

8 Anhang

8.2 Kristallstrukturen

8.2.1 Kristallstrukturen Kapitel 4.1

8.2.1.1 Kristallstruktur von (S)-27

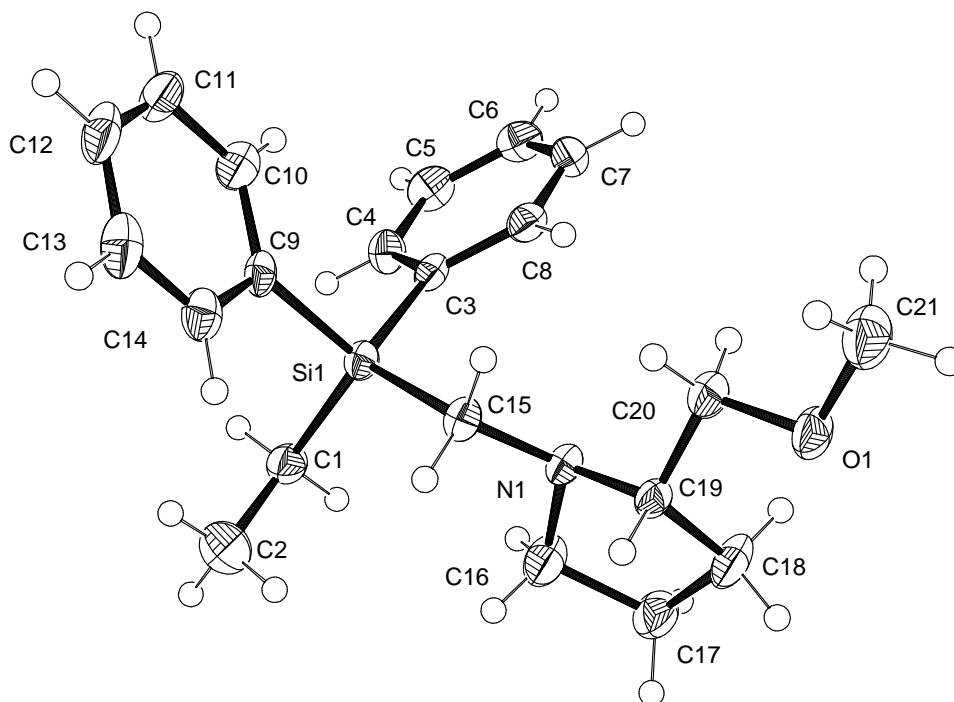


Abb. 8.1 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung (S)-27 im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.1 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von (S)-27.

Atom	x	y	z	U(eq)
C(15)	909(3)	9293(2)	8956(1)	24(1)
C(16)	2979(3)	8659(2)	9735(1)	39(1)
C(21)	-4277(3)	11404(2)	10243(1)	44(1)
C(14)	-79(3)	8791(2)	7599(1)	30(1)
C(2)	3743(4)	7159(2)	8302(1)	48(1)
C(11)	709(3)	10441(2)	6871(1)	42(1)
C(18)	1032(3)	9475(2)	10478(1)	40(1)
C(12)	-827(3)	9706(2)	6751(1)	42(1)
C(5)	7479(3)	11783(2)	8291(1)	35(1)
C(7)	4744(3)	12550(2)	8820(1)	31(1)
C(8)	3658(3)	11584(2)	8783(1)	27(1)
C(17)	2900(3)	8760(2)	10367(1)	39(1)
C(10)	1826(3)	10357(2)	7357(1)	34(1)
C(4)	6396(3)	10827(2)	8254(1)	30(1)
C(6)	6642(3)	12647(2)	8571(1)	33(1)
C(13)	-1214(3)	8877(2)	7117(1)	38(1)
C(9)	1456(3)	9531(2)	7735(1)	24(1)
C(20)	-1445(3)	10505(2)	9860(1)	30(1)
C(19)	-123(3)	9511(2)	9932(1)	24(1)
C(3)	4445(3)	10702(2)	8496(1)	23(1)
C(1)	4751(3)	8248(2)	8363(1)	30(1)

N(1)	1569(2)	9478(1)	9528(1)	23(1)
O(1)	-2832(2)	10562(1)	10315(1)	32(1)
Si(1)	2950(1)	9426(1)	8402(1)	22(1)

Tab. 8.2 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von (S)-27.

Atom	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
C(15)	22(1)	31(1)	20(1)	-1(1)	1(1)	-2(1)
C(16)	40(1)	52(2)	25(1)	1(1)	1(1)	14(1)
C(21)	41(1)	59(2)	33(1)	-4(1)	2(1)	16(1)
C(14)	25(1)	38(1)	27(1)	-7(1)	5(1)	6(1)
C(2)	53(2)	41(2)	49(1)	-3(1)	2(1)	9(1)
C(11)	55(2)	49(2)	22(1)	1(1)	-1(1)	10(1)
C(18)	43(1)	58(2)	18(1)	2(1)	3(1)	8(1)
C(12)	41(1)	62(2)	24(1)	-13(1)	-11(1)	24(1)
C(5)	26(1)	43(1)	37(1)	5(1)	3(1)	-7(1)
C(7)	38(1)	26(1)	29(1)	-3(1)	-2(1)	4(1)
C(8)	26(1)	32(1)	23(1)	3(1)	0(1)	3(1)
C(17)	46(1)	45(1)	26(1)	3(1)	-3(1)	12(1)
C(10)	33(1)	40(1)	27(1)	-1(1)	-1(1)	2(1)
C(4)	28(1)	34(1)	28(1)	-4(1)	4(1)	0(1)
C(6)	34(1)	31(1)	34(1)	4(1)	-7(1)	-11(1)
C(13)	29(1)	53(2)	32(1)	-15(1)	-3(1)	3(1)
C(9)	22(1)	30(1)	19(1)	-7(1)	3(1)	5(1)
C(20)	35(1)	33(1)	23(1)	1(1)	7(1)	-1(1)
C(19)	27(1)	25(1)	19(1)	1(1)	6(1)	-4(1)
C(3)	23(1)	29(1)	16(1)	1(1)	-1(1)	1(1)
C(1)	34(1)	31(1)	26(1)	2(1)	1(1)	7(1)
N(1)	22(1)	30(1)	18(1)	1(1)	2(1)	0(1)
O(1)	31(1)	42(1)	24(1)	-1(1)	8(1)	7(1)
Si(1)	21(1)	26(1)	20(1)	-1(1)	1(1)	1(1)

