2)	-0,0999(6)	-0,2290(2)	0,075(1)
C(7)	4e	0,6042(2)	-0,1203(5)	-0,1731(2)	0,059(1)
C(8)	4e	0,8579(2)	0,8562(4)	-0,0090(2)	0,0498(9)
C(9)	4e	0,9091(2)	0,7926(4)	-0,0332(2)	0,0509(9)
C(10)	4e	0,9513(2)	0,8860(5)	-0,0508(2)	0,066(1)
C(11)	4e	1,0000(2)	0,8277(7)	-0,0718(2)	0,086(2)
C(12)	4e	1,0051(2)	0,6774(8)	-0,0771(2)	0,092(2)
C(13)	4e	0,9626(3)	0,5855(6)	-0,0619(2)	0,091(2)
C(14)	4e	0,9144(2)	0,6422(5)	-0,0395(2)	0,068(1)
C(15)	4e	0,8102(2)	0,6935(4)	0,1383(2)	0,0486(8)
C(16)	4e	0,8097(2)	0,6762(4)	0,1987(2)	0,0515(9)
C(17)	4e	0,8598(2)	0,7311(5)	0,2428(2)	0,075(1)
C(18)	4e	0,8567(3)	0,7112(7)	0,2992(2)	0,099(2)
C(19)	4e	0,8058(3)	0,6369(7)	0,3104(2)	0,103(2)
C(20)	4e	0,7571(3)	0,5849(6)	0,2672(2)	0,086(2)
C(21)	4e	0,7582(2)	0,6043(5)	0,2110(2)	0,062(1)
C(22)	4e	0,6134(2)	0,6068(4)	0,0497(2)	0,0459(8)
C(23)	4e	0,5471(2)	0,6314(4)	0,0558(1)	0,0448(8)
C(24)	4e	0,5150(2)	0,7628(5)	0,0367(2)	0,061(1)
C(25)	4e	0,4537(2)	0,7873(5)	0,0431(2)	0,071(1)
C(26)	4e	0,4240(2)	0,6811(6)	0,0673(2)	0,073(1)
C(27)	4e	0,4550(2)	0,5488(6)	0,0854(2)	0,073(1)
C(28)	4e	0,5169(2)	0,5253(5)	0,0801(2)	0,059(1)
C(29)	4e	0,7624(2)	0,4288(4)	-0,0317(2)	0,0482(8)
C(30)	4e	0,7596(2)	0,4394(4)	-0,0934(2)	0,0525(9)
C(31)	4e	0,7154(3)	0,5325(5)	-0,1289(2)	0,076(2)

Atom	Lage	x/a	y/b	z/c	$U_{(eq)}$
C(32)	4e	0,7093(4)	0,5371(7)	-0,1867(2)	0,115(2)
C(33)	4e	0,7467(5)	0,4533(9)	-0,2095(3)	0,133(3)
C(34)	4e	0,7919(4)	0,3608(9)	-0,1768(3)	0,125(2)
C(35)	4e	0,7985(2)	0,3503(6)	-0,1168(2)	0,087(2)
C(36)	4e	0,8444(2)	0,2388(4)	0,1391(2)	0,0488(8)
C(37)	4e	0,8904(2)	0,2211(4)	0,1969(2)	0,0485(8)
C(38)	4e	0,8932(2)	0,3260(5)	0,2392(2)	0,065(1)
C(39)	4e	0,9361(2)	0,3096(6)	0,2933(2)	0,076(2)
C(40)	4e	0,9749(2)	0,1876(6)	0,3051(2)	0,079(2)
C(41)	4e	0,9722(2)	0,0814(6)	0,2640(2)	0,087(2)
C(42)	4e	0,9303(2)	0,0994(5)	0,2097(2)	0,071(1)
C(43)	4e	0,6966(2)	0,0616(4)	0,0707(2)	0,0429(7)
C(44)	4e	0,6512(2)	0,0326(4)	0,1053(2)	0,0443(8)
C(45)	4e	0,6025(2)	0,1333(4)	0,1057(2)	0,059(1)
C(46)	4e	0,5581(2)	0,1016(5)	0,1365(2)	0,073(1)
C(47)	4e	0,5630(2)	-0,0278(5)	0,1671(2)	0,075(1)
C(48)	4e	0,6119(2)	-0,1275(5)	0,1682(2)	0,064(1)
C(49)	4e	0,6557(2)	-0,0979(4)	0,1373(2)	0,0525(9)

Tabelle 10.7.2: Anisotrope Auslenkungsparameter ( $\text{\AA}^2 \cdot 10^{-3}$ )  $\text{Fe}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})$ .

Atom	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{23}$	$U^{13}$	$U^{12}$
Fe(1)	0,0518(3)	0,0398(3)	0,0474(3)	0,0003(2)	0,0158(2)	0,0016(2)
Fe(2)	0,0504(3)	0,0410(3)	0,0493(3)	0,0026(2)	0,0153(2)	0,0038(2)
Fe(3)	0,0497(3)	0,0367(2)	0,0427(2)	0,0020(2)	0,0163(2)	0,0010(2)
O(1)	0,084(2)	0,047(2)	0,051(2)	0,005(1)	0,011(2)	0,004(2)
O(2)	0,075(2)	0,051(2)	0,052(2)	0,002(2)	0,006(1)	-0,006(2)
O(3)	0,057(2)	0,064(2)	0,066(2)	0,012(2)	0,030(2)	0,007(2)
O(4)	0,068(2)	0,056(2)	0,078(2)	-0,007(2)	0,035(2)	0,000(1)
O(5)	0,055(2)	0,040(1)	0,045(1)	0,003(1)	0,008(1)	-0,002(1)
O(6)	0,057(2)	0,125(3)	0,063(2)	0,021(2)	0,008(1)	-0,028(2)
O(7)	0,052(2)	0,043(2)	0,063(1)	0,005(1)	0,019(1)	0,005(1)
O(8)	0,052(2)	0,050(2)	0,058(2)	0,005(1)	0,015(2)	0,001(1)
O(9)	0,080(2)	0,047(2)	0,074(2)	0,014(2)	-0,002(2)	-0,007(2)
O(10)	0,082(2)	0,043(2)	0,061(2)	-0,009(1)	0,034(2)	-0,007(1)
O(11)	0,051(2)	0,051(2)	0,054(2)	-0,001(1)	0,012(1)	0,007(1)
O(12)	0,073(2)	0,054(2)	0,055(2)	-0,003(2)	0,004(1)	0,016(2)
O(13)	0,052(2)	0,037(1)	0,051(1)	-0,003(1)	0,018(1)	0,003(1)
O(14)	0,053(2)	0,038(2)	0,061(2)	0,002(1)	0,019(1)	0,002(1)
C(1)	0,056(2)	0,048(2)	0,041(2)	0,007(2)	0,017(2)	0,009(2)
C(2)	0,053(2)	0,050(2)	0,040(2)	0,001(2)	0,014(2)	0,008(2)
C(3)	0,078(3)	0,059(2)	0,046(2)	0,009(2)	0,010(2)	0,007(2)
C(4)	0,105(4)	0,085(3)	0,055(2)	0,017(2)	0,011(3)	0,013(3)
C(5)	0,084(4)	0,120(4)	0,048(2)	0,004(3)	0,009(2)	0,024(3)
C(6)	0,061(3)	0,099(4)	0,060(2)	-0,022(3)	0,007(2)	0,004(3)
C(7)	0,056(2)	0,064(2)	0,057(2)	-0,009(2)	0,015(2)	0,002(2)
C(8)	0,046(2)	0,060(2)	0,045(2)	0,000(2)	0,016(2)	0,002(2)
C(9)	0,047(2)	0,062(2)	0,047(2)	-0,003(2)	0,018(2)	0,002(2)
C(10)	0,057(2)	0,081(3)	0,065(2)	-0,011(2)	0,026(2)	-0,009(2)
C(11)	0,060(3)	0,125(5)	0,086(3)	-0,017(3)	0,042(3)	-0,017(3)
C(12)	0,067(3)	0,126(5)	0,094(3)	-0,020(3)	0,039(3)	0,017(3)
C(13)	0,090(4)	0,082(3)	0,110(4)	-0,013(3)	0,041(3)	0,024(3)
C(14)	0,060(3)	0,065(3)	0,084(3)	-0,003(2)	0,027(2)	0,007(2)

Atom	U <sup>11</sup>	U <sup>22</sup>	U <sup>33</sup>	U <sup>23</sup>	U <sup>13</sup>	U <sup>12</sup>
C(15)	0,049(2)	0,047(2)	0,047(2)	0,004(2)	0,008(2)	0,000(2)
C(16)	0,057(2)	0,051(2)	0,044(2)	0,002(2)	0,007(2)	0,004(2)
C(17)	0,081(3)	0,079(3)	0,056(2)	-0,002(2)	0,003(2)	-0,011(3)
C(18)	0,111(5)	0,121(5)	0,048(2)	-0,018(3)	-0,006(3)	0,000(4)
C(19)	0,117(5)	0,141(5)	0,056(3)	0,010(3)	0,032(3)	0,015(4)
C(20)	0,085(3)	0,121(4)	0,057(2)	0,009(3)	0,029(2)	0,004(3)
C(21)	0,061(3)	0,073(3)	0,054(2)	0,005(2)	0,019(2)	0,004(2)
C(22)	0,048(2)	0,044(2)	0,045(2)	-0,005(2)	0,013(2)	-0,001(2)
C(23)	0,042(2)	0,047(2)	0,044(2)	-0,006(2)	0,008(2)	0,003(2)
C(24)	0,050(2)	0,059(2)	0,070(2)	0,002(2)	0,008(2)	0,005(2)
C(25)	0,052(2)	0,073(3)	0,081(3)	-0,007(2)	0,008(2)	0,017(2)
C(26)	0,046(2)	0,101(4)	0,071(3)	-0,009(3)	0,016(2)	0,012(2)
C(27)	0,060(3)	0,086(3)	0,081(3)	0,005(2)	0,032(2)	-0,002(2)
C(28)	0,055(2)	0,062(2)	0,064(2)	0,003(2)	0,023(2)	0,004(2)
C(29)	0,057(2)	0,035(2)	0,053(2)	-0,00(2)	0,014(2)	-0,007(2)
C(30)	0,062(2)	0,051(2)	0,048(2)	-0,005(2)	0,022(2)	-0,007(2)
C(31)	0,112(4)	0,060(3)	0,052(2)	0,001(2)	0,017(2)	0,005(3)
C(32)	0,193(7)	0,091(4)	0,052(3)	0,010(3)	0,019(4)	0,001(4)
C(33)	0,195(8)	0,151(7)	0,069(4)	0,000(4)	0,064(5)	-0,023(6)
C(34)	0,138(6)	0,162(7)	0,100(4)	-0,052(5)	0,077(4)	-0,013(5)
C(35)	0,081(3)	0,098(4)	0,090(3)	-0,024(3)	0,040(3)	0,006(3)
C(36)	0,050(2)	0,045(2)	0,050(2)	0,003(2)	0,010(2)	-0,001(2)
C(37)	0,045(2)	0,050(2)	0,049(2)	0,007(2)	0,010(2)	-0,001(2)
C(38)	0,068(3)	0,063(2)	0,057(2)	0,003(2)	0,003(2)	0,004(2)
C(39)	0,083(3)	0,078(3)	0,059(2)	-0,003(2)	0,002(2)	-0,003(3)
C(40)	0,061(3)	0,105(4)	0,062(3)	0,013(3)	-0,002(2)	-0,001(3)
C(41)	0,073(3)	0,098(4)	0,077(3)	0,013(3)	-0,001(2)	0,030(3)
C(42)	0,065(3)	0,075(3)	0,066(2)	0,003(2)	0,004(2)	0,020(2)
C(43)	0,047(2)	0,038(2)	0,042(2)	-0,003(1)	0,009(2)	0,000(2)
C(44)	0,048(2)	0,042(2)	0,046(2)	-0,006(2)	0,017(2)	-0,002(2)
C(45)	0,062(2)	0,051(2)	0,069(2)	-0,004(2)	0,029(2)	0,005(2)
C(46)	0,076(3)	0,064(3)	0,092(3)	-0,001(2)	0,047(3)	0,008(2)
C(47)	0,083(3)	0,077(3)	0,083(3)	-0,007(2)	0,052(3)	-0,003(3)
C(48)	0,084(3)	0,060(2)	0,055(2)	0,004(2)	0,030(2)	-0,004(2)
C(49)	0,061(2)	0,054(2)	0,046(2)	0,001(2)	0,020(2)	0,000(2)

Tabelle 10.7.3: Ausgewählte Bindungslängen [pm] von Fe<sub>3</sub>(OBz)<sub>6</sub>(HOBz).

Fe(1)-Fe(2)	335,90(7)	Fe(2)-O(10)	216,5(2)	O(4)-C(8)	125,1(4)
Fe(1)-Fe(3*)	351,34(7)	Fe(2)-O(12)	197,9(3)	O(5)-C(15)	123,5(4)
Fe(2)-Fe(3)	334,23(7)	Fe(2)-O(14)	211,6(2)	O(6)-C(15)	130,1(4)
Fe(1)-O(2)	208,5(3)	Fe(3)-O(1#)	202,2(2)	O(7)-C(22)	128,2(4)
Fe(1)-O(4*)	202,5(3)	Fe(3)-O(3)	213,8(3)	O(8)-C(22)	125,5(4)
Fe(1)-O(9)	207,1(3)	Fe(3)-O(5)	221,9(2)	O(9)-C(29)	124,8(4)
Fe(1)-O(11)	211,8(2)	Fe(3)-O(8)	203,8(3)	O(10)-C(29)	126,7(4)
Fe(1)-O(13)	222,6(2)	Fe(3)-O(10)	221,4(2)	O(11)-C(36)	125,2(4)
Fe(1)-O(14)	226,1(2)	Fe(3)-O(13#)	218,2(2)	O(12)-C(36)	128,7(4)
Fe(2)-O(5)	229,6(2)	O(1)-C(1)	126,4(4)	O(13)-C(43)	127,6(4)
Fe(2)-O(7)	198,6(2)	O(2)-C(1)	124,7(4)	O(14)-C(43)	126,9(4)
Fe(2)-O(9)	265,1(3)	O(3)-C(8)	127,4(4)		

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* = x; 1-y; z; # = x; 1+y; z.



**Tabelle 10.7.4: Ausgewählte Winkel [grad] von Fe<sub>3</sub>(OBz)<sub>6</sub>(HOBz).**

Fe(1)-Fe(2)-Fe(3)	122,42(2)	O(2)-Fe(1)-O(4*)	90,8(1)	O(9)-Fe(2)-O(14)	76,43(9)
Fe(1)-Fe(3*)-Fe(2*)	150,01(2)	O(2)-Fe(1)-O(9)	91,8(1)	O(10)-Fe(2)-O(12)	129,2(1)
Fe(2)-Fe(1)-Fe(3*)	127,05(2)	O(2)-Fe(1)-O(11)	174,3(1)	O(10)-Fe(2)-O(14)	104,57(9)
Fe(1)-O(9)-Fe(2)	89,8(1)	O(2)-Fe(1)-O(13)	91,10(9)	O(12)-Fe(2)-O(14)	90,1(1)
Fe(1)-O(13)-Fe(3*)	105,69(9)	O(2)-Fe(1)-O(14)	87,0(1)	O(1#)-Fe(3)-O(3)	96,2(1)
Fe(1)-O(14)-Fe(2)	100,17(9)	O(4*)-Fe(1)-O(9)	107,8(2)	O(1#)-Fe(3)-O(5)	178,8(1)
Fe(2)-O(5)-Fe(3)	95,48(9)	O(4*)-Fe(1)-O(11)	94,4(1)	O(1#)-Fe(3)-O(8)	95,0(1)
Fe(2)-O(10)-Fe(3)	99,49(9)	O(4*)-Fe(1)-O(13)	107,5(1)	O(1#)-Fe(3)-O(10)	101,7(1)
Fe(1)-O(2)-C(1)	133,2(2)	O(4*)-Fe(1)-O(14)	165,4(1)	O(1#)-Fe(3)-O(13#)	94,25(9)
Fe(1)-O(4*)-C(8*)	128,1(2)	O(9)-Fe(1)-O(11)	88,8(1)	O(3)-Fe(3)-O(5)	83,05(9)
Fe(1)-O(9)-C(29)	133,2(2)	O(9)-Fe(1)-O(13)	144,6(1)	O(3)-Fe(3)-O(8)	168,4(1)
Fe(1)-O(11)-C(36)	131,8(2)	O(9)-Fe(1)-O(14)	86,8(1)	O(3)-Fe(3)-O(10)	89,8(1)
Fe(1)-O(13)-C(43)	92,5(2)	O(11)-Fe(1)-O(13)	85,17(9)	O(3)-Fe(3)-O(13#)	90,4(1)
Fe(1)-O(14)-C(43)	91,1(2)	O(11)-Fe(1)-O(14)	87,36(9)	O(5)-Fe(3)-O(8)	85,84(9)
Fe(2)-O(5)-C(15)	131,0(2)	O(13)-Fe(1)-O(14)	58,18(8)	O(5)-Fe(3)-O(10)	79,21(9)
Fe(2)-O(7)-C(22)	129,4(2)	O(5)-Fe(2)-O(7)	85,90(9)	O(5)-Fe(3)-O(13#)	84,83(8)
Fe(2)-O(9)-C(29)	81,6(2)	O(5)-Fe(2)-O(9)	103,08(8)	O(8)-Fe(3)-O(10)	84,85(10)
Fe(2)-O(10)-C(29)	104,0(2)	O(5)-Fe(2)-O(10)	78,53(8)	O(8)-Fe(3)-O(13#)	91,90(9)
Fe(2)-O(12)-C(36)	134,7(2)	O(5)-Fe(2)-O(12)	85,1(1)	O(10)-Fe(3)-O(13#)	163,89(9)
Fe(2)-O(14)-C(43)	147,1(2)	O(5)-Fe(2)-O(14)	175,20(9)	O(1)-C(1)-O(2)	125,3(3)
Fe(3)-O(1#)-C(1#)	136,8(2)	O(7)-Fe(2)-O(9)	142,0(1)	O(3)-C(8)-O(4)	123,4(3)
Fe(3)-O(3)-C(8)	135,0(2)	O(7)-Fe(2)-O(10)	94,6(1)	O(5)-C(15)-O(6)	120,6(3)
Fe(3)-O(5)-C(15)	129,3(2)	O(7)-Fe(2)-O(12)	132,0(1)	O(7)-C(22)-O(8)	124,1(3)
Fe(3)-O(8)-C(22)	137,3(2)	O(7)-Fe(2)-O(14)	97,4(1)	O(9)-C(29)-O(10#)	120,4(3)
Fe(3)-O(10)-C(29)	136,7(2)	O(9)-Fe(2)-O(10)	52,7(1)	O(11)-C(36)-O(12)	124,7(3)
Fe(3)-O(13#)-C(43#)	141,7(2)	O(9)-Fe(2)-O(12)	85,9(1)	O(13)-C(43)-O(14)	118,0(3)

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* = x, 1-y, z; # = x, 1+y, z.

## 10.8 Ni<sub>3</sub>(OBz)<sub>6</sub>(HOBz)<sub>4</sub>

**Tabelle 10.8.1:** Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ( $\text{\AA}^2 \cdot 10^{-3}$ ) von Ni<sub>3</sub>(OBz)<sub>6</sub>(HOBz)<sub>4</sub>.

Atom	Lage	x/a	y/b	z/c	U <sub>(eq)</sub>
Ni(1)	1h	0,5	0,5	0,5	0,0337(4)
Ni(2)	2i	0,41334(8)	0,47183(9)	0,64134(4)	0,0421(3)
Ni(3)	1a	0	0	0	0,0294(3)
Ni(4)	2i	-0,02386(8)	-0,20937(9)	0,10024(4)	0,0484(3)
O(1)	2i	0,5047(4)	0,3947(4)	0,3613(2)	0,056(2)
O(2)	2i	0,4858(4)	0,3603(4)	0,4562(2)	0,049(2)
O(3)	2i	0,3205(4)	0,5236(4)	0,5157(2)	0,050(2)
O(4)	2i	0,2722(4)	0,5628(4)	0,6074(2)	0,055(2)
O(5)	2i	0,5215(4)	0,3889(4)	0,5723(2)	0,042(2)
O(6)	2i	0,5745(4)	0,3661(4)	0,6612(2)	0,050(2)
O(7)	2i	0,3490(6)	0,2553(6)	0,5660(2)	0,112(3)
O(8)	2i	0,3313(4)	0,3311(4)	0,6514(2)	0,056(2)
O(9)	2i	0,3457(4)	0,5078(4)	0,7236(2)	0,053(2)
O(10)	2i	0,4416(8)	0,6408(7)	0,7442(3)	0,169(4)
O(11)	2i	0,2008(5)	-0,3236(6)	0,1786(2)	0,089(2)
O(12)	2i	0,0085(5)	-0,3193(5)	0,1693(2)	0,058(2)
O(13)	2i	-0,1990(5)	-0,1982(5)	0,1261(2)	0,065(2)
O(14)	2i	-0,2914(5)	-0,0338(6)	0,0916(3)	0,136(3)
O(15)	2i	-0,0406(4)	-0,3247(5)	0,0395(2)	0,059(2)
O(16)	2i	-0,0817(4)	-0,1397(5)	0,0190(2)	0,050(2)
O(17)	2i	-0,0179(6)	-0,0809(5)	0,1481(2)	0,080(2)
O(18)	2i	-0,0332(4)	0,0568(5)	0,0837(2)	0,062(2)
O(19)	2i	0,1515(4)	-0,2302(5)	0,0802(2)	0,073(2)
O(20)	2i	0,1634(4)	-0,0882(4)	0,0171(2)	0,052(2)
C(1)	2i	0,4818(6)	0,3350(6)	0,4061(3)	0,043(2)
C(2)	2i	0,4494(6)	0,2232(6)	0,3937(3)	0,044(2)
C(3)	2i	0,433(1)	0,1919(9)	0,3394(5)	0,129(5)
C(4)	2i	0,405(2)	0,088(1)	0,3290(5)	0,153(6)
C(5)	2i	0,3914(9)	0,016(1)	0,3735(5)	0,102(4)
C(6)	2i	0,4074(8)	0,0450(8)	0,4281(4)	0,084(3)
C(7)	2i	0,4385(7)	0,1489(7)	0,4362(4)	0,062(2)
C(8)	2i	0,2506(7)	0,5692(6)	0,5558(3)	0,046(2)
C(9)	2i	0,1303(6)	0,6361(6)	0,5411(3)	0,043(2)
C(10)	2i	0,0831(6)	0,6202(6)	0,4908(4)	0,055(2)
C(11)	2i	-0,0292(7)	0,6781(8)	0,4776(4)	0,072(3)
C(12)	2i	-0,0925(7)	0,7514(8)	0,5163(4)	0,075(3)
C(13)	2i	-0,0440(7)	0,7699(7)	0,5670(4)	0,064(3)
C(14)	2i	0,0646(6)	0,7117(6)	0,5804(3)	0,053(2)
C(15)	2i	0,5968(6)	0,3434(6)	0,6083(3)	0,045(2)
C(16)	2i	0,7031(6)	0,2558(6)	0,5929(3)	0,040(2)
C(17)	2i	0,7150(7)	0,2058(6)	0,5389(3)	0,050(2)
C(18)	2i	0,8139(7)	0,1235(7)	0,5275(4)	0,064(2)
C(19)	2i	0,8979(8)	0,0903(8)	0,5649(5)	0,080(3)
C(20)	2i	0,8890(8)	0,1378(8)	0,6187(4)	0,083(3)
C(21)	2i	0,7891(6)	0,2232(6)	0,6326(3)	0,054(2)
C(22)	2i	0,3205(6)	0,2562(8)	0,6206(4)	0,054(2)
C(23)	2i	0,2743(6)	0,1556(7)	0,6416(3)	0,052(2)
C(24)	2i	0,2780(7)	0,0616(8)	0,6086(4)	0,072(3)

Atom	Lage	x/a	y/b	z/c	U <sub>(eq)</sub>
C(25)	2i	0,2387(8)	-0,0305(8)	0,6322(4)	0,077(3)
C(26)	2i	0,1952(8)	-0,0311(9)	0,6875(4)	0,090(3)
C(27)	2i	0,194(1)	0,0580(9)	0,7205(4)	0,097(4)
C(28)	2i	0,2314(8)	0,1523(9)	0,6994(4)	0,082(3)
C(29)	2i	0,3684(8)	0,5737(8)	0,7557(4)	0,071(3)
C(30)	2i	0,3195(7)	0,5825(7)	0,8168(3)	0,063(3)
C(31)	2i	0,2442(7)	0,5124(7)	0,8352(3)	0,058(2)
C(32)	2i	0,1962(7)	0,5195(7)	0,8911(3)	0,065(3)
C(33)	2i	0,2242(8)	0,5963(9)	0,9261(4)	0,088(3)
C(34)	2i	0,2999(9)	0,668(1)	0,9068(4)	0,103(4)
C(35)	2i	0,3478(9)	0,6589(9)	0,8531(4)	0,099(4)
C(36)	2i	0,0962(8)	-0,3466(7)	0,1962(4)	0,055(2)
C(37)	2i	0,0942(7)	-0,4098(6)	0,2505(3)	0,045(2)
C(38)	2i	0,2003(7)	-0,4537(7)	0,2774(4)	0,067(2)
C(39)	2i	0,1962(9)	-0,5104(8)	0,3291(4)	0,077(3)
C(40)	2i	0,094(1)	-0,5250(8)	0,3529(4)	0,075(3)
C(41)	2i	-0,0116(8)	-0,4812(8)	0,3279(4)	0,070(3)
C(42)	2i	-0,0113(6)	-0,4254(6)	0,2764(3)	0,053(2)
C(43)	2i	-0,2883(8)	-0,1265(9)	0,1240(4)	0,067(3)
C(44)	2i	-0,4021(7)	-0,1321(7)	0,1538(3)	0,058(2)
C(45)	2i	-0,4042(8)	-0,2196(8)	0,1912(4)	0,087(3)
C(46)	2i	-0,5067(9)	-0,2331(9)	0,2209(4)	0,106(4)
C(47)	2i	-0,6081(9)	-0,154(1)	0,2140(5)	0,105(4)
C(48)	2i	-0,6044(9)	-0,066(1)	0,1750(6)	0,143(6)
C(49)	2i	-0,5052(8)	-0,048(1)	0,1468(5)	0,128(5)
C(50)	2i	-0,0801(6)	-0,2446(8)	0,0055(3)	0,050(2)
C(51)	2i	-0,1334(7)	-0,2731(7)	-0,0463(3)	0,049(2)
C(52)	2i	-0,1248(7)	-0,3865(8)	-0,0583(4)	0,072(3)
C(53)	2i	-0,183(1)	-0,418(1)	-0,1044(5)	0,108(4)
C(54)	2i	-0,256(1)	-0,333(2)	-0,1347(5)	0,120(5)
C(55)	2i	-0,2626(9)	-0,220(1)	-0,1233(5)	0,099(4)
C(56)	2i	-0,2030(7)	-0,1905(8)	-0,0784(4)	0,068(3)
C(57)	2i	-0,0186(6)	0,0176(7)	0,1318(3)	0,046(2)
C(58)	2i	0,0096(6)	0,0928(7)	0,1779(3)	0,045(2)
C(59)	2i	0,0677(7)	0,0441(7)	0,2251(3)	0,061(2)
C(60)	2i	0,0953(8)	0,109(1)	0,2668(4)	0,082(3)
C(61)	2i	0,0612(9)	0,224(1)	0,2626(4)	0,088(3)
C(62)	2i	0,0009(9)	0,2755(8)	0,2169(4)	0,090(3)
C(63)	2i	-0,0249(7)	0,2080(8)	0,1741(4)	0,074(3)
C(64)	2i	0,2069(6)	-0,1731(8)	0,0458(3)	0,047(2)
C(65)	2i	0,3399(6)	-0,2173(7)	0,0404(3)	0,043(2)
C(66)	2i	0,3902(7)	-0,3210(8)	0,0594(4)	0,077(3)
C(67)	2i	0,5132(8)	-0,3608(9)	0,0530(4)	0,093(3)
C(68)	2i	0,5811(8)	-0,296(1)	0,0258(4)	0,090(3)
C(69)	2i	0,5325(8)	-0,191(1)	0,0063(4)	0,095(3)
C(70)	2i	0,4097(7)	-0,1497(8)	0,0126(3)	0,065(3)

**Tabelle 10.8.2: Anisotrope Auslenkungsparameter ( $\text{\AA}^2 \cdot 10^{-3}$ ) von  $\text{Ni}_3(\text{OBz})_6(\text{HOBz})_4$ .**

Atom	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{23}$	$U^{13}$	$U^{12}$
Ni(1)	0,0326(8)	0,0399(9)	0,0272(7)	0,0047(7)	0,0055(6)	-0,0065(6)
Ni(2)	0,0465(6)	0,0439(7)	0,0359(6)	0,0010(5)	0,0046(5)	-0,0111(5)
Ni(3)	0,0404(8)	0,0232(8)	0,0232(7)	-0,0001(6)	-0,0023(6)	-0,0030(6)
Ni(4)	0,0523(7)	0,0487(7)	0,0450(6)	0,0047(6)	0,0023(5)	-0,0141(5)
O(1)	0,073(4)	0,051(4)	0,047(3)	0,000(3)	0,007(3)	-0,022(3)
O(2)	0,063(3)	0,051(4)	0,036(3)	0,000(3)	-0,004(3)	-0,019(3)
O(3)	0,034(3)	0,062(4)	0,053(3)	-0,015(3)	0,005(2)	-0,007(3)
O(4)	0,049(3)	0,069(4)	0,041(3)	0,004(3)	0,004(3)	0,002(3)
O(5)	0,044(3)	0,045(3)	0,036(3)	-0,003(3)	-0,001(2)	-0,006(2)
O(6)	0,056(3)	0,054(4)	0,039(3)	0,006(3)	0,001(3)	-0,014(3)
O(7)	0,190(7)	0,133(7)	0,047(4)	-0,018(4)	0,030(4)	-0,121(6)
O(8)	0,064(4)	0,054(4)	0,056(4)	-0,022(3)	0,016(3)	-0,025(3)
O(9)	0,065(4)	0,062(4)	0,038(3)	-0,015(3)	0,012(3)	-0,027(3)
O(10)	0,27(1)	0,24(1)	0,056(5)	-0,072(5)	0,086(6)	-0,200(9)
O(11)	0,062(4)	0,144(6)	0,073(4)	0,035(4)	-0,005(3)	-0,054(4)
O(12)	0,055(4)	0,065(4)	0,052(3)	0,022(3)	-0,013(3)	-0,007(3)
O(13)	0,050(4)	0,059(4)	0,076(4)	0,012(4)	0,004(3)	0,009(3)
O(14)	0,080(5)	0,133(7)	0,164(7)	0,088(6)	0,059(5)	0,019(4)
O(15)	0,078(4)	0,048(4)	0,050(3)	0,001(3)	-0,009(3)	-0,010(3)
O(16)	0,056(3)	0,047(4)	0,046(3)	-0,003(3)	-0,003(3)	-0,011(3)
O(17)	0,164(6)	0,054(4)	0,037(3)	0,001(3)	-0,004(4)	-0,056(4)
O(18)	0,073(4)	0,065(4)	0,041(3)	-0,008(3)	0,005(3)	0,001(3)
O(19)	0,048(3)	0,098(5)	0,069(4)	0,039(4)	0,009(3)	-0,018(3)
O(20)	0,045(3)	0,043(3)	0,063(4)	0,009(3)	0,001(3)	-0,001(3)
C(1)	0,034(4)	0,047(5)	0,049(5)	0,004(5)	0,002(4)	-0,013(4)
C(2)	0,054(5)	0,039(5)	0,042(5)	-0,002(4)	-0,004(4)	-0,015(4)
C(3)	0,24(2)	0,10(1)	0,092(9)	0,018(8)	-0,050(9)	-0,13(1)
C(4)	0,32(2)	0,12(1)	0,064(8)	-0,001(8)	-0,042(9)	-0,15(1)
C(5)	0,130(9)	0,10(1)	0,093(9)	-0,005(8)	-0,017(7)	-0,071(7)
C(6)	0,107(8)	0,070(7)	0,082(8)	0,011(6)	0,017(6)	-0,041(6)
C(7)	0,089(6)	0,043(6)	0,059(6)	0,004(5)	0,009(5)	-0,026(5)
C(8)	0,054(5)	0,043(5)	0,045(5)	0,003(4)	0,005(4)	-0,021(4)
C(9)	0,040(5)	0,043(5)	0,046(5)	0,004(4)	0,003(4)	-0,011(4)
C(10)	0,043(5)	0,051(6)	0,075(6)	-0,016(5)	-0,004(4)	-0,012(4)
C(11)	0,059(6)	0,088(7)	0,066(6)	0,014(6)	-0,018(5)	-0,004(5)
C(12)	0,053(6)	0,077(7)	0,089(8)	0,018(6)	0,007(6)	-0,002(5)
C(13)	0,060(6)	0,048(6)	0,073(7)	0,003(5)	0,015(5)	0,013(5)
C(14)	0,057(5)	0,044(5)	0,052(5)	0,002(4)	0,005(4)	0,005(4)
C(15)	0,040(5)	0,044(5)	0,049(5)	0,000(5)	-0,001(4)	-0,008(4)
C(16)	0,032(4)	0,036(5)	0,049(5)	0,007(4)	-0,002(4)	0,000(3)
C(17)	0,063(5)	0,035(5)	0,049(5)	-0,008(4)	0,020(4)	-0,009(4)
C(18)	0,068(6)	0,058(6)	0,064(6)	0,004(5)	0,011(5)	-0,007(5)
C(19)	0,055(6)	0,070(7)	0,107(9)	0,009(7)	0,006(6)	0,002(5)
C(20)	0,074(7)	0,074(7)	0,091(8)	0,013(7)	-0,027(6)	0,009(5)
C(21)	0,048(5)	0,050(5)	0,062(5)	0,005(5)	-0,006(4)	-0,004(4)
C(22)	0,042(5)	0,070(7)	0,053(6)	0,002(5)	0,007(4)	-0,024(4)
C(23)	0,053(5)	0,054(6)	0,049(5)	-0,006(5)	0,006(4)	-0,014(4)
C(24)	0,077(6)	0,069(7)	0,076(7)	-0,021(6)	0,019(5)	-0,036(5)
C(25)	0,096(7)	0,066(7)	0,082(7)	-0,020(6)	0,012(6)	-0,047(6)
C(26)	0,104(8)	0,094(9)	0,083(8)	0,008(7)	0,009(6)	-0,050(7)
C(27)	0,16(1)	0,074(8)	0,071(7)	-0,013(7)	0,038(7)	-0,066(7)
C(28)	0,122(8)	0,085(8)	0,049(6)	-0,003(6)	0,008(5)	-0,047(6)