8.2.1.2 Kristallstruktur von (S)-80

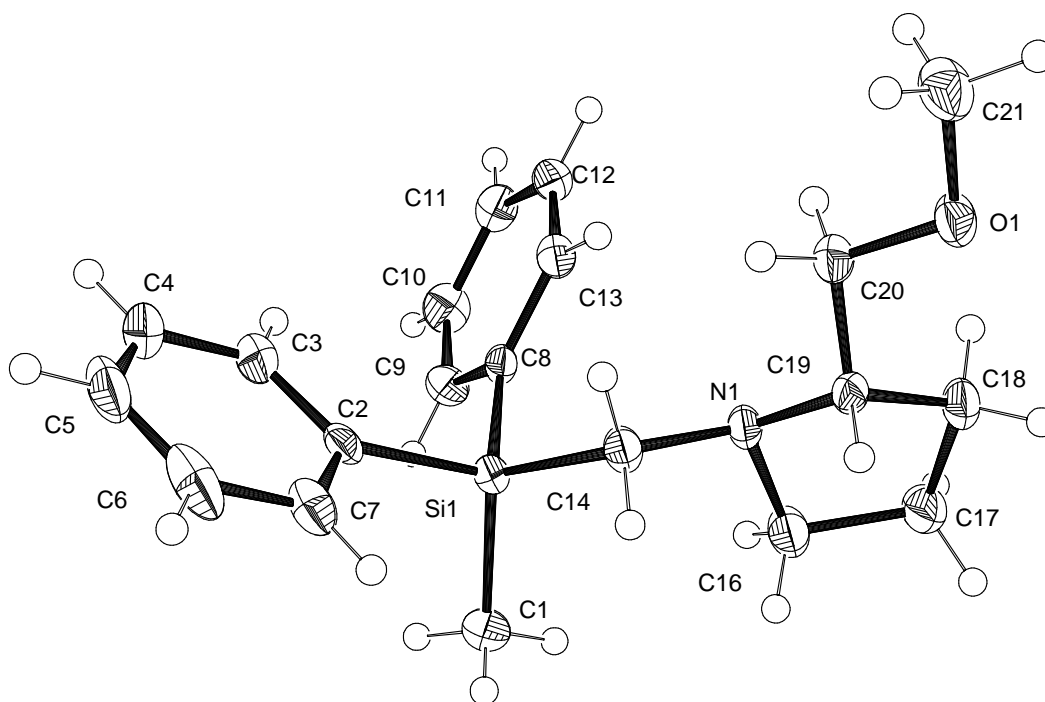


Abb. 8.2 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung (S)-80 im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.3 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von (S)-**80**.

Atom	x	y	z	U(eq)
C(21)	14196(3)	6384(1)	-251(1)	38(1)
C(5)	10873(3)	4953(2)	3304(1)	47(1)
C(7)	10091(2)	3874(1)	2485(1)	31(1)
C(4)	9351(3)	5688(2)	3168(1)	47(1)
C(6)	11238(3)	4036(2)	2962(1)	43(1)
C(17)	7076(3)	3708(1)	-337(1)	34(1)
C(10)	2511(2)	6763(1)	1735(1)	33(1)
C(1)	5507(2)	3108(1)	1733(1)	33(1)
C(9)	3615(2)	5784(1)	1782(1)	28(1)
C(13)	6248(2)	6589(1)	1230(1)	24(1)
C(16)	7017(3)	3617(1)	308(1)	32(1)
C(18)	8937(2)	4431(1)	-463(1)	30(1)
C(3)	8201(3)	5522(1)	2687(1)	34(1)
C(11)	3273(2)	7661(1)	1438(1)	29(1)
C(14)	9091(2)	4265(1)	1093(1)	23(1)
C(12)	5143(2)	7566(1)	1182(1)	27(1)
C(2)	8556(2)	4613(1)	2329(1)	22(1)
C(20)	11420(2)	5478(1)	159(1)	25(1)
C(8)	5524(2)	5672(1)	1536(1)	20(1)
N(1)	8440(2)	4458(1)	510(1)	21(1)
C(19)	10078(2)	4467(1)	94(1)	21(1)
O(1)	12762(1)	5512(1)	-307(1)	28(1)
Si(1)	7099(1)	4396(1)	1658(1)	20(1)

Tab. 8.4 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von (S)-**80**.

Atom	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
C(21)	32(1)	53(1)	30(1)	2(1)	2(1)	-14(1)
C(5)	54(1)	65(1)	22(1)	15(1)	-13(1)	-29(1)
C(7)	28(1)	39(1)	24(1)	9(1)	2(1)	-2(1)
C(4)	77(1)	44(1)	20(1)	2(1)	-8(1)	-19(1)
C(6)	30(1)	69(1)	31(1)	24(1)	-4(1)	-4(1)
C(17)	44(1)	35(1)	23(1)	0(1)	-3(1)	-12(1)
C(10)	24(1)	40(1)	36(1)	-3(1)	7(1)	2(1)
C(1)	40(1)	27(1)	31(1)	2(1)	4(1)	-8(1)
C(9)	28(1)	29(1)	28(1)	3(1)	5(1)	-6(1)
C(13)	22(1)	28(1)	21(1)	0(1)	0(1)	-2(1)
C(16)	35(1)	39(1)	21(1)	1(1)	0(1)	-11(1)
C(18)	39(1)	35(1)	17(1)	-2(1)	1(1)	-7(1)
C(3)	51(1)	30(1)	21(1)	4(1)	-3(1)	0(1)
C(11)	30(1)	30(1)	28(1)	-2(1)	-5(1)	8(1)
C(14)	26(1)	26(1)	18(1)	2(1)	1(1)	1(1)
C(12)	31(1)	26(1)	23(1)	3(1)	-2(1)	-1(1)
C(2)	26(1)	24(1)	17(1)	7(1)	2(1)	-6(1)
C(20)	29(1)	26(1)	19(1)	-1(1)	5(1)	1(1)
C(8)	23(1)	23(1)	14(1)	-1(1)	-1(1)	-3(1)
N(1)	24(1)	25(1)	14(1)	0(1)	2(1)	-2(1)
C(19)	29(1)	18(1)	17(1)	-1(1)	3(1)	4(1)
O(1)	27(1)	37(1)	20(1)	-2(1)	5(1)	-8(1)
Si(1)	24(1)	21(1)	16(1)	1(1)	1(1)	-2(1)

8.2.1.3 Kristallstruktur von (R,S,S)-93

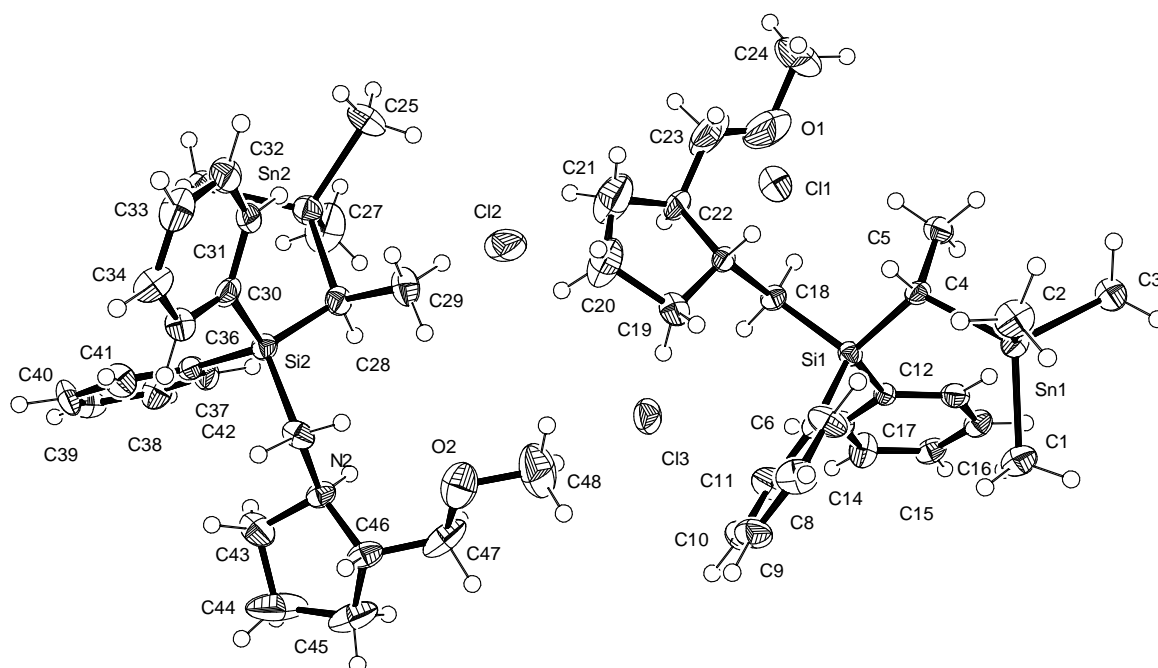


Abb. 8.3 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung (R,S,S)-93 im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.5 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von (R,S,S)-93.