Atom	U <sup>11</sup>	U <sup>22</sup>	U <sup>33</sup>	U <sup>23</sup>	U <sup>13</sup>	U <sup>12</sup>
C(29)	0,090(7)	0,082(7)	0,051(6)	-0,017(5)	0,021(5)	-0,046(6)
C(30)	0,072(6)	0,070(7)	0,049(5)	-0,014(5)	0,015(5)	-0,021(5)
C(31)	0,065(6)	0,054(6)	0,051(5)	-0,015(5)	0,013(4)	-0,007(4)
C(32)	0,075(6)	0,066(7)	0,047(5)	0,004(5)	0,011(5)	-0,004(5)
C(33)	0,088(8)	0,12(1)	0,047(6)	-0,003(6)	0,016(5)	0,003(7)
C(34)	0,134(9)	0,13(1)	0,056(7)	-0,029(7)	0,022(6)	-0,058(8)
C(35)	0,141(9)	0,112(9)	0,060(6)	-0,050(6)	0,041(6)	-0,068(7)
C(36)	0,062(6)	0,051(6)	0,054(6)	0,001(5)	-0,013(5)	-0,009(5)
C(37)	0,053(5)	0,048(5)	0,036(4)	-0,002(4)	-0,004(4)	-0,011(4)
C(38)	0,063(6)	0,076(7)	0,065(6)	0,002(6)	-0,009(5)	-0,018(5)
C(39)	0,097(8)	0,071(7)	0,075(7)	0,025(6)	-0,038(6)	-0,039(6)
C(40)	0,122(9)	0,067(7)	0,052(6)	0,020(5)	-0,024(6)	-0,051(7)
C(41)	0,089(7)	0,073(7)	0,045(5)	0,008(5)	0,012(5)	-0,018(5)
C(42)	0,054(5)	0,048(5)	0,057(5)	-0,007(5)	0,008(4)	-0,015(4)
C(43)	0,063(6)	0,080(7)	0,058(6)	0,024(6)	0,007(5)	-0,015(5)
C(44)	0,058(6)	0,057(6)	0,050(5)	0,016(5)	0,007(4)	0,000(4)
C(45)	0,067(6)	0,088(8)	0,094(7)	0,030(7)	0,026(6)	-0,002(6)
C(46)	0,082(8)	0,107(9)	0,115(9)	0,036(8)	0,027(7)	0,000(7)
C(47)	0,068(7)	0,12(1)	0,12(1)	0,010(8)	0,032(7)	-0,022(7)
C(48)	0,078(8)	0,12(1)	0,21(2)	0,07(1)	0,064(9)	0,023(7)
C(49)	0,071(7)	0,12(1)	0,17(1)	0,050(9)	0,061(8)	0,019(7)
C(50)	0,037(5)	0,068(7)	0,038(5)	-0,004(5)	0,006(4)	0,002(4)
C(51)	0,049(5)	0,047(6)	0,051(5)	-0,003(5)	0,003(4)	-0,011(4)
C(52)	0,083(7)	0,074(7)	0,058(6)	-0,015(6)	0,003(5)	-0,012(5)
C(53)	0,098(9)	0,11(1)	0,12(1)	-0,085(9)	0,008(7)	-0,025(7)
C(54)	0,089(9)	0,18(2)	0,100(9)	-0,04(1)	-0,027(7)	-0,031(9)
C(55)	0,100(8)	0,11(1)	0,079(8)	-0,023(7)	0,002(6)	0,004(7)
C(56)	0,063(6)	0,092(8)	0,050(6)	-0,016(6)	0,006(5)	-0,015(5)
C(57)	0,051(5)	0,050(6)	0,033(5)	0,000(5)	0,011(4)	-0,007(4)
C(58)	0,050(5)	0,037(5)	0,047(5)	0,001(4)	0,011(4)	-0,011(4)
C(59)	0,074(6)	0,060(6)	0,048(5)	0,002(5)	-0,009(5)	-0,008(5)
C(60)	0,102(8)	0,094(9)	0,048(6)	-0,002(6)	-0,021(5)	-0,009(7)
C(61)	0,096(8)	0,10(1)	0,071(8)	-0,041(8)	0,006(6)	-0,028(7)
C(62)	0,121(9)	0,063(7)	0,075(7)	-0,026(7)	-0,001(7)	0,007(6)
C(63)	0,082(7)	0,084(8)	0,054(6)	-0,020(6)	-0,013(5)	-0,003(6)
C(64)	0,034(5)	0,074(7)	0,035(5)	-0,014(5)	0,008(4)	-0,014(4)
C(65)	0,043(5)	0,043(5)	0,042(5)	0,004(4)	-0,002(4)	-0,005(4)
C(66)	0,053(6)	0,094(8)	0,077(7)	0,013(6)	0,009(5)	-0,004(5)
C(67)	0,062(7)	0,092(8)	0,109(8)	0,029(7)	-0,004(6)	0,022(6)
C(68)	0,054(7)	0,104(9)	0,099(8)	0,018(7)	0,011(6)	0,009(6)
C(69)	0,058(7)	0,14(1)	0,095(8)	0,017(8)	0,012(6)	-0,031(7)
C(70)	0,043(5)	0,082(7)	0,068(6)	0,014(5)	0,004(4)	-0,009(5)

**Tabelle 10.8.3: Ausgewählte Bindungslängen [pm] von Ni<sub>3</sub>(OBz)<sub>6</sub>(HOBz)<sub>4</sub>.**

Ni(1)-Ni(2)	344,83(5)	Ni(4)-O(12)	206,6(5)	O(9)-C(29)	119,0(9)
Ni(3)-Ni(4)	344,34(5)	Ni(4)-O(13)	206,0(5)	O(10)-C(29)	129,8(9)
Ni(1)-O(2) (2x)	204,0(5)	Ni(4)-O(15)	206,8(5)	O(11)-C(36)	133,6(9)
Ni(1)-O(3) (2x)	204,9(4)	Ni(4)-O(16#)	215,0(5)	O(12)-C(36)	120,7(9)
Ni(1)-O(5) (2x)	212,6(5)	Ni(4)-O(17)	195,6(6)	O(13)-C(43)	120,5(9)
Ni(2)-O(1*)	202,5(5)	Ni(4)-O(19)	202,1(5)	O(14)-C(43)	133(1)
Ni(2)-O(4)	196,4(5)	O(1)-C(1)	130,4(8)	O(15)-C(50)	126,1(9)
Ni(2)-O(5)	213,7(4)	O(2)-C(1)	123,2(8)	O(16)-C(50)	130,9(9)
Ni(2)-O(6)	209,7(5)	O(3)-C(8)	127,0(7)	O(17)-C(57)	123,5(9)
Ni(2)-O(8)	210,7(5)	O(4)-C(8)	125,0(8)	O(18)-C(57)	121,9(8)
Ni(2)-O(9)	207,2(5)	O(5)-C(15)	127,9(8)	O(19)-C(64)	127,7(8)
Ni(3)-O(16) (2x)	211,7(5)	O(6)-C(15)	128,3(8)	O(20)-C(64)	124,1(9)
Ni(3)-O(18) (2x)	209,6(5)	O(7)-C(22)	130,9(8)		
Ni(3)-O(20) (2x)	202,3(5)	O(8)-C(22)	120,4(9)		

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* = 1-x, 1-y, 1-z; # = -x, -y, 2-z.

**Tabelle 10.8.4: Ausgewählte Winkel [grd] von Ni<sub>3</sub>(OBz)<sub>6</sub>(HOBz)<sub>4</sub>.**

Ni(2)-Ni(1)-Ni(2*)	180,0	O(3)-Ni(1)-O(3*)	180,0(3)	O(18)-Ni(3)-O(20)	92,4(2)
Ni(3)-Ni(4)-Ni(4*)	180,0	O(3)-Ni(1)-O(5)	88,3(2)	O(18)-Ni(3)-O(20#)	87,6(2)
Ni(1)-O(5)-Ni(2) (2x)	107,9(2)	O(3)-Ni(1)-O(5*)	91,7(2)	O(18#)-Ni(3)-O(20)	87,6(2)
Ni(3)-O(16)-Ni(4) (2x)	107,6(2)	O(3*)-Ni(1)-O(5)	91,7(2)	O(18#)-Ni(3)-O(20#)	92,4(2)
Ni(1)-O(2)-C(1) (2x)	137,2(5)	O(3*)-Ni(1)-O(5*)	88,3(2)	O(20)-Ni(3)-O(20#)	180,0(3)
Ni(1)-O(3)-C(8) (2x)	133,5(5)	O(5)-Ni(1)-O(5*)	180,000(1)	O(12)-Ni(4)-O(13)	84,2(2)
Ni(1)-O(5)-C(15) (2x)	142,5(5)	O(1*)-Ni(2)-O(4)	91,9(2)	O(12)-Ni(4)-O(15)	99,0(2)
Ni(2)-O(1*)-C(1*)	127,0(5)	O(1*)-Ni(2)-O(5)	93,6(2)	O(12)-Ni(4)-O(16#)	161,2(2)
Ni(2)-O(4)-C(8)	126,3(5)	O(1*)-Ni(2)-O(6)	88,7(2)	O(12)-Ni(4)-O(17)	90,5(2)
Ni(2)-O(5)-C(15)	88,4(4)	O(1*)-Ni(2)-O(8)	175,2(2)	O(12)-Ni(4)-O(19)	90,9(2)
Ni(2)-O(6)-C(15)	90,1(4)	O(1*)-Ni(2)-O(9)	91,9(2)	O(13)-Ni(4)-O(15)	89,7(2)
Ni(2)-O(8)-C(22)	134,0(5)	O(4)-Ni(2)-O(5)	106,1(2)	O(13)-Ni(4)-O(16#)	88,3(2)
Ni(2)-O(9)-C(29)	129,0(5)	O(4)-Ni(2)-O(6)	168,9(2)	O(13)-Ni(4)-O(17)	89,6(2)
Ni(3)-O(16)-C(50) (2x)	143,4(4)	O(4)-Ni(2)-O(8)	91,1(2)	O(13)-Ni(4)-O(19)	175,1(2)
Ni(3)-O(18)-C(57) (2x)	137,8(5)	O(4)-Ni(2)-O(9)	92,8(2)	O(15)-Ni(4)-O(16#)	63,7(2)
Ni(3)-O(20)-C(64) (2x)	137,5(5)	O(5)-Ni(2)-O(6)	62,8(2)	O(15)-Ni(4)-O(17)	170,4(3)
Ni(4)-O(12)-C(36)	130,1(6)	O(5)-Ni(2)-O(8)	89,2(2)	O(15)-Ni(4)-O(19)	90,8(2)
Ni(4)-O(13)-C(43)	135,7(6)	O(5)-Ni(2)-O(9)	160,1(2)	O(16#)-Ni(4)-O(17)	106,7(2)
Ni(4)-O(15)-C(50)	90,3(5)	O(6)-Ni(2)-O(8)	89,0(2)	O(16#)-Ni(4)-O(19)	96,3(2)
Ni(4)-O(16#)-C(50#)	85,5(5)	O(6)-Ni(2)-O(9)	98,3(2)	O(17)-Ni(4)-O(19)	90,7(3)
Ni(4)-O(17)-C(57)	126,7(5)	O(8)-Ni(2)-O(9)	84,2(2)	O(1)-C(1)-O(2)	126,6(7)
Ni(4)-O(19)-C(64)	129,7(5)	O(16)-Ni(3)-O(16#)	180,0(2)	O(3)-C(8)-O(4)	125,5(7)
O(2)-Ni(1)-O(2*)	180,0(2)	O(16)-Ni(3)-O(18)	88,5(2)	O(5)-C(15)-O(6)	118,8(6)
O(2)-Ni(1)-O(3)	86,3(2)	O(16)-Ni(3)-O(18#)	91,5(2)	O(7)-C(22)-O(8)	123,6(8)
O(2)-Ni(1)-O(3*)	93,7(2)	O(16)-Ni(3)-O(20)	86,4(2)	O(9)-C(29)-O(10)	124,9(8)
O(2)-Ni(1)-O(5)	85,4(2)	O(16)-Ni(3)-O(20#)	93,6(2)	O(11)-C(36)-O(12)	122,9(8)
O(2)-Ni(1)-O(5*)	94,6(2)	O(16#)-Ni(3)-O(18)	91,5(2)	O(13)-C(43)-O(14)	120,8(7)
O(2*)-Ni(1)-O(3)	93,7(2)	O(16#)-Ni(3)-O(18#)	88,5(2)	O(15)-C(50)-O(16)	120,1(7)
O(2*)-Ni(1)-O(3*)	86,3(2)	O(16#)-Ni(3)-O(20)	93,6(2)	O(17)-C(57)-O(18)	127,2(8)
O(2*)-Ni(1)-O(5)	94,6(2)	O(16#)-Ni(3)-O(20#)	86,4(2)	O(19)-C(64)-O(20)	126,9(7)
O(2*)-Ni(1)-O(5*)	85,4(2)	O(18)-Ni(3)-O(18#)	180,0(3)		

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* = 1-x, 1-y, 1-z; # = -x, -y, 2-z.

## 10.9 Tb(OBz)<sub>3</sub>

**Tabelle 10.9.1:** Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ( $\text{\AA}^2 \cdot 10^{-3}$ ) von Tb(OBz)<sub>3</sub>.

Atom	Lage	x/a	y/b	z/c	U <sub>(eq)</sub>
Tb(1)	4e	0,53355(4)	0,06841(2)	0,26695(2)	0,0371(1)
Tb(2)	4e	0,64035(4)	0,22756(2)	0,32444(2)	0,0378(1)
Tb(3)	4e	0,83668(4)	0,38533(2)	0,28582(2)	0,0415(1)
O(1)	4e	0,4457(5)	0,1209(3)	0,1813(3)	0,055(2)
O(2)	4e	0,5672(5)	0,1740(2)	0,2390(3)	0,046(2)
O(3)	4e	0,3998(5)	0,1124(3)	0,3201(3)	0,056(2)
O(4)	4e	0,4661(5)	0,1987(2)	0,3563(3)	0,057(2)
O(5)	4e	0,6738(4)	0,1161(2)	0,3316(2)	0,044(2)
O(6)	4e	0,7421(5)	0,1736(2)	0,4049(3)	0,058(2)
O(7)	4e	0,7998(5)	0,2186(2)	0,2755(3)	0,061(2)
O(8)	4e	0,8976(6)	0,2986(2)	0,2527(3)	0,071(2)
O(9)	4e	0,5411(6)	0,3012(2)	0,2743(3)	0,057(2)
O(10)	4e	0,6506(5)	0,3776(3)	0,2508(3)	0,071(2)
O(11)	4e	0,6380(5)	0,2912(2)	0,4089(3)	0,056(2)
O(12)	4e	0,7816(5)	0,3191(2)	0,3576(3)	0,056(2)
O(13)	4e	1,0224(5)	0,4104(3)	0,3175(3)	0,069(2)
O(14)	4e	1,0755(5)	0,4972(2)	0,2831(3)	0,054(2)
O(15)	4e	0,8723(5)	0,4239(3)	0,2002(3)	0,058(2)
O(16)	4e	0,9583(5)	0,4991(2)	0,1587(3)	0,049(2)
O(17)	4e	0,7759(6)	0,4643(2)	0,3371(3)	0,063(2)
O(18)	4e	0,8184(5)	0,5433(2)	0,2863(3)	0,053(2)
C(1)	4e	0,5023(7)	0,1678(4)	0,1902(4)	0,044(2)
C(2)	4e	0,4985(8)	0,2158(4)	0,1455(4)	0,051(2)
C(3)	4e	0,4057(9)	0,2200(4)	0,1023(4)	0,066(3)
C(4)	4e	0,398(1)	0,2662(5)	0,0613(5)	0,088(4)
C(5)	4e	0,491(2)	0,3056(5)	0,0623(6)	0,092(4)
C(6)	4e	0,588(1)	0,3017(4)	0,1028(5)	0,077(3)
C(7)	4e	0,5914(8)	0,2567(4)	0,1470(4)	0,059(3)
C(8)	4e	0,3855(8)	0,1602(4)	0,3490(4)	0,047(2)
C(9)	4e	0,2740(7)	0,1708(4)	0,3736(4)	0,049(2)
C(10)	4e	0,1879(9)	0,1301(4)	0,3711(5)	0,087(4)
C(11)	4e	0,080(1)	0,1432(6)	0,3896(6)	0,108(5)
C(12)	4e	0,055(1)	0,1940(7)	0,4140(5)	0,094(4)
C(13)	4e	0,142(2)	0,2325(6)	0,4208(7)	0,152(7)
C(14)	4e	0,252(1)	0,2225(5)	0,4010(6)	0,121(5)
C(15)	4e	0,7307(7)	0,1234(4)	0,3826(4)	0,043(2)
C(16)	4e	0,7809(7)	0,0703(4)	0,4147(4)	0,050(2)
C(17)	4e	0,8120(7)	0,0200(3)	0,3832(4)	0,056(3)
C(18)	4e	0,8531(9)	-0,0295(4)	0,4145(6)	0,079(3)
C(19)	4e	0,861(1)	-0,0304(6)	0,4734(7)	0,104(5)
C(20)	4e	0,833(1)	0,0175(6)	0,5055(5)	0,091(4)
C(21)	4e	0,7923(8)	0,0687(5)	0,4743(5)	0,068(3)
C(22)	4e	0,8886(8)	0,2436(4)	0,2576(4)	0,053(2)
C(23)	4e	0,9866(8)	0,2070(4)	0,2395(4)	0,052(2)
C(24)	4e	0,976(1)	0,1460(4)	0,2375(5)	0,071(3)
C(25)	4e	1,068(1)	0,1111(5)	0,2213(6)	0,116(5)
C(26)	4e	1,169(1)	0,1378(6)	0,2064(7)	0,117(5)