Atom	x	y	z	U(eq)
C(1)	3906(9)	6139(9)	9512(6)	39(2)
C(2)	2645(11)	9279(10)	7890(7)	34(3)
C(3)	6199(9)	7924(9)	8563(6)	33(2)
C(4)	5296(9)	6247(8)	7071(5)	22(2)
C(5)	6764(9)	6265(9)	6618(6)	34(2)
C(6)	3327(8)	4540(7)	7615(5)	22(2)
C(7)	2171(9)	5805(8)	7605(6)	35(2)
C(8)	748(9)	5854(10)	7885(6)	40(2)
C(9)	517(12)	4609(12)	8144(7)	38(3)
C(10)	1620(11)	3347(10)	8159(7)	31(2)
C(11)	3013(10)	3286(9)	7895(6)	41(2)
C(12)	6596(8)	3057(7)	7992(5)	19(2)
C(13)	6954(11)	1593(10)	8019(7)	29(3)
C(14)	7930(10)	588(10)	8557(7)	35(2)
C(15)	8639(9)	927(9)	9153(5)	30(2)
C(16)	8298(9)	2367(8)	9170(6)	29(2)
C(17)	7274(8)	3407(8)	8585(5)	28(2)
C(18)	5861(8)	3756(8)	6024(5)	24(2)
C(19)	3527(9)	4321(8)	5334(6)	31(2)
C(20)	3219(12)	4410(16)	4311(7)	68(4)
C(21)	4502(13)	4438(15)	3708(8)	76(4)
C(22)	5737(10)	4074(10)	4273(6)	35(2)
C(25)	4424(12)	2383(12)	830(8)	62(3)
C(26)	2787(10)	397(10)	157(6)	39(2)
C(27)	5658(15)	-1308(15)	1469(10)	75(5)
C(28)	2338(9)	901(8)	2554(6)	30(2)
C(29)	2245(11)	2194(10)	2973(7)	44(2)
C(30)	-626(9)	2495(8)	1742(5)	27(2)
C(31)	-50(9)	3443(8)	1154(5)	27(2)
C(32)	-931(10)	4700(9)	655(6)	38(2)
C(33)	-2425(10)	5009(8)	721(6)	39(2)
C(34)	-2993(12)	4084(10)	1246(7)	33(3)
C(35)	-2122(10)	2863(10)	1756(7)	29(2)

C(36)	742(8)	-813(8)	2078(5)	25(2)
C(37)	1977(9)	-2023(8)	2194(6)	31(2)
C(38)	2114(10)	-3287(9)	1937(6)	36(2)
C(39)	988(14)	-3356(11)	1520(8)	43(3)
C(40)	-219(11)	-2167(11)	1393(7)	39(2)
C(41)	-360(9)	-904(9)	1675(6)	32(2)
C(42)	-560(8)	1010(8)	3695(6)	27(2)
C(43)	-368(10)	-1483(10)	4325(7)	43(2)
C(44)	-782(17)	-2164(12)	5288(8)	83(5)
C(45)	-652(12)	-1287(11)	6004(7)	58(3)
C(46)	-776(10)	131(9)	5448(6)	35(2)
C(47)	-47(11)	781(11)	5903(6)	52(3)
C(48)	372(14)	2846(13)	5884(10)	73(4)
C(23)	6510(16)	5000(20)	3774(9)	114(6)
C(24)	8110(20)	6020(20)	3704(11)	135(8)
Cl(1)	3190(2)	7880(2)	4839(2)	34(1)
Cl(2)	6170(3)	575(4)	3239(2)	67(1)
Ar	5385(3)	410(2)	6306(2)	50(1)
N(1)	4952(8)	4514(7)	5209(5)	24(2)
N(2)	-78(8)	-223(7)	4473(5)	27(2)
O(2)	-302(8)	2180(8)	5450(5)	56(2)
O(1)	7346(19)	5130(20)	4144(7)	196(7)
Si(1)	5231(2)	4447(2)	7208(2)	21(1)
Si(2)	542(2)	870(2)	2492(2)	23(1)
Sn(1)	4501(1)	7377(1)	8273(1)	25(1)
Sn(2)	3804(1)	567(1)	1275(1)	33(1)

Tab. 8.6 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von (R,S,S)-93.

Atom	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
C(1)	33(5)	48(5)	28(5)	-8(4)	7(4)	-12(4)
C(2)	27(6)	22(5)	40(6)	-5(4)	-4(5)	4(5)
C(3)	35(5)	31(5)	35(5)	2(4)	-10(4)	-14(4)
C(4)	31(5)	18(4)	17(4)	-3(3)	-1(3)	-9(4)
C(5)	39(5)	30(5)	37(5)	-8(4)	5(4)	-20(4)
C(6)	24(4)	18(4)	24(4)	-2(3)	-5(3)	-7(3)
C(7)	25(5)	20(4)	54(6)	5(4)	-4(4)	-7(4)
C(8)	21(5)	42(6)	43(6)	-4(4)	0(4)	-1(4)
C(9)	32(6)	44(7)	40(6)	-4(5)	6(5)	-21(6)
C(10)	30(6)	22(5)	40(6)	2(4)	-6(4)	-11(5)
C(11)	37(6)	28(5)	45(6)	-11(4)	0(4)	2(4)
C(12)	20(4)	19(4)	21(4)	0(3)	-4(3)	-11(3)
C(13)	30(6)	23(5)	30(6)	3(4)	-10(4)	-6(4)
C(14)	39(6)	21(5)	40(6)	-4(4)	-10(5)	-4(5)
C(15)	28(5)	36(5)	18(4)	2(3)	-9(4)	-4(4)
C(16)	23(4)	33(5)	28(5)	-5(4)	-3(4)	-7(4)
C(17)	26(5)	29(4)	28(5)	-2(4)	1(4)	-14(4)
C(18)	24(4)	22(4)	26(4)	5(3)	-12(3)	-7(3)
C(19)	29(5)	18(4)	47(6)	3(4)	-21(4)	-7(4)
C(20)	57(8)	117(11)	35(6)	-31(7)	1(5)	-32(8)
C(21)	64(8)	113(11)	41(7)	-22(7)	-14(6)	-18(8)
C(22)	41(5)	47(5)	22(5)	-20(4)	6(4)	-17(5)
C(25)	69(8)	80(8)	61(7)	-6(6)	5(6)	-60(7)
C(26)	39(5)	52(6)	27(5)	-9(4)	-4(4)	-17(5)
C(27)	45(8)	81(10)	82(10)	-25(8)	-14(7)	3(8)
C(28)	35(5)	20(4)	34(5)	-5(4)	-6(4)	-9(4)
C(29)	46(6)	46(6)	50(6)	-18(5)	-4(5)	-24(5)
C(30)	35(5)	31(4)	15(4)	-8(3)	-3(4)	-12(4)
C(31)	34(5)	24(4)	30(5)	-4(4)	-5(4)	-17(4)
C(32)	54(6)	25(5)	42(5)	-5(4)	-18(5)	-17(4)
C(33)	53(6)	12(4)	39(5)	-4(4)	-17(5)	7(4)
C(34)	36(6)	18(5)	27(5)	-2(4)	-1(5)	8(5)
C(35)	26(5)	24(5)	38(6)	-8(4)	-4(4)	-9(4)
C(36)	24(4)	31(4)	18(4)	-2(3)	1(3)	-11(4)
C(37)	40(5)	25(4)	30(5)	-3(3)	-11(4)	-13(4)
C(38)	35(5)	27(5)	39(5)	-4(4)	-14(4)	-1(4)
C(39)	78(9)	24(6)	33(6)	-18(5)	21(6)	-29(6)
C(40)	38(6)	47(6)	47(6)	-4(5)	-18(5)	-26(5)
C(41)	23(5)	27(4)	41(5)	-4(4)	-5(4)	-4(4)
C(42)	16(4)	22(4)	39(5)	3(4)	-8(4)	-5(3)
C(43)	37(5)	37(5)	57(6)	9(4)	-17(5)	-18(5)