---

Atom	Lage	x/a	y/b	z/c	U <sub>(eq)</sub>
C(27)	4e	1,179(1)	0,1974(6)	0,2099(7)	0,131(6)
C(28)	4e	1,0903(9)	0,2316(5)	0,2252(6)	0,101(4)
C(29)	4e	0,5508(8)	0,3513(4)	0,2500(4)	0,048(2)
C(30)	4e	0,4485(7)	0,3810(4)	0,2200(4)	0,043(2)
C(31)	4e	0,3452(9)	0,3518(5)	0,2071(5)	0,084(4)
C(32)	4e	0,2508(9)	0,3803(7)	0,1768(6)	0,101(4)
C(33)	4e	0,257(1)	0,4380(7)	0,1641(5)	0,092(4)
C(34)	4e	0,358(2)	0,4676(5)	0,1772(6)	0,111(5)
C(35)	4e	0,456(1)	0,4399(4)	0,2065(5)	0,075(3)
C(36)	4e	0,7281(8)	0,3205(4)	0,4053(4)	0,046(2)
C(37)	4e	0,7763(9)	0,3603(4)	0,4547(4)	0,052(2)
C(38)	4e	0,706(1)	0,3746(4)	0,4977(4)	0,075(3)
C(39)	4e	0,747(2)	0,4118(6)	0,5435(6)	0,107(5)
C(40)	4e	0,861(2)	0,4296(7)	0,5477(7)	0,121(6)
C(41)	4e	0,930(2)	0,4170(6)	0,5046(7)	0,118(5)
C(42)	4e	0,890(1)	0,3797(5)	0,4573(5)	0,082(3)
C(43)	4e	1,0984(7)	0,4486(4)	0,3101(4)	0,046(2)
C(44)	4e	1,2227(7)	0,4380(4)	0,3339(3)	0,040(2)
C(45)	4e	1,2614(8)	0,3814(4)	0,3514(4)	0,062(3)
C(46)	4e	1,3749(9)	0,3734(5)	0,3722(5)	0,072(3)
C(47)	4e	1,4526(9)	0,4174(6)	0,3767(4)	0,070(3)
C(48)	4e	1,4189(9)	0,4739(6)	0,3615(5)	0,087(4)
C(49)	4e	1,3013(8)	0,4827(4)	0,3393(4)	0,065(3)
C(50)	4e	0,9243(7)	0,4464(4)	0,1576(4)	0,043(2)
C(51)	4e	0,9429(7)	0,4084(4)	0,1072(4)	0,045(2)
C(52)	4e	0,9350(9)	0,3477(4)	0,1108(5)	0,073(3)
C(53)	4e	0,958(1)	0,3127(5)	0,0623(5)	0,105(5)
C(54)	4e	0,989(1)	0,3376(6)	0,0126(5)	0,097(4)
C(55)	4e	0,996(1)	0,3966(5)	0,0065(4)	0,083(4)
C(56)	4e	0,9740(8)	0,4325(4)	0,0545(4)	0,068(3)
C(57)	4e	0,7825(8)	0,5191(4)	0,3322(4)	0,046(2)
C(58)	4e	0,7473(7)	0,5575(3)	0,3794(4)	0,045(2)
C(59)	4e	0,7151(9)	0,5322(4)	0,4310(4)	0,071(3)
C(60)	4e	0,681(1)	0,5689(6)	0,4759(5)	0,103(4)
C(61)	4e	0,681(1)	0,6284(5)	0,4692(6)	0,115(5)
C(62)	4e	0,712(1)	0,6538(5)	0,4186(6)	0,113(5)
C(63)	4e	0,7462(8)	0,6185(4)	0,3740(4)	0,069(3)

---



**Tabelle 10.9.2: Anisotrope Auslenkungsparameter ( $\text{\AA}^2 \cdot 10^{-3}$ ) von Tb(OBz)<sub>3</sub>.**

Atom	U <sup>11</sup>	U <sup>22</sup>	U <sup>33</sup>	U <sup>23</sup>	U <sup>13</sup>	U <sup>12</sup>
Tb(1)	0,0392(2)	0,0291(2)	0,0432(3)	-0,0020(2)	0,0052(2)	-0,0022(2)
Tb(2)	0,0356(2)	0,0300(2)	0,0485(3)	-0,0016(2)	0,0069(2)	-0,0020(2)
Tb(3)	0,0397(2)	0,0308(2)	0,0546(3)	-0,0001(2)	0,0080(2)	-0,0019(2)
O(1)	0,061(4)	0,041(3)	0,061(4)	0,004(3)	-0,006(3)	-0,018(3)
O(2)	0,051(4)	0,040(3)	0,045(4)	0,000(3)	0,000(3)	-0,001(3)
O(3)	0,051(4)	0,047(3)	0,071(4)	-0,005(4)	0,019(3)	-0,002(3)
O(4)	0,042(4)	0,054(4)	0,079(5)	-0,011(3)	0,026(3)	-0,011(3)
O(5)	0,044(4)	0,039(3)	0,047(4)	0,006(3)	-0,010(3)	-0,007(3)
O(6)	0,067(4)	0,040(3)	0,061(4)	-0,012(3)	-0,012(3)	0,002(3)
O(7)	0,047(4)	0,047(4)	0,092(5)	-0,013(4)	0,026(4)	-0,004(3)
O(8)	0,084(5)	0,028(3)	0,109(6)	-0,004(4)	0,052(5)	0,008(3)
O(9)	0,066(4)	0,038(3)	0,065(4)	0,004(3)	-0,005(3)	0,009(3)
O(10)	0,042(4)	0,082(5)	0,089(5)	0,000(4)	0,004(4)	-0,003(4)
O(11)	0,062(4)	0,046(4)	0,061(4)	-0,011(3)	0,010(3)	-0,006(3)
O(12)	0,074(5)	0,040(3)	0,054(4)	0,001(3)	0,001(4)	0,005(3)
O(13)	0,046(4)	0,065(4)	0,094(6)	0,021(4)	0,000(4)	-0,008(3)
O(14)	0,055(4)	0,037(3)	0,065(4)	0,012(3)	-0,010(3)	0,008(3)
O(15)	0,061(4)	0,057(4)	0,060(4)	-0,001(3)	0,021(3)	0,012(3)
O(16)	0,057(4)	0,036(3)	0,055(4)	-0,007(3)	0,003(3)	0,002(3)
O(17)	0,091(5)	0,041(4)	0,060(5)	-0,006(3)	0,025(4)	0,006(4)
O(18)	0,056(4)	0,055(3)	0,050(4)	0,002(3)	0,013(3)	0,006(3)
C(1)	0,041(5)	0,043(5)	0,047(6)	-0,006(5)	0,005(5)	0,006(4)
C(2)	0,063(6)	0,045(5)	0,045(6)	0,008(5)	0,006(5)	-0,003(5)
C(3)	0,093(8)	0,063(6)	0,038(6)	0,014(5)	-0,009(6)	0,005(6)
C(4)	0,13(1)	0,080(8)	0,056(8)	0,025(7)	-0,014(7)	0,001(8)
C(5)	0,14(1)	0,067(8)	0,069(9)	0,035(7)	0,007(9)	0,014(9)
C(6)	0,12(1)	0,042(6)	0,070(8)	0,018(6)	0,036(8)	-0,011(6)
C(7)	0,065(7)	0,052(6)	0,062(7)	0,006(5)	0,011(5)	0,007(5)
C(8)	0,049(6)	0,041(5)	0,054(6)	0,002(5)	0,008(5)	0,003(5)
C(9)	0,045(5)	0,041(5)	0,063(6)	-0,007(5)	0,022(5)	-0,003(4)
C(10)	0,070(8)	0,062(7)	0,14(1)	-0,029(7)	0,049(7)	-0,023(6)
C(11)	0,062(8)	0,13(1)	0,14(1)	-0,04(1)	0,040(8)	-0,049(8)
C(12)	0,048(7)	0,16(1)	0,079(9)	-0,011(9)	0,027(7)	0,007(8)
C(13)	0,11(1)	0,10(1)	0,27(2)	-0,07(1)	0,13(2)	-0,004(9)
C(14)	0,080(8)	0,067(7)	0,23(2)	-0,046(9)	0,09(1)	-0,009(7)
C(15)	0,038(5)	0,032(5)	0,059(6)	0,001(5)	0,010(5)	-0,005(4)
C(16)	0,044(5)	0,042(5)	0,062(6)	0,017(5)	-0,003(5)	0,003(5)
C(17)	0,057(6)	0,034(5)	0,076(7)	0,002(5)	0,002(5)	0,011(4)
C(18)	0,066(7)	0,042(6)	0,13(2)	0,005(7)	-0,002(8)	0,001(5)
C(19)	0,11(1)	0,079(9)	0,1(2)	0,04(1)	0,00(1)	0,026(8)
C(20)	0,11(1)	0,11(1)	0,053(8)	0,015(7)	-0,012(7)	0,029(8)
C(21)	0,061(7)	0,065(6)	0,077(8)	0,014(7)	-0,004(6)	0,007(6)
C(22)	0,045(6)	0,054(6)	0,061(7)	-0,007(5)	0,012(5)	0,012(5)
C(23)	0,040(6)	0,047(5)	0,070(7)	-0,009(5)	0,016(5)	-0,003(4)
C(24)	0,077(7)	0,047(5)	0,093(8)	0,004(6)	0,030(6)	0,010(6)
C(25)	0,10(1)	0,050(6)	0,20(2)	-0,041(9)	0,05(1)	0,009(7)
C(26)	0,064(9)	0,09(1)	0,20(2)	-0,06(1)	0,029(9)	0,017(8)
C(27)	0,054(8)	0,10(1)	0,25(2)	-0,06(1)	0,07(1)	-0,009(7)
C(28)	0,071(8)	0,056(6)	0,19(2)	-0,022(8)	0,061(9)	-0,007(6)
C(29)	0,053(6)	0,042(5)	0,048(6)	-0,010(5)	0,008(5)	0,004(5)
C(30)	0,039(5)	0,046(5)	0,043(5)	0,004(5)	-0,007(4)	-0,002(5)
C(31)	0,060(8)	0,073(7)	0,12(1)	0,029(7)	-0,013(7)	-0,006(6)

Atom	U <sup>11</sup>	U <sup>22</sup>	U <sup>33</sup>	U <sup>23</sup>	U <sup>13</sup>	U <sup>12</sup>
C(32)	0,040(7)	0,13(1)	0,13(1)	0,05(1)	-0,016(7)	-0,011(8)
C(33)	0,064(8)	0,13(1)	0,084(9)	0,015(9)	-0,005(7)	0,021(9)
C(34)	0,15(1)	0,057(7)	0,12(1)	0,039(8)	-0,01(1)	0,016(9)
C(35)	0,094(9)	0,046(6)	0,082(8)	0,021(6)	-0,010(7)	0,001(6)
C(36)	0,058(6)	0,043(5)	0,035(6)	0,002(4)	0,000(5)	0,013(5)
C(37)	0,070(7)	0,039(5)	0,044(6)	0,007(4)	-0,010(5)	-0,007(5)
C(38)	0,113(9)	0,061(7)	0,047(7)	-0,010(6)	-0,007(6)	0,019(7)
C(39)	0,17(2)	0,09(1)	0,057(9)	-0,018(7)	0,00(1)	0,02(1)
C(40)	0,20(2)	0,09(1)	0,054(9)	-0,003(9)	-0,05(1)	-0,02(1)
C(41)	0,15(2)	0,09(1)	0,11(1)	0,04(1)	-0,05(1)	-0,050(9)
C(42)	0,088(9)	0,075(7)	0,077(8)	0,022(7)	-0,028(7)	-0,028(7)
C(43)	0,039(5)	0,046(5)	0,053(6)	-0,006(5)	0,001(5)	0,005(4)
C(44)	0,039(5)	0,040(5)	0,041(5)	0,003(4)	-0,003(4)	0,001(4)
C(45)	0,054(6)	0,056(6)	0,074(7)	-0,001(6)	-0,007(5)	0,012(5)
C(46)	0,057(7)	0,069(7)	0,089(9)	0,016(7)	-0,003(6)	0,032(6)
C(47)	0,059(7)	0,100(9)	0,052(7)	-0,002(7)	0,008(6)	0,024(7)
C(48)	0,042(7)	0,11(1)	0,11(1)	0,016(8)	-0,007(7)	-0,014(7)
C(49)	0,053(7)	0,061(6)	0,077(8)	0,015(6)	-0,017(6)	-0,010(5)
C(50)	0,030(5)	0,047(6)	0,051(6)	-0,013(5)	-0,004(4)	0,006(4)
C(51)	0,040(5)	0,049(5)	0,046(6)	-0,011(4)	0,008(4)	-0,013(4)
C(52)	0,100(9)	0,045(6)	0,076(8)	-0,022(6)	0,016(7)	-0,013(6)
C(53)	0,19(2)	0,059(7)	0,078(9)	-0,046(7)	0,04(1)	-0,034(8)
C(54)	0,14(1)	0,096(9)	0,055(8)	-0,040(7)	0,025(8)	-0,024(9)
C(55)	0,14(1)	0,068(8)	0,049(7)	-0,005(6)	0,037(7)	-0,006(7)
C(56)	0,085(7)	0,050(5)	0,068(7)	0,003(6)	0,011(6)	-0,009(6)
C(57)	0,051(6)	0,038(5)	0,049(6)	0,004(5)	0,005(5)	0,005(4)
C(58)	0,051(5)	0,035(5)	0,050(6)	-0,002(4)	0,012(5)	-0,008(4)
C(59)	0,102(9)	0,061(6)	0,052(7)	0,000(5)	0,028(6)	0,005(6)
C(60)	0,17(1)	0,081(8)	0,067(8)	-0,015(7)	0,056(8)	-0,013(9)
C(61)	0,19(1)	0,079(9)	0,09(1)	-0,032(8)	0,07(1)	0,006(9)
C(62)	0,18(1)	0,046(6)	0,13(1)	-0,005(7)	0,09(1)	0,005(8)
C(63)	0,087(7)	0,048(5)	0,077(7)	-0,010(6)	0,038(6)	0,007(6)

Tabelle 10.9.3: Ausgewählte Bindungslängen [pm] von Tb(OBz)<sub>3</sub>.

Tb(1)-Tb(2)	397,88(6)	Tb(2)-O(7)	223,9(5)	O(5)-C(15)	129(1)
Tb(1)-Tb(3#)	459,23(7)	Tb(2)-O(9)	226,3(6)	O(6)-C(15)	124,6(9)
Tb(2)-Tb(3)	434,82(6)	Tb(2)-O(11)	240,4(5)	O(7)-C(22)	126,4(9)
Tb(1)-O(1)	242,1(6)	Tb(2)-O(12)	268,9(6)	O(8)-C(22)	125,3(9)
Tb(1)-O(2)	250,8(5)	Tb(3)-O(8)	223,4(5)	O(9)-C(29)	126,8(9)
Tb(1)-O(3)	226,9(5)	Tb(3)-O(10)	221,2(6)	O(10)-C(29)	129(1)
Tb(1)-O(5)	233,8(5)	Tb(3)-O(12)	234,8(6)	O(11)-C(36)	124(1)
Tb(1)-O(14#)	227,6(5)	Tb(3)-O(13)	225,4(6)	O(12)-C(36)	129,8(9)
Tb(1)-O(16#)	230,2(5)	Tb(3)-O(15)	221,1(6)	O(13)-C(43)	124,8(9)
Tb(1)-O(18#)	225,0(6)	Tb(3)-O(17)	227,7(5)	O(14)-C(43)	127,4(9)
Tb(2)-O(2)	237,7(6)	O(1)-C(1)	124,8(9)	O(15)-C(50)	129,1(9)
Tb(2)-O(4)	228,3(5)	O(2)-C(1)	129(1)	O(16)-C(50)	125,1(9)
Tb(2)-O(5)	255,0(5)	O(3)-C(8)	128,5(9)	O(17)-C(57)	124,7(9)
Tb(2)-O(6)	241,0(6)	O(4)-C(8)	126,7(9)	O(18)-C(57)	128,2(9)

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* = 1,5-x, 0,5+y, 0,5-z; # = 1,5-x, -0,5+y, 0,5-z.

**Tabelle 10.9.4: Ausgewählte Winkel [grad] von Tb(OBz)<sub>3</sub>.**

Tb(1)-Tb(2)-Tb(3)	145,33(2)	O(2)-Tb(1)-O(5)	67,0(2)	O(6)-Tb(2)-O(11)	74,6(2)
Tb(2)-Tb(1)-Tb(3#)	143,63(1)	O(2)-Tb(1)-O(14#)	129,4(2)	O(6)-Tb(2)-O(12)	86,5(2)
Tb(2)-Tb(3)-Tb(1*)	167,77(1)	O(2)-Tb(1)-O(16#)	146,8(2)	O(7)-Tb(2)-O(9)	102,1(2)
Tb(1)-O(2)-Tb(2)	109,0(2)	O(2)-Tb(1)-O(18#)	87,7(2)	O(7)-Tb(2)-O(11)	121,6(2)
Tb(1)-O(5)-Tb(2)	108,9(2)	O(3)-Tb(1)-O(5)	85,4(2)	O(7)-Tb(2)-O(12)	73,2(2)
Tb(2)-O(12)-Tb(3)	119,2(2)	O(3)-Tb(1)-O(14#)	102,1(2)	O(9)-Tb(2)-O(11)	85,5(2)
Tb(1)-O(1)-C(1)	96,6(5)	O(3)-Tb(1)-O(16#)	83,5(2)	O(9)-Tb(2)-O(12)	80,7(2)
Tb(1)-O(2)-C(1)	91,5(5)	O(3)-Tb(1)-O(18#)	168,4(2)	O(11)-Tb(2)-O(12)	50,8(2)
Tb(1)-O(3)-C(8)	140,1(5)	O(5)-Tb(1)-O(14#)	162,4(2)	O(8)-Tb(3)-O(10)	97,4(3)
Tb(1)-O(5)-C(15)	152,5(5)	O(5)-Tb(1)-O(16#)	82,6(2)	O(8)-Tb(3)-O(12)	77,9(2)
Tb(1)-O(14#)-C(43)	158,3(6)	O(5)-Tb(1)-O(18#)	87,0(2)	O(8)-Tb(3)-O(13)	90,7(2)
Tb(1)-O(16#)-C(50)	130,7(6)	O(14#)-Tb(1)-O(16#)	82,6(2)	O(8)-Tb(3)-O(15)	87,6(2)
Tb(1)-O(18#)-C(57)	149,8(6)	O(14#)-Tb(1)-O(18#)	87,6(2)	O(8)-Tb(3)-O(17)	168,6(2)
Tb(2)-O(2)-C(1)	153,4(5)	O(16#)-Tb(1)-O(18#)	104,2(2)	O(10)-Tb(3)-O(12)	83,6(2)
Tb(2)-O(4)-C(8)	143,4(5)	O(2)-Tb(2)-O(4)	82,2(2)	O(10)-Tb(3)-O(13)	169,8(2)
Tb(2)-O(5)-C(15)	89,5(5)	O(2)-Tb(2)-O(5)	65,8(2)	O(10)-Tb(3)-O(15)	87,9(2)
Tb(2)-O(6)-C(15)	97,1(5)	O(2)-Tb(2)-O(6)	118,3(2)	O(10)-Tb(3)-O(17)	85,2(2)
Tb(2)-O(7)-C(22)	147,2(5)	O(2)-Tb(2)-O(7)	77,7(2)	O(12)-Tb(3)-O(13)	104,2(2)
Tb(2)-O(9)-C(29)	144,6(6)	O(2)-Tb(2)-O(9)	80,7(2)	O(12)-Tb(3)-O(15)	162,0(2)
Tb(2)-O(11)-C(23)	101,3(5)	O(2)-Tb(2)-O(11)	158,5(2)	O(12)-Tb(3)-O(17)	91,5(2)
Tb(2)-O(12)-C(36)	86,3(5)	O(2)-Tb(2)-O(12)	141,0(2)	O(13)-Tb(3)-O(15)	86,4(2)
Tb(3)-O(8)-C(22)	144,0(6)	O(4)-Tb(2)-O(5)	80,2(2)	O(13)-Tb(3)-O(17)	87,9(2)
Tb(3)-O(10)-C(29)	150,1(6)	O(4)-Tb(2)-O(6)	89,4(2)	O(15)-Tb(3)-O(17)	103,6(2)
Tb(3)-O(12)-C(36)	138,3(5)	O(4)-Tb(2)-O(7)	155,9(2)	O(1)-C(1)-O(2)	118,8(8)
Tb(3)-O(13)-C(43)	141,3(6)	O(4)-Tb(2)-O(9)	87,5(2)	O(3)-C(8)-O(4)	121,1(8)
Tb(3)-O(15)-C(50)	163,0(6)	O(4)-Tb(2)-O(11)	80,8(2)	O(5)-C(15)-O(6)	120,7(8)
Tb(3)-O(17)-C(57)	135,0(6)	O(4)-Tb(2)-O(12)	130,6(2)	O(7)-C(22)-O(8)	123,1(8)
O(1)-Tb(1)-O(2)	52,5(2)	O(5)-Tb(2)-O(6)	52,6(2)	O(9)-C(29)-O(10)	121,2(9)
O(1)-Tb(1)-O(3)	88,0(2)	O(5)-Tb(2)-O(7)	79,5(2)	O(11)-C(36)-O(12)	120,3(9)
O(1)-Tb(1)-O(5)	119,5(2)	O(5)-Tb(2)-O(9)	145,5(2)	O(13)-C(43)-O(14)	123,1(8)
O(1)-Tb(1)-O(14#)	77,0(2)	O(5)-Tb(2)-O(11)	123,5(2)	O(15)-C(50)-O(16)	121,6(8)
O(1)-Tb(1)-O(16#)	155,7(2)	O(5)-Tb(2)-O(12)	131,1(2)	O(17)-C(57)-O(18)	121,6(8)
O(1)-Tb(1)-O(18#)	88,0(2)	O(6)-Tb(2)-O(7)	88,6(2)		
O(2)-Tb(1)-O(3)	81,2(2)	O(6)-Tb(2)-O(9)	160,1(2)		

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* = 1,5-x, 0,5+y, 0,5-z; # = 1,5-x, -0,5+y, 0,5-z.

## 10.10 Dy(OBz)<sub>3</sub>

**Tabelle 10.10.1: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ( $\text{\AA}^2 \cdot 10^{-3}$ ) von Dy(OBz)<sub>3</sub>.**

Atom	Lage	x/a	y/b	z/c	U <sub>(eq)</sub>
Dy(1)	4e	0,53422(5)	0,06847(2)	0,26705(3)	0,0422(2)
Dy(2)	4e	0,63957(5)	0,22700(2)	0,32441(3)	0,0437(2)
Dy(3)	4e	0,83562(5)	0,38542(2)	0,28590(3)	0,0476(2)
O(1)	4e	0,4457(8)	0,1215(4)	0,1826(4)	0,060(3)
O(2)	4e	0,5676(8)	0,1729(3)	0,2393(4)	0,046(2)
O(3)	4e	0,4004(7)	0,1111(4)	0,3198(4)	0,051(2)
O(4)	4e	0,4674(7)	0,1988(3)	0,3559(4)	0,060(3)
O(5)	4e	0,6765(7)	0,1160(3)	0,3305(4)	0,050(2)
O(6)	4e	0,7421(8)	0,1735(3)	0,4042(4)	0,061(3)
O(7)	4e	0,8002(8)	0,2195(4)	0,2774(5)	0,071(3)
O(8)	4e	0,8972(8)	0,2986(4)	0,2538(5)	0,080(4)
O(9)	4e	0,5400(8)	0,3006(4)	0,2743(5)	0,066(3)
O(10)	4e	0,6530(8)	0,3775(4)	0,2532(5)	0,074(3)
O(11)	4e	0,6386(9)	0,2906(3)	0,4074(4)	0,064(3)
O(12)	4e	0,7818(9)	0,3196(4)	0,3567(5)	0,067(3)
O(13)	4e	1,0187(8)	0,4099(4)	0,3169(5)	0,077(3)
O(14)	4e	1,0753(8)	0,4974(4)	0,2828(5)	0,068(3)
O(15)	4e	0,8721(8)	0,4230(4)	0,2011(5)	0,063(3)
O(16)	4e	0,9574(7)	0,4989(4)	0,1592(4)	0,056(3)
O(17)	4e	0,7761(8)	0,4643(4)	0,3370(5)	0,073(3)
O(18)	4e	0,8174(8)	0,5445(3)	0,2843(5)	0,058(3)
C(1)	4e	0,501(2)	0,1667(6)	0,1918(8)	0,059(4)
C(2)	4e	0,499(2)	0,2150(6)	0,1459(7)	0,062(4)
C(3)	4e	0,407(1)	0,2187(5)	0,1028(7)	0,073(5)
C(4)	4e	0,404(2)	0,2657(7)	0,0629(8)	0,101(6)
C(5)	4e	0,490(2)	0,3054(7)	0,0641(9)	0,098(6)
C(6)	4e	0,589(2)	0,3011(6)	0,1043(8)	0,076(5)
C(7)	4e	0,590(2)	0,2556(5)	0,1473(6)	0,060(4)
C(8)	4e	0,388(1)	0,1581(6)	0,3510(7)	0,059(4)
C(9)	4e	0,275(1)	0,1704(5)	0,3749(6)	0,050(4)
C(10)	4e	0,189(2)	0,1290(7)	0,3693(8)	0,090(6)
C(11)	4e	0,080(2)	0,1418(9)	0,390(1)	0,111(8)
C(12)	4e	0,056(2)	0,1915(9)	0,4136(9)	0,103(7)
C(13)	4e	0,148(2)	0,2309(9)	0,422(1)	0,16(1)
C(14)	4e	0,255(2)	0,2216(6)	0,402(1)	0,14(1)
C(15)	4e	0,730(1)	0,1238(5)	0,3819(7)	0,048(4)
C(16)	4e	0,782(1)	0,0708(5)	0,4160(7)	0,056(4)
C(17)	4e	0,810(2)	0,0211(5)	0,3832(7)	0,070(5)
C(18)	4e	0,852(2)	-0,0292(7)	0,413(1)	0,092(6)
C(19)	4e	0,862(2)	-0,0292(8)	0,473(1)	0,109(7)
C(20)	4e	0,831(2)	0,0178(9)	0,5052(8)	0,108(7)
C(21)	4e	0,793(1)	0,0693(7)	0,4748(8)	0,078(5)
C(22)	4e	0,890(2)	0,2440(5)	0,2591(6)	0,053(4)
C(23)	4e	0,985(1)	0,2069(5)	0,2407(7)	0,059(4)
C(24)	4e	0,976(1)	0,1458(5)	0,2387(8)	0,078(5)
C(25)	4e	1,068(2)	0,1106(7)	0,2233(8)	0,099(6)
C(26)	4e	1,168(2)	0,1388(7)	0,2066(9)	0,103(7)

---

Atom	Lage	x/a	y/b	z/c	U <sub>(eq)</sub>
C(27)	4e	1,179(2)	0,1975(7)	0,210(1)	0,14(1)
C(28)	4e	1,090(2)	0,2321(7)	0,2259(9)	0,105(7)
C(29)	4e	0,555(2)	0,3514(6)	0,2504(6)	0,054(4)
C(30)	4e	0,4477(9)	0,3800(5)	0,2210(6)	0,041(3)
C(31)	4e	0,348(2)	0,3504(6)	0,2084(7)	0,076(5)
C(32)	4e	0,252(2)	0,3788(9)	0,1769(8)	0,097(6)
C(33)	4e	0,255(2)	0,436(1)	0,162(1)	0,109(7)
C(34)	4e	0,356(2)	0,4658(7)	0,177(1)	0,118(7)
C(35)	4e	0,457(2)	0,4391(6)	0,2058(7)	0,077(5)
C(36)	4e	0,726(2)	0,3202(6)	0,4043(7)	0,059(4)
C(37)	4e	0,777(1)	0,3589(5)	0,4546(7)	0,062(4)
C(38)	4e	0,702(2)	0,3733(6)	0,4961(7)	0,075(5)
C(39)	4e	0,743(2)	0,4093(7)	0,5424(8)	0,102(7)
C(40)	4e	0,862(3)	0,430(1)	0,547(1)	0,15(2)
C(41)	4e	0,933(2)	0,4155(8)	0,504(1)	0,120(9)
C(42)	4e	0,888(2)	0,3805(7)	0,4572(8)	0,083(5)
C(43)	4e	1,098(1)	0,4489(5)	0,3102(6)	0,049(4)
C(44)	4e	1,219(1)	0,4377(5)	0,3340(6)	0,046(3)
C(45)	4e	1,257(1)	0,3815(6)	0,3516(7)	0,080(5)
C(46)	4e	1,373(2)	0,3723(6)	0,3708(8)	0,076(5)
C(47)	4e	1,447(2)	0,4174(8)	0,3761(7)	0,080(5)
C(48)	4e	1,419(2)	0,4734(8)	0,3619(8)	0,090(6)
C(49)	4e	1,302(2)	0,4818(6)	0,3392(7)	0,072(5)
C(50)	4e	0,924(1)	0,4462(6)	0,1592(7)	0,051(4)
C(51)	4e	0,944(1)	0,4089(5)	0,1085(7)	0,050(4)
C(52)	4e	0,935(2)	0,3471(5)	0,1102(7)	0,076(5)
C(53)	4e	0,962(2)	0,3123(7)	0,0624(9)	0,116(8)
C(54)	4e	0,990(2)	0,3396(8)	0,0114(9)	0,117(8)
C(55)	4e	0,997(2)	0,3989(7)	0,0084(8)	0,090(5)
C(56)	4e	0,972(2)	0,4335(7)	0,0572(7)	0,069(4)
C(57)	4e	0,783(2)	0,5193(5)	0,3306(7)	0,051(4)
C(58)	4e	0,744(1)	0,5572(5)	0,3792(6)	0,048(4)
C(59)	4e	0,712(1)	0,5327(6)	0,4294(7)	0,077(5)
C(60)	4e	0,680(2)	0,5684(8)	0,4754(8)	0,117(7)
C(61)	4e	0,679(2)	0,6281(8)	0,468(1)	0,14(1)
C(62)	4e	0,715(2)	0,6541(7)	0,420(1)	0,111(8)
C(63)	4e	0,748(2)	0,6180(5)	0,3741(7)	0,078(5)

---

**Tabelle 10.10.2: Anisotrope Auslenkungsparameter ( $\text{\AA}^2 \cdot 10^{-3}$ ) von Dy(OBz)<sub>3</sub>.**

Atom	U <sup>11</sup>	U <sup>22</sup>	U <sup>33</sup>	U <sup>23</sup>	U <sup>13</sup>	U <sup>12</sup>
Dy(1)	0,0428(4)	0,0343(3)	0,0497(5)	-0,0012(3)	0,0049(3)	-0,0018(3)
Dy(2)	0,0410(4)	0,0353(3)	0,0554(5)	-0,0010(3)	0,0077(3)	-0,0022(3)
Dy(3)	0,0450(4)	0,0362(3)	0,0622(6)	0,0009(3)	0,0077(4)	-0,0017(3)
O(1)	0,067(6)	0,041(5)	0,069(8)	0,014(5)	-0,006(5)	-0,007(5)
O(2)	0,060(6)	0,032(4)	0,046(7)	0,008(4)	-0,003(5)	-0,009(4)
O(3)	0,057(6)	0,050(5)	0,050(7)	0,002(5)	0,018(5)	0,000(5)
O(4)	0,054(6)	0,051(5)	0,077(8)	-0,025(5)	0,017(5)	-0,018(5)
O(5)	0,072(6)	0,039(4)	0,037(6)	0,008(5)	0,000(5)	0,003(4)
O(6)	0,083(7)	0,032(5)	0,065(8)	-0,012(4)	-0,008(6)	0,000(4)
O(7)	0,063(7)	0,052(5)	0,101(9)	-0,002(6)	0,026(6)	-0,011(5)
O(8)	0,094(8)	0,032(5)	0,12(1)	0,011(5)	0,057(7)	0,011(5)
O(9)	0,062(6)	0,063(6)	0,072(8)	-0,003(5)	0,001(5)	0,014(5)
O(10)	0,039(5)	0,087(7)	0,097(9)	0,020(6)	0,001(6)	0,002(5)
O(11)	0,077(7)	0,037(5)	0,077(8)	-0,003(5)	0,003(6)	-0,010(5)
O(12)	0,095(8)	0,055(6)	0,052(8)	-0,004(5)	0,015(7)	0,010(5)
O(13)	0,065(6)	0,068(6)	0,094(9)	0,038(6)	-0,009(6)	-0,019(5)
O(14)	0,061(7)	0,054(5)	0,086(9)	0,015(5)	-0,009(6)	0,019(5)
O(15)	0,058(6)	0,054(5)	0,078(8)	-0,014(5)	0,011(6)	0,002(5)
O(16)	0,058(6)	0,052(5)	0,059(7)	0,011(5)	0,013(5)	-0,002(4)
O(17)	0,093(8)	0,046(5)	0,084(9)	-0,012(5)	0,025(7)	-0,007(5)
O(18)	0,063(6)	0,059(5)	0,052(7)	0,000(5)	0,009(5)	0,008(5)
C(1)	0,045(9)	0,061(9)	0,07(1)	-0,003(9)	0,002(9)	0,015(7)
C(2)	0,07(1)	0,060(9)	0,05(1)	0,011(8)	-0,004(9)	-0,007(8)
C(3)	0,10(1)	0,039(8)	0,08(2)	0,018(8)	-0,02(1)	0,010(8)
C(4)	0,14(2)	0,07(1)	0,09(2)	0,02(1)	-0,02(2)	0,02(1)
C(5)	0,15(2)	0,06(1)	0,09(2)	0,02(1)	0,01(2)	-0,02(1)
C(6)	0,09(1)	0,056(9)	0,09(2)	0,006(9)	0,03(1)	-0,015(9)
C(7)	0,09(1)	0,042(7)	0,05(1)	0,012(7)	0,011(9)	0,018(7)
C(8)	0,051(9)	0,061(9)	0,07(2)	-0,003(8)	0,010(8)	0,012(7)
C(9)	0,044(8)	0,039(7)	0,07(1)	-0,007(6)	0,010(7)	-0,008(6)
C(10)	0,06(1)	0,09(1)	0,12(2)	-0,03(1)	0,03(1)	-0,019(9)
C(11)	0,04(1)	0,12(2)	0,18(2)	-0,03(2)	0,05(2)	-0,03(1)
C(12)	0,05(1)	0,13(2)	0,13(2)	0,02(1)	0,05(1)	0,03(1)
C(13)	0,12(2)	0,11(2)	0,26(3)	-0,06(2)	0,10(2)	-0,01(2)
C(14)	0,11(2)	0,047(9)	0,29(3)	-0,04(2)	0,13(2)	-0,020(9)
C(15)	0,048(8)	0,051(8)	0,05(1)	-0,012(7)	0,013(8)	-0,022(6)
C(16)	0,045(8)	0,037(7)	0,08(1)	0,021(8)	-0,014(8)	0,003(6)
C(17)	0,08(1)	0,036(7)	0,09(2)	0,011(8)	-0,018(9)	0,021(7)
C(18)	0,08(2)	0,07(1)	0,12(2)	-0,02(2)	-0,02(2)	0,015(9)
C(19)	0,08(2)	0,09(2)	0,15(2)	0,01(2)	-0,02(2)	0,02(1)
C(20)	0,14(2)	0,13(2)	0,05(2)	0,03(1)	-0,01(1)	0,03(2)
C(21)	0,07(1)	0,09(1)	0,07(2)	0,02(1)	-0,01(1)	0,015(9)
C(22)	0,051(9)	0,039(8)	0,07(1)	-0,001(7)	0,011(8)	0,019(6)
C(23)	0,055(9)	0,033(6)	0,10(2)	-0,001(7)	0,035(9)	-0,004(6)
C(24)	0,07(1)	0,054(8)	0,12(2)	-0,006(9)	0,02(1)	0,000(8)
C(25)	0,10(2)	0,045(8)	0,15(2)	-0,03(1)	0,01(2)	0,02(1)
C(26)	0,05(1)	0,08(1)	0,18(2)	-0,05(1)	0,01(2)	0,006(9)
C(27)	0,08(2)	0,09(1)	0,26(3)	-0,09(2)	0,08(2)	-0,03(1)
C(28)	0,09(2)	0,07(1)	0,16(2)	-0,04(2)	0,07(2)	-0,026(10)
C(29)	0,06(1)	0,044(8)	0,06(1)	0,014(7)	0,015(8)	0,021(7)
C(30)	0,026(7)	0,046(7)	0,05(1)	0,015(7)	-0,010(6)	-0,011(6)
C(31)	0,07(1)	0,059(9)	0,10(2)	0,021(9)	-0,03(1)	0,000(8)