C(44)	108(12)	47(7)	64(9)	1(6)	47(8)	-25(8)
C(45)	54(7)	60(7)	28(5)	13(5)	0(5)	-1(5)
C(46)	31(5)	38(5)	25(5)	0(4)	7(4)	-8(4)
C(47)	53(7)	57(7)	21(5)	-1(5)	-7(5)	4(6)
C(48)	71(9)	64(8)	100(10)	-41(7)	-12(8)	-27(7)
C(23)	87(10)	250(20)	34(7)	-58(10)	19(7)	-90(12)
C(24)	200(20)	223(19)	80(12)	7(12)	-10(12)	-202(18)
Cl(1)	38(1)	23(1)	39(1)	-1(1)	-11(1)	-8(1)
Cl(2)	43(2)	114(2)	49(2)	8(2)	-4(1)	-45(2)
Ar	69(2)	39(1)	51(1)	-9(1)	-14(1)	-25(1)
N(1)	42(5)	11(3)	18(4)	2(3)	-7(3)	-12(3)
N(2)	22(4)	27(4)	26(4)	1(3)	-4(3)	-6(4)
O(2)	45(4)	61(5)	57(5)	-20(4)	-17(4)	-4(4)
O(1)	269(17)	410(20)	42(6)	-67(9)	69(8)	-283(17)
Si(1)	21(1)	20(1)	23(1)	-2(1)	-3(1)	-9(1)
Si(2)	23(1)	22(1)	24(1)	-2(1)	-5(1)	-7(1)
Sn(1)	26(1)	23(1)	25(1)	-4(1)	-3(1)	-6(1)
Sn(2)	29(1)	37(1)	35(1)	-7(1)	0(1)	-14(1)

8.2.1.4 Kristallstruktur von (R,S,S)-94

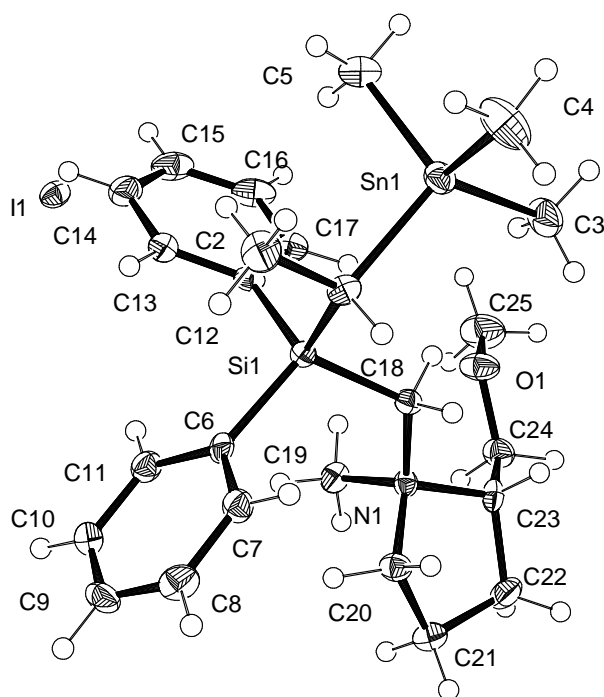


Abb. 8.4 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung (R,S,S)-94 im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.7 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von (R,S,S)-94.

Atom	x	y	z	U(eq)
Sn(1)	7003(1)	10834(1)	5330(1)	23(1)
I(1)	6717(1)	3627(1)	3709(1)	24(1)
Si(1)	7626(1)	10019(1)	3822(1)	15(1)
O(1)	3308(2)	9448(2)	3667(1)	31(1)
N(1)	5399(2)	10468(2)	2955(1)	16(1)
C(8)	9994(3)	11201(3)	2404(2)	29(1)
C(12)	7475(3)	8594(3)	4073(1)	18(1)
C(17)	6313(3)	8128(3)	4253(1)	22(1)
C(1)	8196(3)	10871(3)	4483(1)	20(1)
C(10)	9850(3)	9332(3)	2218(2)	27(1)
C(20)	6041(3)	11223(3)	2496(1)	22(1)
C(9)	10307(3)	10307(3)	2044(2)	28(1)
C(18)	5968(3)	10564(2)	3616(1)	17(1)
C(24)	3017(3)	9991(3)	3091(2)	25(1)
C(23)	3995(3)	10847(3)	2962(2)	21(1)
C(11)	9071(3)	9235(3)	2748(1)	23(1)
C(13)	8569(3)	7954(3)	4139(1)	24(1)
C(21)	5057(3)	11350(3)	1965(2)	26(1)
C(16)	6248(4)	7086(3)	4467(2)	30(1)
C(19)	5515(3)	9353(2)	2710(1)	21(1)
C(15)	7329(4)	6477(3)	4508(2)	33(1)
C(14)	8500(4)	6903(3)	4353(2)	32(1)
C(7)	9237(3)	11103(2)	2943(2)	23(1)
C(6)	8737(3)	10111(3)	3120(2)	19(1)
C(22)	3765(3)	11372(3)	2308(2)	29(1)
C(25)	2407(3)	8615(3)	3781(2)	44(1)
C(2)	9608(3)	10636(3)	4665(2)	32(1)
C(5)	7350(4)	9344(3)	5795(2)	39(1)
C(3)	4986(3)	11037(3)	5157(2)	36(1)
C(4)	7646(4)	12089(3)	5939(2)	46(1)

Tab. 8.8 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von *(R,S,S)*-94.

Atom	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
Sn(1)	22(1)	28(1)	19(1)	-4(1)	-1(1)	0(1)
I(1)	30(1)	20(1)	24(1)	1(1)	-4(1)	0(1)
Si(1)	14(1)	15(1)	16(1)	0(1)	0(1)	-1(1)
O(1)	24(1)	43(1)	24(1)	10(1)	-1(1)	-9(1)
N(1)	16(2)	16(1)	17(1)	-3(1)	-2(1)	1(1)
C(8)	24(2)	27(2)	36(2)	10(2)	0(2)	-7(2)
C(12)	25(2)	17(2)	12(1)	-1(1)	-2(1)	-3(1)
C(17)	20(2)	25(2)	21(2)	0(2)	-3(1)	-3(1)
C(1)	19(2)	21(2)	20(1)	-1(1)	-5(1)	-4(2)
C(10)	26(2)	31(2)	23(2)	1(2)	3(1)	8(2)
C(20)	21(2)	24(2)	20(2)	3(2)	1(1)	-3(1)
C(9)	17(2)	46(2)	20(2)	5(2)	4(1)	-2(2)
C(18)	18(2)	20(2)	14(2)	0(1)	-1(1)	0(1)
C(24)	20(2)	33(2)	23(2)	3(1)	2(2)	-2(2)
C(23)	14(2)	21(2)	26(2)	-4(2)	-1(1)	5(2)
C(11)	25(2)	18(2)	25(2)	2(2)	0(1)	1(2)
C(13)	23(2)	27(2)	21(2)	2(1)	2(1)	3(1)
C(21)	27(2)	26(2)	24(2)	4(2)	-4(1)	0(2)
C(16)	40(2)	28(2)	23(2)	5(2)	-3(2)	-18(2)
C(19)	23(2)	17(2)	23(2)	-4(1)	-6(1)	0(1)
C(15)	55(3)	19(2)	24(2)	3(2)	-4(2)	-4(2)
C(14)	48(3)	25(2)	24(2)	1(2)	0(2)	12(2)
C(7)	18(2)	23(2)	27(2)	2(1)	2(1)	0(1)
C(6)	11(2)	22(2)	23(2)	1(1)	-1(1)	3(1)
C(22)	27(2)	28(2)	32(2)	9(2)	-5(1)	7(2)
C(25)	38(2)	52(2)	40(2)	12(2)	3(2)	-12(2)
C(2)	22(2)	42(2)	32(2)	-7(2)	-9(2)	-2(2)
C(5)	46(2)	45(2)	24(2)	9(2)	0(2)	7(2)
C(3)	19(2)	59(3)	31(2)	0(2)	4(1)	7(2)
C(4)	50(3)	51(3)	36(2)	-24(2)	7(2)	-17(2)

8.2.1.5 Kristallstruktur von *(R,R)*-106

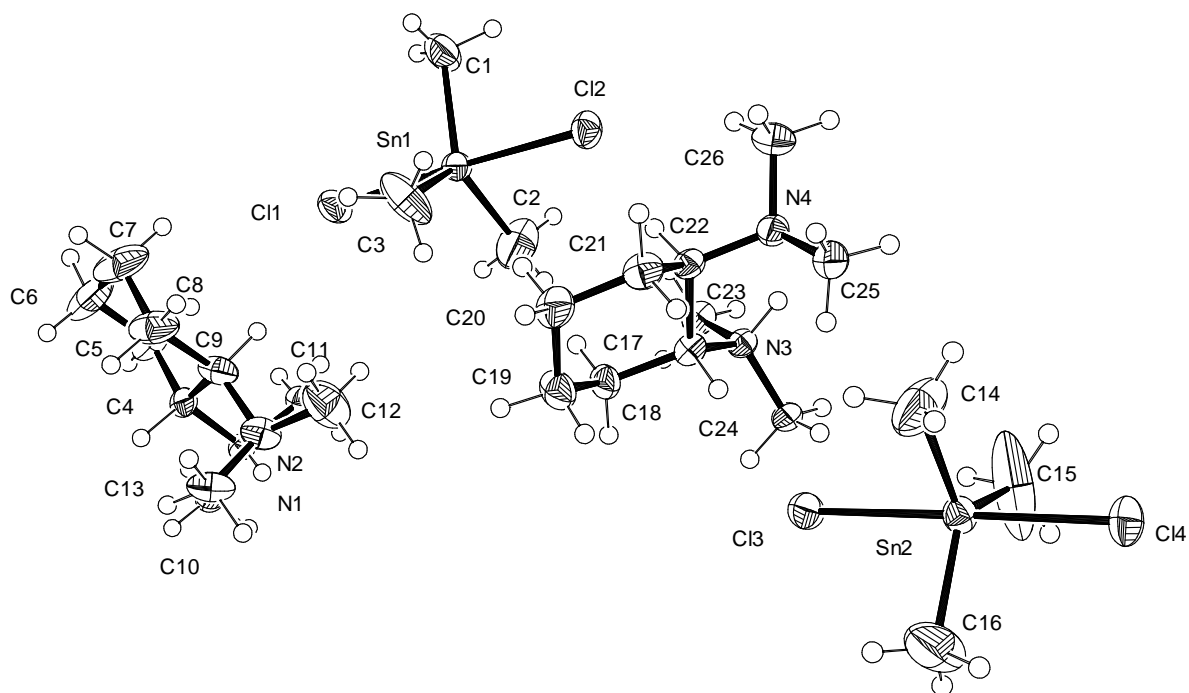


Abb. 8.5 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung *(R,R)*-106 im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.9 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von (*R,R*)-106.

Atom	x	y	z	U(eq)
C(1)	9740(2)	1289(2)	4825(2)	58(1)
C(2)	7497(3)	-146(2)	5143(2)	74(1)
C(3)	6847(2)	1940(2)	4984(2)	66(1)
C(4)	4637(3)	873(2)	2320(2)	31(1)
C(5)	5685(3)	896(2)	1856(2)	47(1)
C(6)	5898(4)	1740(2)	1642(3)	73(2)
C(7)	6029(3)	2261(2)	2269(2)	69(1)
C(8)	4977(3)	2226(3)	2721(2)	53(1)
C(9)	4769(2)	1394(2)	2965(2)	37(1)
C(10)	3824(3)	-406(2)	2006(2)	33(1)
C(11)	5312(3)	-369(2)	2885(2)	31(1)
C(12)	4091(3)	1407(2)	4165(2)	65(1)
C(13)	2784(2)	1665(2)	3243(2)	43(1)
C(14)	2977(3)	2172(2)	9896(2)	82(1)
C(15)	3031(4)	74(2)	10093(2)	128(2)
C(16)	348(3)	1104(3)	9797(2)	99(2)
C(17)	4873(2)	840(2)	7397(2)	25(1)
C(18)	4443(3)	901(2)	6648(2)	33(1)
C(19)	3876(3)	1685(2)	6555(2)	41(1)
C(20)	4660(3)	2340(2)	6747(2)	42(1)
C(21)	5132(3)	2262(3)	7484(2)	36(1)
C(22)	5724(2)	1490(2)	7577(2)	26(1)
C(23)	6093(3)	-283(2)	7009(2)	33(1)
C(24)	4575(3)	-489(2)	7856(2)	31(1)
C(25)	5563(3)	1530(2)	8863(2)	43(1)
C(26)	7387(2)	1637(2)	8313(2)	37(1)
Cl(1)	7731(1)	799(1)	3622(1)	41(1)
Cl(2)	8257(1)	1156(1)	6330(1)	37(1)
Cl(3)	2372(1)	902(1)	8579(1)	39(1)
Cl(4)	1860(1)	1196(1)	11297(1)	40(1)
N(1)	4353(2)	65(1)	2561(2)	26(1)
N(2)	3809(2)	1255(2)	3438(2)	37(1)
N(3)	5411(2)	72(1)	7584(2)	25(1)
N(4)	6245(2)	1309(2)	8249(1)	30(1)
Sn(1)	8014(1)	1009(1)	4980(1)	29(1)
Sn(2)	2106(1)	1097(1)	9945(1)	30(1)

Tab. 8.10 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von (*R,R*)-106.