Atom	U <sup>11</sup>	U <sup>22</sup>	U <sup>33</sup>	U <sup>23</sup>	U <sup>13</sup>	U <sup>12</sup>
C(32)	0,06(1)	0,12(2)	0,11(2)	0,01(2)	-0,02(1)	-0,01(1)
C(33)	0,08(2)	0,12(2)	0,12(2)	0,01(2)	0,00(2)	0,03(2)
C(34)	0,18(2)	0,06(1)	0,12(2)	0,01(1)	0,00(2)	0,06(2)
C(35)	0,08(1)	0,051(9)	0,10(2)	0,023(9)	0,00(1)	-0,004(8)
C(36)	0,09(1)	0,049(8)	0,04(1)	0,005(8)	-0,01(1)	0,018(8)
C(37)	0,09(2)	0,048(8)	0,05(1)	0,011(7)	0,00(1)	0,010(8)
C(38)	0,12(2)	0,06(1)	0,04(1)	0,002(8)	0,00(1)	0,016(9)
C(39)	0,20(2)	0,07(1)	0,04(2)	-0,001(9)	0,01(2)	0,04(2)
C(40)	0,30(4)	0,09(2)	0,05(2)	0,00(2)	-0,05(2)	-0,05(2)
C(41)	0,15(2)	0,10(2)	0,09(2)	0,03(2)	-0,06(2)	-0,06(1)
C(42)	0,08(1)	0,10(1)	0,07(2)	0,03(1)	-0,02(1)	-0,04(1)
C(43)	0,051(9)	0,045(8)	0,05(1)	-0,015(7)	-0,005(8)	0,003(6)
C(44)	0,055(8)	0,036(6)	0,043(9)	0,010(6)	-0,009(7)	0,000(6)
C(45)	0,06(1)	0,052(8)	0,12(2)	0,022(9)	-0,02(1)	0,019(8)
C(46)	0,08(2)	0,054(9)	0,10(2)	0,019(9)	0,00(1)	0,020(8)
C(47)	0,07(1)	0,11(2)	0,07(2)	-0,02(1)	0,01(1)	0,02(1)
C(48)	0,05(1)	0,10(2)	0,12(2)	0,015(11)	-0,02(1)	-0,020(9)
C(49)	0,053(9)	0,051(8)	0,11(2)	0,015(8)	-0,018(9)	-0,018(7)
C(50)	0,036(8)	0,048(8)	0,07(1)	0,006(7)	0,017(8)	0,016(6)
C(51)	0,044(8)	0,050(8)	0,05(1)	-0,011(7)	-0,002(8)	-0,001(6)
C(52)	0,12(2)	0,041(8)	0,07(2)	-0,008(8)	0,03(1)	-0,012(8)
C(53)	0,20(2)	0,05(1)	0,10(2)	-0,04(1)	0,06(2)	-0,01(1)
C(54)	0,20(2)	0,10(2)	0,06(2)	-0,04(1)	0,03(2)	-0,04(2)
C(55)	0,11(2)	0,09(2)	0,07(2)	0,00(1)	0,01(1)	-0,02(1)
C(56)	0,09(1)	0,061(9)	0,06(1)	-0,002(9)	0,01(1)	-0,011(9)
C(57)	0,07(1)	0,036(7)	0,05(1)	-0,009(7)	0,002(8)	0,018(6)
C(58)	0,048(8)	0,041(8)	0,06(1)	-0,001(7)	0,016(7)	-0,001(6)
C(59)	0,10(2)	0,058(9)	0,08(2)	0,014(9)	0,04(1)	0,009(8)
C(60)	0,21(2)	0,09(2)	0,07(2)	-0,01(1)	0,08(2)	-0,01(2)
C(61)	0,22(2)	0,07(1)	0,16(2)	-0,02(1)	0,13(2)	0,00(2)
C(62)	0,15(2)	0,06(1)	0,13(2)	-0,03(1)	0,08(2)	-0,02(1)
C(63)	0,11(1)	0,030(7)	0,10(2)	-0,005(8)	0,03(1)	0,003(8)

Tabelle 10.10.3: Ausgewählte Bindungslängen [pm] von Dy(OBz)<sub>3</sub>.

Dy(1)-Dy(2)	396,06(9)	Dy(2)-O(7)	221,6(9)	O(5)-C(15)	129(2)
Dy(1)-Dy(3#)	459,05(8)	Dy(2)-O(9)	226,5(9)	O(6)-C(15)	123(2)
Dy(2)-Dy(3)	435,23(8)	Dy(2)-O(11)	238,0(9)	O(7)-C(22)	127(2)
Dy(1)-O(1)	241,4(9)	Dy(2)-O(12)	270,9(9)	O(8)-C(22)	124(1)
Dy(1)-O(2)	248,0(7)	Dy(3)-O(8)	222,8(8)	O(9)-C(29)	129(2)
Dy(1)-O(3)	224,7(8)	Dy(3)-O(10)	216,1(9)	O(10)-C(29)	127(2)
Dy(1)-O(5)	233,9(9)	Dy(3)-O(12)	232(1)	O(11)-C(36)	121(2)
Dy(1)-O(14#)	227,7(8)	Dy(3)-O(13)	221,9(9)	O(12)-C(36)	131(2)
Dy(1)-O(16#)	229,9(9)	Dy(3)-O(15)	219(1)	O(13)-C(43)	128(1)
Dy(1)-O(18#)	222(1)	Dy(3)-O(17)	226,7(9)	O(14)-C(43)	128(2)
Dy(2)-O(2)	237,9(9)	O(1)-C(1)	121(2)	O(15)-C(50)	128(2)
Dy(2)-O(4)	224,9(8)	O(2)-C(1)	128(2)	O(16)-C(50)	125(1)
Dy(2)-O(5)	254,3(7)	O(3)-C(8)	129(2)	O(17)-C(57)	125(2)
Dy(2)-O(6)	240,2(9)	O(4)-C(8)	129(2)	O(18)-C(57)	130(2)

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* = 1,5-x, 0,5+y, 0,5-z; # = 1,5-x, -0,5+y, 0,5-z.

Tabelle 10.10.4: Ausgewählte Winkel [grd] von Dy(OBz)<sub>3</sub>.

Dy(1)-Dy(2)-Dy(3)	145,32(2)	O(2)-Dy(1)-O(5)	66,9(3)	O(6)-Dy(2)-O(11)	74,7(3)
Dy(2)-Dy(1)-Dy(3#)	143,52(2)	O(2)-Dy(1)-O(14#)	129,2(3)	O(6)-Dy(2)-O(12)	86,6(3)
Dy(2)-Dy(3)-Dy(1*)	167,93(2)	O(2)-Dy(1)-O(16#)	147,1(3)	O(7)-Dy(2)-O(9)	102,3(3)
Dy(1)-O(2)-Dy(2)	109,2(3)	O(2)-Dy(1)-O(18#)	87,3(3)	O(7)-Dy(2)-O(11)	119,7(3)
Dy(1)-O(5)-Dy(2)	108,4(3)	O(3)-Dy(1)-O(5)	86,6(3)	O(7)-Dy(2)-O(12)	71,8(3)
Dy(2)-O(12)-Dy(3)	119,6(4)	O(3)-Dy(1)-O(14#)	101,5(3)	O(9)-Dy(2)-O(11)	85,5(3)
Dy(1)-O(1)-C(1)	95,9(9)	O(3)-Dy(1)-O(16#)	83,4(3)	O(9)-Dy(2)-O(12)	80,5(3)
Dy(1)-O(2)-C(1)	91,1(8)	O(3)-Dy(1)-O(18#)	168,4(3)	O(11)-Dy(2)-O(12)	50,4(3)
Dy(1)-O(3)-C(8)	139,3(8)	O(5)-Dy(1)-O(14#)	162,5(3)	O(8)-Dy(3)-O(10)	97,9(4)
Dy(1)-O(5)-C(15)	151,2(8)	O(5)-Dy(1)-O(16#)	83,0(3)	O(8)-Dy(3)-O(12)	77,2(3)
Dy(1)-O(14#)-C(43)	158,0(9)	O(5)-Dy(1)-O(18#)	85,2(3)	O(8)-Dy(3)-O(13)	90,4(4)
Dy(1)-O(16#)-C(50)	129,9(9)	O(14#)-Dy(1)-O(16#)	82,5(3)	O(8)-Dy(3)-O(15)	87,6(3)
Dy(1)-O(18#)-C(57)	147,8(9)	O(14#)-Dy(1)-O(18#)	88,6(3)	O(8)-Dy(3)-O(17)	168,1(4)
Dy(2)-O(2)-C(1)	152,7(8)	O(16#)-Dy(1)-O(18#)	103,8(3)	O(10)-Dy(3)-O(12)	83,1(4)
Dy(2)-O(4)-C(8)	143,4(8)	O(2)-Dy(2)-O(4)	82,4(3)	O(10)-Dy(3)-O(13)	170,3(3)
Dy(2)-O(5)-C(15)	88,8(7)	O(2)-Dy(2)-O(5)	65,3(3)	O(10)-Dy(3)-O(15)	88,9(4)
Dy(2)-O(6)-C(15)	96,7(9)	O(2)-Dy(2)-O(6)	118,1(2)	O(10)-Dy(3)-O(17)	85,3(4)
Dy(2)-O(7)-C(22)	149,1(8)	O(2)-Dy(2)-O(7)	78,8(3)	O(12)-Dy(3)-O(13)	103,8(3)
Dy(2)-O(9)-C(29)	142,0(9)	O(2)-Dy(2)-O(9)	80,9(3)	O(12)-Dy(3)-O(15)	161,6(3)
Dy(2)-O(11)-C(23)	103(1)	O(2)-Dy(2)-O(11)	159,2(3)	O(12)-Dy(3)-O(17)	91,9(3)
Dy(2)-O(12)-C(36)	84,9(9)	O(2)-Dy(2)-O(12)	140,7(3)	O(13)-Dy(3)-O(15)	86,3(3)
Dy(3)-O(8)-C(22)	144,8(9)	O(4)-Dy(2)-O(5)	81,4(3)	O(13)-Dy(3)-O(17)	87,6(4)
Dy(3)-O(10)-C(29)	151,9(9)	O(4)-Dy(2)-O(6)	89,8(3)	O(15)-Dy(3)-O(17)	104,0(3)
Dy(3)-O(12)-C(36)	138,8(8)	O(4)-Dy(2)-O(7)	157,2(3)	O(1)-C(1)-O(2)	120(2)
Dy(3)-O(13)-C(43)	142,1(9)	O(4)-Dy(2)-O(9)	87,4(3)	O(3)-C(8)-O(4)	122(1)
Dy(3)-O(15)-C(50)	163,2(9)	O(4)-Dy(2)-O(11)	81,3(3)	O(5)-C(15)-O(6)	121(1)
Dy(3)-O(17)-C(57)	133,9(9)	O(4)-Dy(2)-O(12)	130,7(3)	O(7)-C(22)-O(8)	121(1)
O(1)-Dy(1)-O(2)	52,2(3)	O(5)-Dy(2)-O(6)	52,8(3)	O(9)-C(29)-O(10)	123(1)
O(1)-Dy(1)-O(3)	87,7(3)	O(5)-Dy(2)-O(7)	79,1(3)	O(11)-C(36)-O(12)	121(2)
O(1)-Dy(1)-O(5)	119,1(3)	O(5)-Dy(2)-O(9)	145,5(3)	O(13)-C(43)-O(14)	122(2)
O(1)-Dy(1)-O(14#)	77,2(3)	O(5)-Dy(2)-O(11)	124,3(3)	O(15)-C(50)-O(16)	123(2)
O(1)-Dy(1)-O(16#)	155,7(3)	O(5)-Dy(2)-O(12)	130,7(3)	O(17)-C(57)-O(18)	124(1)
O(1)-Dy(1)-O(18#)	89,1(3)	O(6)-Dy(2)-O(7)	87,7(3)		
O(2)-Dy(1)-O(3)	81,9(3)	O(6)-Dy(2)-O(9)	160,2(3)		

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* = 1,5-x, 0,5+y, 0,5-z; # = 1,5-x, -0,5+y, 0,5-z.



## 10.11 Dy<sub>x</sub>Co<sub>1-x</sub>(OBz)<sub>3</sub>

**Tabelle 10.11.1: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ( $\text{\AA}^2 \cdot 10^{-3}$ ) von Co(OBz)<sub>3</sub>.**

Atom	Lage	x/a	y/b	z/c	U <sub>(eq)</sub>
Co(1)	4e	0,53119(5)	0,06730(3)	0,26800(3)	0,0203(3)
Co(2)	4e	0,64034(5)	0,22527(3)	0,32662(3)	0,0223(3)
Co(3)	4e	0,83597(5)	0,38352(3)	0,28697(3)	0,0233(3)
O(1)	4e	0,4413(9)	0,1203(5)	0,1809(4)	0,110(3)
O(2)	4e	0,5662(9)	0,1714(5)	0,2398(5)	0,113(3)
O(3)	4e	0,393(1)	0,1111(5)	0,3204(5)	0,119(3)
O(4)	4e	0,4669(9)	0,1979(6)	0,3611(5)	0,131(4)
O(5)	4e	0,6700(9)	0,1154(4)	0,3333(5)	0,109(3)
O(6)	4e	0,7462(9)	0,1737(5)	0,4060(5)	0,116(3)
O(7)	4e	0,7990(9)	0,2152(5)	0,2746(5)	0,117(3)
O(8)	4e	0,8931(9)	0,2967(5)	0,2499(5)	0,123(3)
O(9)	4e	0,5409(9)	0,2992(5)	0,2750(5)	0,116(3)
O(10)	4e	0,6428(9)	0,3758(6)	0,2525(6)	0,135(4)
O(11)	4e	0,634(1)	0,2901(5)	0,4114(5)	0,131(4)
O(12)	4e	0,7806(9)	0,3134(5)	0,3587(5)	0,116(3)
O(13)	4e	1,0264(9)	0,4051(7)	0,3185(5)	0,141(4)
O(14)	4e	1,0795(9)	0,4964(5)	0,2849(5)	0,119(3)
O(15)	4e	0,873(1)	0,4246(5)	0,2018(5)	0,128(4)
O(16)	4e	0,954(1)	0,4975(4)	0,1575(4)	0,113(3)
O(17)	4e	0,777(1)	0,4649(4)	0,3365(5)	0,117(3)
O(18)	4e	0,8176(9)	0,5447(5)	0,2856(4)	0,116(3)
C(1)	4e	0,498(1)	0,1649(6)	0,1908(6)	0,092(3)
C(2)	4e	0,496(2)	0,2154(6)	0,1473(7)	0,108(4)
C(3)	4e	0,392(2)	0,2209(7)	0,1019(9)	0,126(5)
C(4)	4e	0,393(2)	0,2671(8)	0,0622(7)	0,122(5)
C(5)	4e	0,485(2)	0,3097(8)	0,0649(9)	0,128(5)
C(6)	4e	0,581(2)	0,3028(7)	0,1054(7)	0,110(4)
C(7)	4e	0,590(2)	0,2554(6)	0,1472(7)	0,111(4)
C(8)	4e	0,386(1)	0,1577(5)	0,3496(7)	0,096(3)
C(9)	4e	0,269(1)	0,1689(7)	0,3771(8)	0,113(4)
C(10)	4e	0,177(2)	0,1313(8)	0,3736(9)	0,140(6)
C(11)	4e	0,077(2)	0,143(1)	0,389(2)	0,23(2)
C(12)	4e	0,054(1)	0,199(2)	0,419(1)	0,19(1)
C(13)	4e	0,157(2)	0,234(2)	0,436(2)	0,29(2)
C(14)	4e	0,270(2)	0,2229(9)	0,414(1)	0,159(8)
C(15)	4e	0,731(1)	0,1196(6)	0,3840(6)	0,092(3)
C(16)	4e	0,783(1)	0,0669(6)	0,4155(7)	0,107(4)
C(17)	4e	0,816(1)	0,0182(6)	0,3848(8)	0,112(4)
C(18)	4e	0,863(2)	-0,0326(7)	0,4128(9)	0,128(5)
C(19)	4e	0,871(3)	-0,030(2)	0,472(1)	0,58(7)
C(20)	4e	0,836(2)	0,0141(9)	0,510(2)	0,30(3)
C(21)	4e	0,792(2)	0,0649(7)	0,4773(6)	0,124(5)
C(22)	4e	0,887(1)	0,2418(7)	0,2583(7)	0,107(4)
C(23)	4e	0,986(1)	0,2039(7)	0,2398(7)	0,103(4)
C(24)	4e	0,972(2)	0,1428(8)	0,2415(9)	0,133(6)
C(25)	4e	1,069(2)	0,104(1)	0,223(1)	0,18(1)
C(26)	4e	1,173(2)	0,1312(9)	0,212(1)	0,141(7)

---

Atom	Lage	x/a	y/b	z/c	U <sub>(eq)</sub>
C(27)	4e	1,182(2)	0,1917(9)	0,217(1)	0,151(8)
C(28)	4e	1,092(2)	0,2299(8)	0,2295(9)	0,134(7)
C(29)	4e	0,551(2)	0,3507(6)	0,2508(6)	0,093(3)
C(30)	4e	0,448(1)	0,3791(5)	0,2189(6)	0,092(3)
C(31)	4e	0,341(2)	0,3518(9)	0,2066(8)	0,127(5)
C(32)	4e	0,248(1)	0,3807(9)	0,1765(8)	0,137(6)
C(33)	4e	0,279(3)	0,4434(9)	0,1659(9)	0,54(6)
C(34)	4e	0,372(2)	0,484(2)	0,181(2)	0,29(3)
C(35)	4e	0,448(2)	0,4384(6)	0,2070(8)	0,121(5)
C(36)	4e	0,730(1)	0,3189(6)	0,4055(6)	0,092(3)
C(37)	4e	0,776(2)	0,3613(7)	0,4566(7)	0,127(6)
C(38)	4e	0,708(3)	0,3735(9)	0,4987(7)	0,18(1)
C(39)	4e	0,749(3)	0,4149(8)	0,5468(8)	0,153(8)
C(40)	4e	0,871(3)	0,4340(8)	0,5481(9)	0,153(8)
C(41)	4e	0,932(2)	0,414(1)	0,501(1)	0,148(7)
C(42)	4e	0,896(2)	0,3792(8)	0,4599(8)	0,140(7)
C(43)	4e	1,103(2)	0,4473(5)	0,3102(6)	0,090(3)
C(44)	4e	1,224(1)	0,4346(5)	0,3345(5)	0,087(3)
C(45)	4e	1,264(1)	0,3795(6)	0,3515(6)	0,104(4)
C(46)	4e	1,373(2)	0,3659(9)	0,3739(9)	0,131(5)
C(47)	4e	1,458(2)	0,423(2)	0,383(1)	0,18(1)
C(48)	4e	1,427(2)	0,4702(8)	0,3629(9)	0,131(6)
C(49)	4e	1,303(2)	0,4784(9)	0,3381(7)	0,135(6)
C(50)	4e	0,922(2)	0,4433(6)	0,1564(7)	0,097(3)
C(51)	4e	0,941(1)	0,4066(7)	0,1063(6)	0,101(4)
C(52)	4e	0,936(2)	0,3443(7)	0,1091(8)	0,117(5)
C(53)	4e	0,973(2)	0,309(1)	0,0634(9)	0,152(7)
C(54)	4e	0,993(2)	0,334(1)	0,0108(8)	0,150(7)
C(55)	4e	0,997(2)	0,3942(8)	0,0072(7)	0,130(6)
C(56)	4e	0,972(2)	0,4304(7)	0,0513(6)	0,113(4)
C(57)	4e	0,785(2)	0,5185(6)	0,3314(6)	0,092(3)
C(58)	4e	0,748(1)	0,5583(7)	0,3815(6)	0,098(4)
C(59)	4e	0,718(2)	0,530(1)	0,4353(8)	0,159(8)
C(60)	4e	0,682(2)	0,5709(8)	0,4789(9)	0,145(7)
C(61)	4e	0,688(2)	0,6330(8)	0,4752(9)	0,134(6)
C(62)	4e	0,714(2)	0,6558(7)	0,4177(9)	0,143(7)
C(63)	4e	0,744(2)	0,6199(7)	0,3759(8)	0,118(5)