Atom	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
C(1)	32(2)	101(3)	39(2)	8(2)	-6(2)	-1(2)
C(2)	122(3)	53(2)	47(3)	-9(2)	9(3)	-32(2)
C(3)	58(2)	72(2)	70(3)	-24(3)	-30(3)	37(2)
C(4)	26(2)	25(2)	43(2)	14(2)	-1(2)	4(2)
C(5)	49(2)	32(2)	58(3)	9(2)	20(2)	3(2)
C(6)	61(3)	55(3)	102(4)	32(3)	36(3)	-2(2)
C(7)	53(2)	25(2)	130(4)	10(2)	19(3)	-10(2)
C(8)	35(2)	29(3)	94(4)	-2(2)	2(2)	-2(2)
C(9)	27(2)	27(2)	57(2)	-6(2)	-9(2)	1(2)
C(10)	38(2)	33(2)	29(2)	-2(2)	-2(2)	-8(2)
C(11)	30(2)	23(2)	38(2)	2(2)	-5(2)	4(2)
C(12)	60(3)	86(3)	50(3)	-16(2)	-11(2)	10(2)
C(13)	28(2)	42(2)	59(3)	-17(2)	1(2)	-5(2)
C(14)	114(3)	81(3)	50(3)	-19(2)	29(3)	-51(2)
C(15)	255(6)	90(3)	40(3)	-12(3)	-17(4)	120(4)
C(16)	39(2)	206(6)	52(3)	-36(3)	6(2)	7(3)
C(17)	27(2)	18(2)	30(2)	0(1)	6(2)	4(1)
C(18)	38(2)	28(2)	34(2)	8(2)	-8(1)	-2(2)
C(19)	46(2)	30(2)	48(2)	8(2)	-15(2)	0(2)
C(20)	47(2)	28(2)	52(2)	11(2)	-1(2)	2(2)
C(21)	38(2)	23(2)	45(2)	-1(2)	2(2)	0(2)
C(22)	29(2)	21(2)	29(2)	1(1)	2(1)	-4(1)
C(23)	39(2)	27(2)	35(2)	-3(2)	4(2)	0(2)
C(24)	30(2)	27(2)	34(2)	7(2)	-2(2)	-9(2)
C(25)	43(2)	55(2)	31(2)	1(2)	0(2)	-10(2)
C(26)	29(2)	32(2)	49(2)	-8(2)	-2(2)	-1(2)
Cl(1)	36(1)	59(1)	28(1)	-6(1)	-2(1)	-3(1)

Cl(2)	48(1)	37(1)	26(1)	-1(1)	1(1)	-2(1)
Cl(3)	33(1)	56(1)	27(1)	-5(1)	2(1)	-1(1)
Cl(4)	57(1)	37(1)	25(1)	-2(1)	3(1)	3(1)
N(1)	27(2)	22(2)	30(2)	2(1)	4(1)	1(1)
N(2)	32(1)	39(2)	41(2)	-13(1)	-1(1)	1(1)
N(3)	27(1)	22(2)	25(2)	-2(1)	2(1)	-2(1)
N(4)	34(1)	28(2)	27(2)	-2(1)	0(1)	-7(1)
Sn(1)	27(1)	33(1)	26(1)	-2(1)	1(1)	-3(1)
Sn(2)	31(1)	34(1)	26(1)	-2(1)	2(1)	4(1)

8.2.2 Kristallstrukturen Kapitel 4.2

8.2.2.1 Kristallstruktur von [(R,S)-124]₂

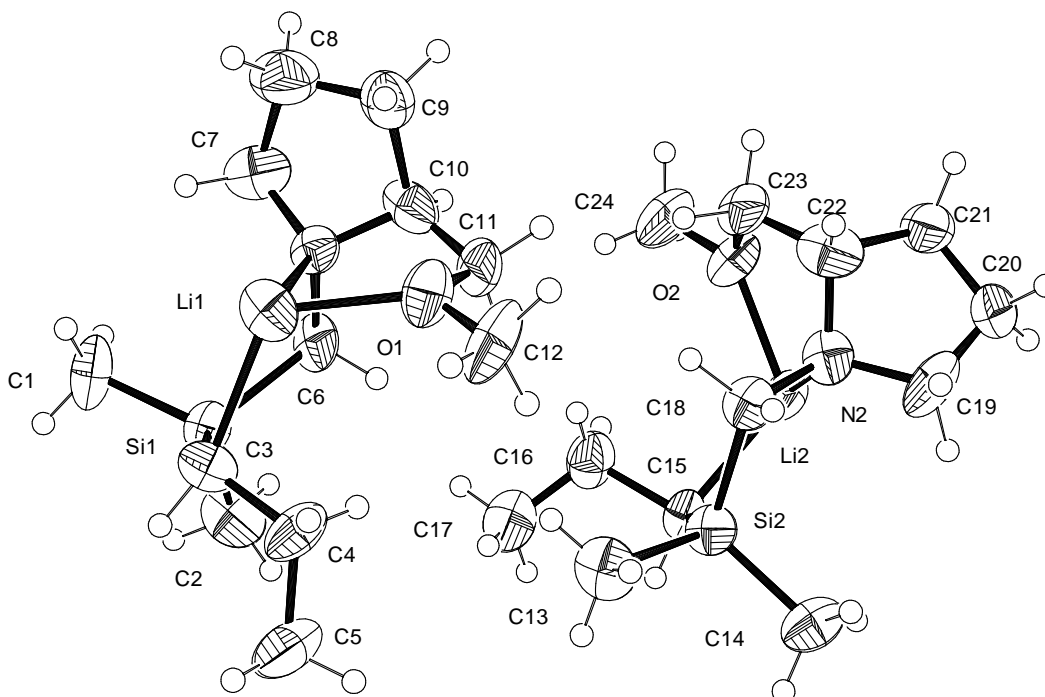


Abb. 8.6 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung [(R,S)-124]₂ im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.11 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von [(R,S)-124]₂.

Atom	x	y	z	U(eq)
C(1)	10972(14)	-1665(13)	8980(6)	68(3)
C(2)	11230(12)	128(18)	7688(5)	74(3)
C(3)	10999(9)	1734(11)	9222(5)	46(2)
C(4)	10926(13)	3305(11)	8933(6)	58(2)
C(5)	12256(16)	3927(15)	8686(8)	82(4)
C(6)	8467(9)	426(13)	8144(4)	52(2)
C(7)	7130(13)	-1158(14)	8859(5)	63(3)
C(8)	5918(13)	-976(18)	9262(7)	82(4)
C(9)	5302(10)	615(13)	9046(6)	61(3)
C(10)	6153(8)	1120(16)	8466(4)	61(3)
C(11)	6324(11)	2837(14)	8462(5)	61(3)
C(12)	7308(18)	4893(12)	9206(7)	83(4)
C(13)	8438(11)	6063(15)	7304(5)	62(2)
C(14)	7052(13)	8177(13)	6081(6)	62(3)
C(15)	6723(9)	4791(9)	5744(4)	41(2)
C(16)	6945(12)	3089(13)	6026(6)	61(2)

C(17)	8479(15)	2565(17)	6156(9)	90(4)
C(18)	5207(9)	6082(12)	6867(4)	49(2)
C(19)	3251(13)	7726(9)	6138(5)	61(3)
C(20)	1709(11)	7592(14)	5806(8)	72(3)
C(21)	1238(10)	5964(14)	5944(6)	63(3)
C(22)	2579(10)	5437(16)	6547(5)	64(3)
C(23)	2752(11)	3748(13)	6598(5)	60(3)
C(24)	3154(18)	1626(15)	5922(10)	98(5)
Li(1)	8816(16)	1730(20)	9562(7)	53(4)
Li(2)	4243(17)	4829(18)	5450(8)	51(3)
N(1)	7524(7)	365(9)	8695(3)	44(2)
N(2)	3795(8)	6156(10)	6316(4)	50(2)
O(1)	7254(8)	3327(9)	9128(4)	61(2)
O(2)	3133(8)	3209(8)	5922(4)	63(2)
Si(1)	10505(2)	183(3)	8553(1)	44(1)
Si(2)	6884(2)	6214(3)	6449(1)	47(1)

Tab. 8.12 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von [(R,S)-124]₂.