---

**Tabelle 10.11.2: Anisotrope Auslenkungsparameter ( $\text{\AA}^2 \cdot 10^{-3}$ ) von  $\text{Co}(\text{OBz})_3$ .**

Atom	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{23}$	$U^{13}$	$U^{12}$
Co(1)	0,0186(3)	0,0191(4)	0,0235(4)	0,0007(2)	0,0038(2)	-0,0010(2)
Co(2)	0,0191(4)	0,0209(4)	0,0273(4)	-0,0004(2)	0,0051(2)	0,0002(2)
Co(3)	0,0213(4)	0,0200(4)	0,0291(4)	0,0024(2)	0,0052(2)	-0,0012(2)
O(1)	0,107(6)	0,119(7)	0,100(6)	0,001(5)	-0,009(5)	-0,019(5)
O(2)	0,116(7)	0,120(7)	0,102(6)	0,015(5)	0,006(5)	-0,005(6)
O(3)	0,128(8)	0,116(7)	0,115(7)	-0,032(6)	0,023(6)	0,000(6)
O(4)	0,103(7)	0,154(9)	0,139(9)	-0,007(8)	0,026(6)	-0,034(7)
O(5)	0,107(6)	0,111(7)	0,108(7)	0,000(5)	0,000(5)	-0,019(5)
O(6)	0,108(7)	0,109(7)	0,130(8)	-0,004(6)	0,000(6)	0,005(5)
O(7)	0,100(6)	0,140(8)	0,117(7)	-0,008(6)	0,039(5)	-0,017(6)
O(8)	0,118(7)	0,106(7)	0,152(9)	-0,018(7)	0,044(7)	-0,021(6)
O(9)	0,128(8)	0,097(6)	0,119(7)	0,014(6)	-0,002(6)	0,008(5)
O(10)	0,089(6)	0,16(1)	0,15(1)	0,005(8)	0,010(6)	-0,032(6)
O(11)	0,135(8)	0,106(7)	0,144(9)	0,010(6)	-0,022(7)	-0,031(6)
O(12)	0,116(7)	0,127(8)	0,107(7)	0,013(6)	0,026(5)	-0,006(6)
O(13)	0,105(7)	0,20(1)	0,117(8)	0,016(8)	0,011(6)	-0,058(8)
O(14)	0,103(6)	0,104(7)	0,149(9)	0,006(6)	-0,001(6)	0,017(5)
O(15)	0,17(1)	0,124(8)	0,094(6)	0,027(6)	0,039(7)	0,019(7)
O(16)	0,151(8)	0,098(6)	0,091(6)	-0,011(5)	0,018(5)	0,021(6)
O(17)	0,153(9)	0,095(6)	0,109(7)	-0,016(5)	0,038(6)	-0,015(6)
O(18)	0,114(7)	0,144(9)	0,096(6)	0,001(6)	0,037(5)	-0,013(6)
C(1)	0,094(8)	0,098(8)	0,080(7)	0,001(6)	-0,004(6)	-0,012(6)
C(2)	0,13(2)	0,095(9)	0,095(9)	-0,014(7)	0,010(8)	0,003(8)
C(3)	0,13(1)	0,11(1)	0,14(1)	0,013(9)	-0,02(1)	0,018(9)
C(4)	0,14(2)	0,13(1)	0,10(1)	0,015(9)	0,006(9)	0,01(1)
C(5)	0,14(2)	0,10(1)	0,14(2)	0,03(1)	0,02(1)	0,00(1)
C(6)	0,13(1)	0,096(9)	0,11(1)	0,024(8)	0,023(9)	-0,005(8)
C(7)	0,12(1)	0,094(9)	0,13(1)	-0,005(8)	0,045(9)	-0,018(8)
C(8)	0,087(7)	0,069(6)	0,13(1)	0,004(7)	0,013(7)	0,000(5)
C(9)	0,083(8)	0,11(1)	0,15(2)	0,021(9)	0,008(8)	-0,003(7)
C(10)	0,11(1)	0,14(2)	0,18(2)	-0,04(1)	0,03(1)	-0,03(1)
C(11)	0,11(2)	0,23(2)	0,36(4)	-0,18(3)	0,12(2)	-0,06(2)
C(12)	0,071(9)	0,31(3)	0,18(2)	0,08(2)	0,03(1)	-0,02(1)
C(13)	0,13(2)	0,49(6)	0,26(3)	-0,21(4)	0,09(2)	-0,05(3)
C(14)	0,14(2)	0,13(2)	0,21(2)	-0,06(1)	0,02(2)	0,02(1)
C(15)	0,098(8)	0,090(8)	0,085(7)	-0,009(6)	-0,007(6)	-0,004(6)
C(16)	0,093(8)	0,11(1)	0,12(1)	-0,007(8)	0,010(7)	0,013(7)
C(17)	0,103(9)	0,095(9)	0,14(2)	-0,004(8)	0,026(9)	-0,021(7)
C(18)	0,11(1)	0,10(1)	0,16(2)	0,04(1)	-0,01(1)	0,012(8)
C(19)	0,7(1)	0,20(3)	0,66(9)	0,20(5)	-0,63(9)	-0,20(5)
C(20)	0,10(2)	0,17(2)	0,62(7)	-0,20(4)	-0,06(2)	0,04(2)
C(21)	0,15(1)	0,12(1)	0,092(9)	0,001(8)	-0,038(9)	0,01(1)
C(22)	0,082(8)	0,099(9)	0,14(1)	0,002(8)	-0,004(7)	-0,014(7)
C(23)	0,097(8)	0,099(9)	0,11(1)	-0,003(7)	0,011(7)	0,001(7)
C(24)	0,14(2)	0,11(1)	0,16(2)	-0,02(1)	0,03(2)	0,02(1)
C(25)	0,21(2)	0,13(2)	0,18(2)	-0,03(1)	-0,05(2)	0,08(2)
C(26)	0,11(2)	0,14(2)	0,18(2)	-0,06(1)	0,05(1)	-0,03(1)
C(27)	0,11(1)	0,12(1)	0,23(2)	-0,05(1)	0,03(2)	-0,02(1)
C(28)	0,090(9)	0,13(2)	0,19(2)	-0,06(2)	0,06(1)	-0,028(8)
C(29)	0,090(8)	0,084(7)	0,107(9)	-0,011(7)	0,019(6)	0,000(6)
C(30)	0,091(7)	0,088(8)	0,096(8)	0,004(6)	0,007(6)	-0,005(6)
C(31)	0,082(8)	0,17(2)	0,13(1)	0,03(1)	0,000(8)	-0,017(9)

Atom	U <sup>11</sup>	U <sup>22</sup>	U <sup>33</sup>	U <sup>23</sup>	U <sup>13</sup>	U <sup>12</sup>
C(32)	0,079(8)	0,19(2)	0,14(2)	0,04(1)	0,004(8)	0,000(9)
C(33)	1,14(13)	0,41(5)	0,12(2)	0,16(3)	0,23(4)	0,62(8)
C(34)	0,15(2)	0,49(7)	0,23(4)	-0,13(4)	-0,04(2)	0,06(3)
C(35)	0,13(2)	0,10(1)	0,12(1)	0,011(8)	-0,03(1)	-0,008(9)
C(36)	0,089(7)	0,100(8)	0,087(7)	0,017(6)	0,015(6)	-0,003(6)
C(37)	0,19(2)	0,10(1)	0,086(9)	0,003(8)	0,02(1)	0,02(1)
C(38)	0,31(3)	0,15(2)	0,070(8)	0,005(9)	0,03(2)	-0,02(2)
C(39)	0,24(2)	0,11(1)	0,11(2)	0,000(9)	-0,04(2)	0,00(1)
C(40)	0,23(3)	0,11(1)	0,11(2)	-0,02(1)	-0,01(2)	-0,04(2)
C(41)	0,16(2)	0,16(2)	0,13(2)	0,02(1)	-0,01(2)	-0,03(2)
C(42)	0,15(2)	0,15(2)	0,11(1)	0,00(1)	-0,03(1)	-0,07(1)
C(43)	0,098(8)	0,073(6)	0,101(8)	0,007(6)	0,018(7)	0,008(6)
C(44)	0,097(8)	0,087(7)	0,080(7)	0,006(5)	0,017(6)	-0,003(6)
C(45)	0,102(9)	0,105(9)	0,108(9)	0,011(7)	0,028(7)	0,035(7)
C(46)	0,10(1)	0,14(1)	0,16(2)	-0,02(2)	0,02(1)	0,00(1)
C(47)	0,13(2)	0,27(3)	0,14(2)	0,07(2)	0,00(1)	0,09(2)
C(48)	0,11(1)	0,13(2)	0,16(2)	0,05(2)	0,02(1)	0,032(9)
C(49)	0,15(2)	0,16(2)	0,09(1)	0,00(1)	-0,022(9)	-0,04(1)
C(50)	0,101(8)	0,073(7)	0,12(1)	-0,001(7)	0,022(7)	-0,007(6)
C(51)	0,090(8)	0,12(1)	0,093(8)	-0,001(8)	0,016(6)	-0,006(7)
C(52)	0,13(2)	0,094(9)	0,13(1)	-0,023(8)	0,032(9)	-0,027(8)
C(53)	0,16(2)	0,17(2)	0,12(2)	-0,01(1)	0,05(2)	0,00(2)
C(54)	0,21(2)	0,15(2)	0,10(1)	-0,04(1)	0,04(2)	-0,04(2)
C(55)	0,17(2)	0,12(2)	0,10(1)	-0,037(9)	0,03(1)	-0,01(1)
C(56)	0,13(2)	0,12(1)	0,084(8)	0,008(7)	0,006(8)	-0,001(9)
C(57)	0,104(8)	0,088(8)	0,084(7)	-0,010(6)	0,009(6)	-0,014(6)
C(58)	0,085(7)	0,12(1)	0,091(8)	0,012(7)	0,008(6)	-0,024(7)
C(59)	0,14(2)	0,23(2)	0,11(1)	-0,06(2)	0,04(1)	-0,02(2)
C(60)	0,18(2)	0,13(2)	0,14(2)	0,01(1)	0,09(2)	-0,00(1)
C(61)	0,15(2)	0,11(2)	0,14(2)	-0,02(1)	0,04(1)	-0,01(1)
C(62)	0,18(2)	0,090(9)	0,17(2)	-0,01(1)	0,09(2)	0,01(1)
C(63)	0,13(1)	0,11(1)	0,12(1)	-0,017(9)	0,035(9)	-0,005(9)

Tabelle 10.11.3: Ausgewählte Bindungslängen [pm] von Co(OBz)<sub>3</sub>.

Co(1)-Co(2)	394,63(9)	Co(2)-O(7)	225,5(9)	O(5)-C(15)	128(2)
Co(1)-Co(3#)	460,9(1)	Co(2)-O(9)	227(1)	O(6)-C(15)	132(2)
Co(2)-Co(3)	433,46(9)	Co(2)-O(11)	241(2)	O(7)-C(22)	125(2)
Co(1)-O(1)	243(1)	Co(2)-O(12)	238(1)	O(8)-C(22)	125(2)
Co(1)-O(2)	246(1)	Co(3)-O(8)	224(1)	O(9)-C(29)	129(2)
Co(1)-O(3)	228(1)	Co(3)-O(10)	227(1)	O(10)-C(29)	118(2)
Co(1)-O(5)	232(1)	Co(3)-O(12)	238(1)	O(11)-C(36)	128(2)
Co(1)-O(14#)	229(1)	Co(3)-O(13)	227(1)	O(12)-C(36)	126(2)
Co(1)-O(16#)	228,8(9)	Co(3)-O(15)	220(1)	O(13)-C(43)	132(2)
Co(1)-O(18#)	225,1(9)	Co(3)-O(17)	227,5(9)	O(14)-C(43)	126(2)
Co(2)-O(2)	238(1)	O(1)-C(1)	120(2)	O(15)-C(50)	128(2)
Co(2)-O(4)	227(1)	O(2)-C(1)	129(2)	O(16)-C(50)	127(2)
Co(2)-O(5)	250(1)	O(3)-C(8)	124(2)	O(17)-C(57)	122(2)
Co(2)-O(6)	236(1)	O(4)-C(8)	130(2)	O(18)-C(57)	127(2)

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* = 1,5-x, 0,5+y, 0,5-z; # = 1,5-x, -0,5+y, 0,5-z.

Tabelle 10.11.4: Ausgewählte Winkel [grad] von Dy(OBz)<sub>3</sub>.

Co(1)-Co(2)-Co(3)	145,21(2)	O(2)-Co(1)-O(5)	66,6(3)	O(6)-Co(2)-O(11)	75,5(4)
Co(2)-Co(1)-Co(3#)	142,70(2)	O(2)-Co(1)-O(14#)	128,4(4)	O(6)-Co(2)-O(12)	84,9(3)
Co(2)-Co(3)-Co(1*)	168,26(2)	O(2)-Co(1)-O(16#)	146,7(3)	O(7)-Co(2)-O(9)	101,2(4)
Co(1)-O(2)-Co(2)	109,0(4)	O(2)-Co(1)-O(18#)	85,7(4)	O(7)-Co(2)-O(11)	123,9(4)
Co(1)-O(5)-Co(2)	110,1(4)	O(3)-Co(1)-O(5)	86,2(4)	O(7)-Co(2)-O(12)	73,7(4)
Co(2)-O(12)-Co(3)	120,8(4)	O(3)-Co(1)-O(14#)	101,3(4)	O(9)-Co(2)-O(11)	84,8(4)
Co(1)-O(1)-C(1)	94,8(8)	O(3)-Co(1)-O(16#)	85,7(4)	O(9)-Co(2)-O(12)	81,1(4)
Co(1)-O(2)-C(1)	90,7(8)	O(3)-Co(1)-O(18#)	167,3(4)	O(11)-Co(2)-O(12)	51,9(3)
Co(1)-O(3)-C(8)	135,9(9)	O(5)-Co(1)-O(14#)	163,7(4)	O(8)-Co(3)-O(10)	96,5(4)
Co(1)-O(5)-C(15)	151,3(9)	O(5)-Co(1)-O(16#)	81,8(3)	O(8)-Co(3)-O(12)	77,3(4)
Co(1)-O(14#)-C(43)	158(1)	O(5)-Co(1)-O(18#)	86,3(4)	O(8)-Co(3)-O(13)	90,0(5)
Co(1)-O(16#)-C(50)	132,4(9)	O(14#)-Co(1)-O(16#)	84,4(4)	O(8)-Co(3)-O(15)	87,5(4)
Co(1)-O(18#)-C(57)	147(1)	O(14#)-Co(1)-O(18#)	88,6(4)	O(8)-Co(3)-O(17)	172,2(4)
Co(2)-O(2)-C(1)	153(1)	O(16#)-Co(1)-O(18#)	103,3(4)	O(10)-Co(3)-O(12)	82,5(4)
Co(2)-O(4)-C(8)	138(1)	O(2)-Co(2)-O(4)	83,8(4)	O(10)-Co(3)-O(13)	171,9(5)
Co(2)-O(5)-C(15)	92,3(8)	O(2)-Co(2)-O(5)	65,2(3)	O(10)-Co(3)-O(15)	89,8(5)
Co(2)-O(6)-C(15)	97,6(8)	O(2)-Co(2)-O(6)	119,0(4)	O(10)-Co(3)-O(17)	84,7(4)
Co(2)-O(7)-C(22)	144(1)	O(2)-Co(2)-O(7)	76,2(4)	O(12)-Co(3)-O(13)	103,7(4)
Co(2)-O(9)-C(29)	144,4(9)	O(2)-Co(2)-O(9)	80,5(4)	O(12)-Co(3)-O(15)	162,0(4)
Co(2)-O(11)-C(23)	98(1)	O(2)-Co(2)-O(11)	157,3(4)	O(12)-Co(3)-O(17)	95,3(4)
Co(2)-O(12)-C(36)	89,1(8)	O(2)-Co(2)-O(12)	140,7(3)	O(13)-Co(3)-O(15)	85,7(4)
Co(3)-O(8)-C(22)	141(1)	O(4)-Co(2)-O(5)	80,1(4)	O(13)-Co(3)-O(17)	89,5(5)
Co(3)-O(10)-C(29)	150(2)	O(4)-Co(2)-O(6)	90,3(4)	O(15)-Co(3)-O(17)	100,2(4)
Co(3)-O(12)-C(36)	132,6(9)	O(4)-Co(2)-O(7)	156,1(4)	O(1)-C(1)-O(2)	121(2)
Co(3)-O(13)-C(43)	138(1)	O(4)-Co(2)-O(9)	88,1(4)	O(3)-C(8)-O(4)	128(2)
Co(3)-O(15)-C(50)	165(1)	O(4)-Co(2)-O(11)	78,6(4)	O(5)-C(15)-O(6)	116(1)
Co(3)-O(17)-C(57)	136,6(9)	O(4)-Co(2)-O(12)	129,9(4)	O(7)-C(22)-O(8)	125(2)
O(1)-Co(1)-O(2)	52,7(3)	O(5)-Co(2)-O(6)	54,0(3)	O(9)-C(29)-O(10)	122(2)
O(1)-Co(1)-O(3)	86,9(4)	O(5)-Co(2)-O(7)	79,7(4)	O(11)-C(36)-O(12)	120(2)
O(1)-Co(1)-O(5)	119,3(3)	O(5)-Co(2)-O(9)	144,6(4)	O(13)-C(43)-O(14)	125(2)
O(1)-Co(1)-O(14#)	75,9(4)	O(5)-Co(2)-O(11)	124,5(4)	O(15)-C(50)-O(16)	116(2)
O(1)-Co(1)-O(16#)	157,1(4)	O(5)-Co(2)-O(12)	131,4(3)	O(17)-C(57)-O(18)	124(2)
O(1)-Co(1)-O(18#)	87,9(4)	O(6)-Co(2)-O(7)	88,1(4)		
O(2)-Co(1)-O(3)	82,0(4)	O(6)-Co(2)-O(9)	160,2(4)		

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* = 1,5-x, 0,5+y, 0,5-z; # = 1,5-x, -0,5+y, 0,5-z.

10.12 Fe(OMQ)<sub>3</sub>Tabelle 10.12.1: Atomkoordinaten und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ( $\text{\AA}^2 \cdot 10^{-3}$ ) von Fe(OMQ)<sub>2</sub>.

Atom	Lage	x/a	y/b	z/c	U <sub>(eq)</sub>
Fe(1)	2i	0,5432(1)	0,3690(1)	0,4682(1)	0,0283(3)
Fe(2)	2i	0,6966(2)	0,6368(1)	0,7386(1)	0,0297(4)
O(1)	2i	0,4726(5)	0,3204(5)	0,2904(5)	0,034(2)
O(2)	2i	0,5971(5)	0,4458(5)	0,6541(5)	0,037(2)
O(3)	2i	0,6330(5)	0,5658(5)	0,5431(5)	0,033(2)
O(4)	2i	0,7330(6)	0,6923(6)	0,9145(5)	0,039(2)
N(1)	2i	0,6664(6)	0,2796(5)	0,3942(5)	0,032(2)
N(2)	2i	0,4687(6)	0,2051(6)	0,4859(6)	0,034(2)
N(3)	2i	0,7841(6)	0,7893(6)	0,7182(5)	0,029(2)
N(4)	2i	0,8948(6)	0,6263(6)	0,8097(5)	0,033(2)
C(1)	2i	0,6337(7)	0,2406(6)	0,2710(6)	0,028(2)
C(2)	2i	0,5299(7)	0,2655(7)	0,2186(6)	0,029(2)
C(3)	2i	0,4966(8)	0,2300(8)	0,0962(7)	0,043(2)
C(4)	2i	0,5597(9)	0,1690(9)	0,0270(8)	0,055(3)
C(5)	2i	0,6540(9)	0,1388(9)	0,0739(7)	0,059(3)
C(6)	2i	0,6944(8)	0,1753(8)	0,1982(7)	0,041(2)
C(7)	2i	0,7886(9)	0,1467(9)	0,2563(9)	0,054(3)
C(8)	2i	0,8193(9)	0,1830(9)	0,3763(8)	0,053(3)
C(9)	2i	0,7563(8)	0,2522(8)	0,4457(7)	0,037(2)
C(10)	2i	0,7907(9)	0,2931(9)	0,5803(7)	0,052(3)
C(11)	2i	0,4782(8)	0,2481(8)	0,6075(7)	0,033(2)
C(12)	2i	0,5470(8)	0,3756(9)	0,6936(7)	0,032(2)
C(13)	2i	0,5569(9)	0,4215(9)	0,8142(8)	0,049(3)
C(14)	2i	0,500(1)	0,3442(9)	0,8498(8)	0,058(3)
C(15)	2i	0,4338(9)	0,2240(9)	0,7677(8)	0,050(3)
C(16)	2i	0,4225(8)	0,1723(8)	0,6439(7)	0,036(2)
C(17)	2i	0,3580(9)	0,0485(9)	0,5530(8)	0,048(3)
C(18)	2i	0,3532(8)	0,0075(9)	0,4370(8)	0,048(3)
C(19)	2i	0,4119(8)	0,0875(8)	0,4053(7)	0,032(2)
C(20)	2i	0,4107(8)	0,0398(8)	0,2768(7)	0,042(2)
C(21)	2i	0,7839(7)	0,7500(7)	0,6018(7)	0,029(2)
C(22)	2i	0,7061(8)	0,6282(7)	0,5087(7)	0,026(2)
C(23)	2i	0,7066(8)	0,5840(9)	0,3935(8)	0,039(2)
C(24)	2i	0,7808(8)	0,6554(8)	0,3646(8)	0,038(2)
C(25)	2i	0,8517(8)	0,7706(8)	0,4492(8)	0,041(2)
C(26)	2i	0,8565(7)	0,8224(8)	0,5720(7)	0,035(2)
C(27)	2i	0,9241(8)	0,9460(9)	0,6679(9)	0,048(3)
C(28)	2i	0,9205(8)	0,9862(8)	0,7824(8)	0,044(2)
C(29)	2i	0,8490(8)	0,9032(8)	0,8048(7)	0,032(2)
C(30)	2i	0,8450(9)	0,9473(9)	0,9333(8)	0,055(3)
C(31)	2i	0,9216(8)	0,6566(8)	0,9299(7)	0,034(2)
C(32)	2i	0,8316(8)	0,6871(7)	0,9807(6)	0,033(2)
C(33)	2i	0,8514(8)	0,7106(8)	1,0982(6)	0,042(2)
C(34)	2i	0,9587(9)	0,7076(8)	1,1677(8)	0,049(3)
C(35)	2i	1,0455(8)	0,6812(8)	1,1222(7)	0,047(2)
C(36)	2i	1,0292(8)	0,6553(8)	1,0002(8)	0,044(2)
C(37)	2i	1,1163(9)	0,6285(9)	0,9454(9)	0,051(2)
C(38)	2i	1,0877(9)	0,6026(8)	0,8263(8)	0,053(3)

Atom	Lage	x/a	y/b	z/c	$U_{(eq)}$
C(39)	2i	0,9755(8)	0,6012(8)	0,7600(8)	0,041(2)
C(40)	2i	0,9501(9)	0,5689(9)	0,6281(8)	0,056(3)

**Tabelle 10.12.2: Anisotrope Auslenkungsparameter ( $\text{\AA}^2 \cdot 10^{-3}$ ) von  $\text{Fe}(\text{OMQ})_2$ .**

Atom	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{23}$	$U^{13}$	$U^{12}$
Fe(1)	0,0351(9)	0,0294(8)	0,0199(6)	0,0117(6)	0,0110(6)	0,0102(7)
Fe(2)	0,0338(9)	0,0327(8)	0,0206(6)	0,0129(6)	0,0097(6)	0,0087(7)
O(1)	0,041(4)	0,039(4)	0,025(3)	0,014(3)	0,016(3)	0,021(3)
O(2)	0,049(4)	0,039(4)	0,024(3)	0,019(3)	0,014(3)	0,007(3)
O(3)	0,045(4)	0,029(4)	0,024(3)	0,013(3)	0,017(3)	0,009(3)
O(4)	0,028(4)	0,059(4)	0,027(3)	0,020(3)	0,009(3)	0,014(3)
N(1)	0,043(5)	0,019(3)	0,030(3)	0,013(3)	0,013(3)	0,002(3)
N(2)	0,039(5)	0,034(4)	0,032(4)	0,016(3)	0,017(4)	0,017(4)
N(3)	0,027(4)	0,028(4)	0,027(3)	0,012(3)	0,006(3)	0,008(3)
N(4)	0,045(5)	0,033(4)	0,029(3)	0,019(3)	0,019(4)	0,015(3)
C(1)	0,026(5)	0,026(4)	0,025(4)	0,012(3)	0,008(4)	-0,001(3)
C(2)	0,036(5)	0,031(5)	0,015(3)	0,007(3)	0,011(4)	0,012(4)
C(3)	0,039(6)	0,064(6)	0,029(4)	0,019(4)	0,017(4)	0,027(5)
C(4)	0,062(7)	0,080(7)	0,040(5)	0,032(5)	0,029(5)	0,040(6)
C(5)	0,059(7)	0,092(8)	0,034(5)	0,026(5)	0,028(5)	0,044(6)
C(6)	0,042(6)	0,051(6)	0,039(4)	0,023(4)	0,025(5)	0,025(5)
C(7)	0,055(7)	0,074(7)	0,055(6)	0,038(5)	0,029(6)	0,036(6)
C(8)	0,044(6)	0,067(7)	0,059(6)	0,036(5)	0,024(5)	0,028(5)
C(9)	0,034(6)	0,044(6)	0,040(5)	0,029(4)	0,008(4)	0,012(4)
C(10)	0,055(7)	0,057(6)	0,041(5)	0,032(5)	0,006(5)	0,012(5)
C(11)	0,038(5)	0,036(5)	0,030(4)	0,023(4)	0,010(4)	0,009(4)
C(12)	0,029(5)	0,051(6)	0,033(5)	0,030(5)	0,014(4)	0,020(5)
C(13)	0,060(7)	0,044(6)	0,034(5)	0,022(5)	0,011(5)	0,001(5)
C(14)	0,084(8)	0,053(7)	0,032(5)	0,017(5)	0,033(6)	0,011(6)
C(15)	0,064(7)	0,050(6)	0,042(5)	0,031(5)	0,021(5)	0,010(5)
C(16)	0,036(6)	0,042(5)	0,043(5)	0,032(4)	0,013(4)	0,013(4)
C(17)	0,066(7)	0,038(6)	0,047(5)	0,030(5)	0,020(5)	0,010(5)
C(18)	0,056(7)	0,034(5)	0,050(5)	0,023(5)	0,016(5)	0,008(5)
C(19)	0,034(5)	0,033(5)	0,035(5)	0,019(4)	0,012(4)	0,019(4)
C(20)	0,057(7)	0,029(5)	0,029(4)	0,010(4)	0,012(5)	0,014(5)
C(21)	0,030(5)	0,031(5)	0,032(4)	0,020(4)	0,015(4)	0,010(4)
C(22)	0,032(5)	0,030(5)	0,029(4)	0,021(4)	0,018(4)	0,012(4)
C(23)	0,039(6)	0,058(7)	0,036(5)	0,030(5)	0,022(5)	0,025(5)
C(24)	0,042(6)	0,047(6)	0,046(5)	0,034(5)	0,026(5)	0,018(5)
C(25)	0,044(6)	0,036(5)	0,050(5)	0,027(4)	0,023(5)	0,005(4)
C(26)	0,029(5)	0,039(5)	0,039(5)	0,021(4)	0,014(4)	0,015(4)
C(27)	0,036(6)	0,050(6)	0,058(6)	0,032(5)	0,012(5)	0,005(5)
C(28)	0,052(7)	0,032(5)	0,037(5)	0,014(4)	0,011(5)	0,007(5)
C(29)	0,024(5)	0,033(5)	0,033(4)	0,016(4)	0,004(4)	0,009(4)
C(30)	0,049(7)	0,064(7)	0,029(5)	0,008(5)	0,011(5)	0,011(5)
C(31)	0,039(6)	0,030(5)	0,023(4)	0,013(4)	0,003(4)	0,002(4)
C(32)	0,035(5)	0,036(5)	0,022(4)	0,014(4)	0,006(4)	0,006(4)
C(33)	0,038(6)	0,056(6)	0,026(4)	0,020(4)	0,002(4)	0,013(5)
C(34)	0,073(8)	0,051(6)	0,030(5)	0,023(4)	0,027(5)	0,019(5)
C(35)	0,042(6)	0,055(6)	0,036(5)	0,025(5)	0,000(5)	0,012(5)
C(36)	0,036(6)	0,045(6)	0,046(5)	0,023(4)	0,007(5)	0,010(4)

Atom	U <sup>11</sup>	U <sup>22</sup>	U <sup>33</sup>	U <sup>23</sup>	U <sup>13</sup>	U <sup>12</sup>
C(37)	0,042(6)	0,068(7)	0,060(6)	0,039(5)	0,021(5)	0,034(5)
C(38)	0,060(7)	0,060(6)	0,055(6)	0,031(5)	0,035(6)	0,029(5)
C(39)	0,039(6)	0,043(5)	0,049(5)	0,027(5)	0,020(5)	0,016(4)
C(40)	0,075(8)	0,070(7)	0,046(5)	0,036(5)	0,037(6)	0,035(6)

**Tabelle 10.12.3: Ausgewählte Bindungslängen [pm] von Fe(OMQ)<sub>2</sub>.**

Fe(1)-Fe(1*)	349,2(2)	Fe(1)-(O3)	219,3(6)	Fe(2)-(O2)	213,6(6)
Fe(1)-Fe(2)	339,2(2)	Fe(1)-(O3*)	241,4(7)	Fe(2)-(O3)	216,3(5)
Fe(1)-Fe(2*)	340,6(2)	Fe(1)-(N1)	218,8(7)	Fe(2)-(O4)	198,4(6)
Fe(1)-(O1)	201,9(6)	Fe(1)-(N2)	226,5(7)	Fe(2)-(N3)	220,7(7)
Fe(1)-(O2)	204,6(5)	Fe(2)-(O1*)	219,5(6)	Fe(2)-(N4)	239,8(7)

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* = 1-x, 1-y, 1-z

**Tabelle 10.12.4: Ausgewählte Winkel [grad] von Fe(OMQ)<sub>2</sub>.**

Fe(1)-Fe(1*)-Fe(2)	58,89(4)	O(1)-Fe(1)-(N2)	108,3(2)	O(1*)-Fe(2)-O(4)	95,4(2)
Fe(1)-Fe(1*)-Fe(2*)	59,28(4)	O(2)-Fe(1)-(O3)	75,1(2)	O(1*)-Fe(2)-N(3)	90,5(2)
Fe(1)-Fe(2)-Fe(1*)	61,83(4)	O(2)-Fe(1)-(O3*)	92,2(2)	O(1*)-Fe(2)-N(4)	168,5(2)
Fe(2)-Fe(1)-Fe(2*)	118,18(5)	O(2)-Fe(1)-(N1)	112,6(3)	O(2)-Fe(2)-O(3)	74,0(2)
Fe(1)-O(1)-Fe(2*)	107,8(2)	O(2)-Fe(1)-(N2)	78,0(2)	O(2)-Fe(2)-O(4)	101,3(2)
Fe(1)-O(2)-Fe(2)	108,4(2)	O(3)-Fe(1)-(O3*)	81,6(2)	O(2)-Fe(2)-N(3)	148,2(2)
Fe(1)-O(3)-Fe(1*)	98,4(3)	O(3)-Fe(1)-(N1)	104,2(2)	O(2)-Fe(2)-N(4)	98,1(2)
Fe(1)-O(3)-Fe(2)	102,3(2)	O(3)-Fe(1)-(N2)	153,0(2)	O(3)-Fe(2)-O(4)	172,6(3)
Fe(1)-O(3*)-Fe(2*)	96,0(2)	O(3*)-Fe(1)-(N1)	155,2(3)	O(3)-Fe(2)-N(3)	75,0(2)
O(1)-Fe(1)-(O2)	167,9(3)	O(3*)-Fe(1)-(N2)	96,8(3)	O(3)-Fe(2)-N(4)	110,6(2)
O(1)-Fe(1)-(O3)	97,7(2)	N(1)-Fe(1)-(N2)	88,6(2)	O(4)-Fe(2)-N(3)	110,2(3)
O(1)-Fe(1)-(O3*)	77,0(2)	O(1*)-Fe(2)-O(2)	90,3(2)	O(4)-Fe(2)-N(4)	75,4(2)
O(1)-Fe(1)-(N1)	78,4(2)	O(1*)-Fe(2)-O(3)	79,1(2)	N(3)-Fe(2)-N(4)	86,4(2)

Durch Symmetrie erzeugte Atome: \* = 1-x, 1-y, 1-z



Ich versichere, dass ich die von mir vorgelegte Dissertation selbständig angefertigt, die benutzten Quellen und Hilfsmittel vollständig angegeben und die Stellen der Arbeit – einschließlich Tabellen, Karten und Abbildungen –, die anderen Werken im Wortlaut oder dem Sinn nach entnommen sind, in jedem Einzelfall als Entlehnung kenntlich gemacht habe; dass diese Dissertation noch keiner anderen Fakultät oder Universität zur Prüfung vorgelegen hat; dass sie – abgesehen von unten angegebenen Teilpublikationen – noch nicht veröffentlicht worden ist sowie, dass ich eine solche Veröffentlichung vor Abschluss des Promotionsverfahrens nicht vornehmen werde. Die Bestimmungen der Promotionsordnung sind mir bekannt. Die von mir vorgelegte Dissertation ist von Prof. Dr. Gerd Meyer betreut worden.

Köln, den 14.09.2008

# Curriculum Vitae

## Persönliche Daten:

Geb.: 17. Mai 1977 in Dortmund

ledig, keine Kinder

Staatsangehörigkeit: deutsch

## Studium

Jul. 2006 – Nov. 2007	<b>Promotion</b> in Festkörperchemie Thema: Neue metallorganische Verbindungen der 3d-Übergangsmetalle und der Lanthanide
Dez. 2005 – Jun. 2006	<b>Diplom</b> in Festkörperchemie Thema: Reactions of Hydroxyquinolines with Rare Earth Metals
Dez. 2005 – Mai 2006	Experimenteller Teil der Diplomarbeit an der Monash University (Melbourne, Australien)
Apr. 2003 – Jun. 2006	<b>Chemie-Hauptstudium</b> (Universität zu Köln)
Okt. 1997 – Mär. 2003	<b>Chemie-Grundstudium</b> (Ruhr Universität Bochum)

## Studentische Tätigkeiten

Feb. 2004 – Jun. 2006	Studentische Hilfskraft im Arbeitskreis von Prof. Dr. Gerd Meyer
-----------------------	--

## Schulbildung

1993 – 1997	Willi Brandt Gesamtschule Castrop-Rauxel
1987 – 1993	Fridtjof Nansen Realschule Castrop-Rauxel

Köln, den 14.09.2008