Atom	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
C(1)	92(8)	49(6)	49(5)	4(5)	-11(5)	21(5)
C(2)	71(6)	108(10)	45(5)	-17(6)	17(4)	1(7)
C(3)	44(4)	48(5)	46(4)	-20(4)	9(3)	-9(3)
C(4)	94(7)	32(5)	56(5)	0(4)	32(5)	-2(5)
C(5)	105(9)	62(7)	88(9)	22(6)	41(8)	-9(6)
C(6)	58(4)	70(6)	21(3)	3(4)	-4(3)	7(4)
C(7)	73(6)	72(7)	43(5)	-16(5)	12(5)	-25(5)
C(8)	70(7)	114(11)	65(7)	9(7)	24(6)	-11(7)
C(9)	51(5)	74(7)	54(5)	3(5)	3(4)	1(4)
C(10)	39(4)	112(9)	30(4)	5(5)	3(3)	4(5)
C(11)	58(5)	84(7)	41(5)	29(5)	8(4)	16(5)
C(12)	139(11)	38(6)	73(7)	17(5)	24(7)	20(6)
C(13)	66(5)	80(7)	32(4)	-13(5)	-3(4)	-8(5)
C(14)	85(7)	48(6)	57(5)	-4(4)	27(5)	-11(5)
C(15)	54(4)	31(4)	33(4)	-3(3)	0(3)	0(3)
C(16)	68(6)	43(6)	65(6)	-3(4)	-1(5)	-1(4)
C(17)	85(8)	75(9)	104(11)	25(8)	10(8)	4(7)
C(18)	57(4)	67(6)	21(3)	4(4)	6(3)	0(4)
C(19)	117(9)	13(4)	58(5)	-12(4)	30(6)	0(4)
C(20)	60(6)	61(7)	103(9)	24(6)	36(6)	23(5)
C(21)	51(5)	83(8)	53(5)	22(5)	8(4)	-1(5)
C(22)	61(5)	106(9)	24(4)	-2(5)	8(4)	-10(5)
C(23)	61(5)	77(7)	36(4)	24(4)	0(4)	-5(5)
C(24)	110(10)	54(8)	128(12)	34(8)	27(9)	-10(7)
Li(1)	53(8)	70(10)	31(6)	-17(6)	-1(6)	-3(7)
Li(2)	65(8)	47(9)	43(7)	11(6)	15(6)	4(6)
N(1)	49(3)	48(4)	33(3)	0(3)	7(3)	-3(3)
N(2)	58(4)	60(5)	32(3)	-3(3)	9(3)	6(4)
O(1)	77(4)	62(4)	41(3)	8(3)	4(3)	9(4)
O(2)	85(5)	43(4)	62(4)	10(3)	16(4)	-8(3)
Si(1)	56(1)	49(1)	27(1)	-3(1)	7(1)	2(1)
Si(2)	50(1)	59(2)	27(1)	1(1)	2(1)	-5(1)

8.2.2.2 Kristallstruktur von [(R,S)-125]₂

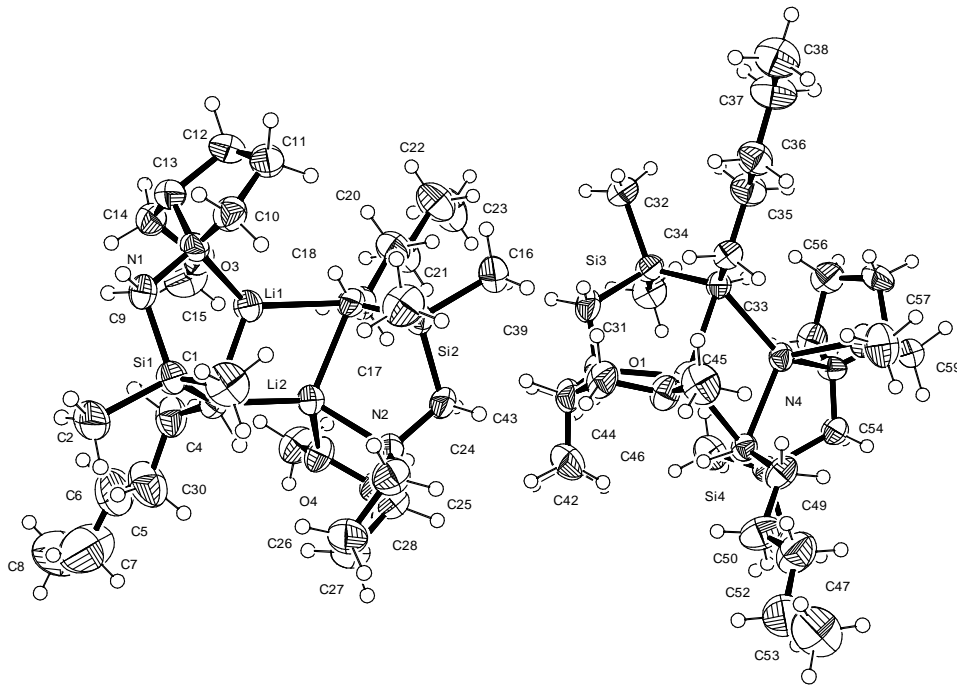


Abb. 8.7 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung [(R,S)-125]₂ im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.13 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von [(R,S)-125]₂.

Atom	x	y	z	U(eq)
C(1)	9280(5)	7845(5)	4349(1)	68(1)
C(2)	10859(4)	5731(6)	4787(1)	69(1)
C(3)	9278(4)	4737(5)	4083(1)	43(1)
C(4)	9728(4)	3180(5)	4142(1)	61(1)
C(5)	11153(5)	2907(6)	4094(2)	85(2)
C(6)	11445(6)	1238(8)	4111(2)	118(3)
C(7)	12731(8)	897(9)	4108(2)	152(3)
C(8)	12959(6)	-698(6)	4109(2)	115(2)
C(9)	8088(3)	5337(5)	4763(1)	50(1)
C(10)	6114(4)	6674(5)	4590(1)	53(1)
C(11)	4724(4)	6287(5)	4474(1)	58(1)
C(12)	4577(4)	4724(6)	4575(1)	61(1)
C(13)	5905(4)	4282(5)	4742(1)	49(1)
C(14)	6253(4)	2726(5)	4659(1)	53(1)
C(15)	6681(5)	1160(5)	4198(1)	75(2)
C(16)	4511(4)	7008(5)	3033(1)	64(1)
C(17)	6261(5)	8149(5)	3603(1)	69(1)
C(18)	6094(4)	4855(5)	3552(1)	45(1)
C(19)	5713(4)	3485(5)	3342(1)	50(1)
C(20)	4284(4)	3235(5)	3262(1)	58(1)
C(21)	3977(4)	1892(5)	3041(1)	61(1)
C(22)	2551(4)	1687(6)	2947(1)	78(2)
C(23)	2233(5)	427(6)	2711(1)	85(2)
C(24)	7281(3)	6520(5)	2981(1)	47(1)
C(25)	9282(4)	7573(5)	3233(1)	62(1)
C(26)	10690(4)	7099(6)	3292(1)	75(2)
C(27)	10788(4)	5729(6)	3085(1)	69(1)
C(28)	9445(4)	5446(5)	2911(1)	53(1)
C(29)	9074(4)	3859(5)	2876(1)	54(1)
C(30)	8800(5)	1773(5)	3212(1)	64(1)
C(31)	1912(4)	2335(5)	1431(1)	61(1)
C(32)	594(4)	3622(5)	2024(1)	58(1)

C(33)	1813(3)	5662(4)	1451(1)	39(1)
C(34)	1503(4)	7024(5)	1656(1)	48(1)
C(35)	99(4)	7288(5)	1718(1)	58(1)
C(36)	-150(4)	8617(5)	1938(1)	57(1)
C(37)	-1517(4)	8870(6)	2011(1)	72(1)
C(38)	-1740(5)	10148(6)	2245(1)	78(2)
C(39)	3357(4)	4075(5)	2026(1)	52(1)
C(40)	5189(4)	2984(5)	1759(1)	64(1)
C(41)	6553(4)	3448(6)	1676(1)	77(2)
C(42)	6758(4)	4865(6)	1882(1)	73(2)
C(43)	5542(4)	5128(5)	2070(1)	53(1)
C(44)	5197(4)	6686(6)	2103(1)	59(1)
C(45)	4671(5)	8804(5)	1778(1)	70(1)
C(46)	4518(4)	2676(5)	659(1)	64(1)
C(47)	5909(4)	4752(6)	209(1)	66(1)
C(48)	4699(3)	5809(4)	910(1)	39(1)
C(49)	5108(4)	7368(5)	843(1)	52(1)
C(50)	6542(4)	7650(6)	877(1)	74(2)
C(51)	6851(5)	9273(6)	860(1)	85(2)
C(52)	8207(5)	9622(7)	854(2)	94(2)
C(53)	8441(6)	11220(6)	870(2)	108(2)
C(54)	3152(3)	5171(5)	237(1)	47(1)
C(55)	1252(4)	3868(5)	420(1)	55(1)
C(56)	-79(4)	4273(5)	534(1)	59(1)
C(57)	-242(4)	5850(5)	430(1)	60(1)
C(58)	996(3)	6271(4)	271(1)	44(1)
C(59)	1407(4)	7830(5)	344(1)	48(1)
C(60)	2049(5)	9380(5)	809(1)	70(1)
Li(1)	7142(6)	4458(7)	4083(2)	44(2)
Li(2)	8278(6)	4802(8)	3555(2)	43(2)
Li(3)	3970(6)	5731(7)	1441(2)	41(2)
Li(4)	2560(6)	6037(7)	919(2)	39(2)
N(1)	6780(3)	5294(4)	4582(1)	41(1)
N(2)	8595(3)	6244(4)	3148(1)	44(1)
N(3)	4545(3)	4329(3)	1849(1)	45(1)
N(4)	1953(3)	5230(4)	422(1)	39(1)
O(3)	6448(3)	2616(3)	4296(1)	48(1)
O(4)	8964(3)	3301(3)	3222(1)	51(1)
O(1)	4884(3)	7271(3)	1762(1)	51(1)
O(2)	1772(2)	7930(3)	710(1)	47(1)
Si(1)	9394(1)	5883(1)	4472(1)	46(1)
Si(2)	6005(1)	6548(1)	3312(1)	46(1)
Si(3)	1874(1)	3992(1)	1711(1)	44(1)
Si(4)	4608(1)	4633(1)	526(1)	44(1)

Tab. 8.14 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von [(R,S)-125]₂.

Atom	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
C(1)	74(3)	47(3)	81(3)	-10(3)	-2(3)	-12(2)
C(2)	55(3)	103(4)	47(3)	-17(3)	-11(2)	-5(3)
C(3)	47(2)	48(3)	33(2)	-1(2)	3(2)	1(2)
C(4)	77(3)	62(3)	44(3)	-7(2)	-8(2)	10(3)
C(5)	86(4)	83(4)	85(4)	-12(3)	-10(3)	37(3)
C(6)	110(5)	130(7)	114(5)	45(5)	7(4)	55(5)
C(7)	162(8)	127(7)	173(8)	57(6)	73(6)	65(6)
C(8)	109(5)	64(4)	176(7)	7(4)	29(5)	24(3)
C(9)	51(2)	69(3)	30(2)	-3(2)	-6(2)	1(2)
C(10)	60(3)	54(3)	45(3)	-1(2)	8(2)	7(2)
C(11)	58(3)	71(4)	46(3)	-5(2)	8(2)	21(2)
C(12)	37(2)	82(4)	65(3)	4(3)	8(2)	3(2)
C(13)	41(2)	55(3)	51(3)	9(2)	6(2)	2(2)
C(14)	49(2)	57(3)	51(3)	12(2)	2(2)	-3(2)
C(15)	94(4)	43(3)	90(4)	-2(3)	19(3)	-8(3)
C(16)	61(3)	78(4)	51(3)	12(3)	-2(2)	15(3)
C(17)	87(3)	59(3)	60(3)	-15(3)	9(3)	-1(3)
C(18)	42(2)	63(3)	29(2)	-1(2)	2(2)	0(2)
C(19)	51(2)	54(3)	43(2)	5(2)	-5(2)	-3(2)
C(20)	47(2)	63(3)	62(3)	-5(2)	-5(2)	-3(2)
C(21)	57(3)	48(3)	76(3)	-1(3)	-12(2)	-4(2)
C(22)	60(3)	76(4)	96(4)	-10(3)	-13(3)	-3(3)
C(23)	79(3)	61(4)	109(4)	-5(3)	-30(3)	-10(3)

C(24)	47(2)	64(3)	30(2)	9(2)	0(2)	-4(2)
C(25)	67(3)	52(3)	67(3)	4(3)	7(3)	-6(2)
C(26)	48(3)	90(4)	87(4)	18(3)	-2(3)	-21(3)
C(27)	51(3)	87(4)	71(3)	3(3)	14(2)	0(3)
C(28)	51(2)	67(3)	40(2)	8(2)	12(2)	1(2)
C(29)	57(3)	70(3)	36(2)	-7(2)	10(2)	5(2)
C(30)	83(3)	55(3)	55(3)	-7(3)	12(2)	-1(3)
C(31)	66(3)	54(3)	62(3)	-9(2)	2(2)	-7(2)
C(32)	58(3)	66(3)	53(3)	11(2)	16(2)	2(2)
C(33)	37(2)	53(3)	27(2)	0(2)	-4(2)	0(2)
C(34)	48(2)	52(3)	45(2)	5(2)	8(2)	1(2)
C(35)	55(3)	52(3)	68(3)	-5(2)	7(2)	2(2)
C(36)	55(3)	49(3)	69(3)	-3(2)	3(2)	3(2)
C(37)	58(3)	74(4)	86(4)	-28(3)	12(2)	-6(3)
C(38)	77(3)	72(4)	86(4)	-22(3)	6(3)	3(3)
C(39)	57(3)	67(3)	32(2)	7(2)	-5(2)	-2(2)
C(40)	62(3)	62(3)	66(3)	12(3)	-10(2)	13(2)
C(41)	54(3)	89(4)	87(4)	25(3)	-1(3)	22(3)
C(42)	50(3)	91(4)	76(4)	5(3)	-15(2)	-3(3)
C(43)	51(2)	68(3)	38(2)	11(2)	-12(2)	-6(2)
C(44)	64(3)	78(4)	33(2)	-3(2)	-11(2)	-18(3)
C(45)	74(3)	67(4)	68(3)	-13(3)	-7(3)	-2(3)
C(46)	66(3)	52(3)	72(3)	-8(3)	0(2)	10(2)
C(47)	54(3)	100(4)	45(3)	-13(3)	8(2)	0(3)
C(48)	41(2)	43(2)	32(2)	-2(2)	0(2)	-2(2)
C(49)	67(3)	55(3)	35(2)	-4(2)	7(2)	-8(2)
C(50)	72(3)	71(4)	80(4)	-6(3)	19(3)	-25(3)
C(51)	91(4)	92(5)	71(4)	11(3)	2(3)	-28(3)
C(52)	78(4)	92(5)	109(5)	21(4)	-4(3)	-20(3)
C(53)	96(4)	55(4)	170(6)	1(4)	-11(4)	-21(3)
C(54)	49(2)	63(3)	29(2)	-1(2)	4(2)	4(2)
C(55)	63(3)	57(3)	43(3)	-9(2)	-8(2)	-8(2)
C(56)	50(2)	73(4)	55(3)	-4(3)	-5(2)	-20(2)
C(57)	32(2)	74(3)	75(3)	7(3)	-1(2)	1(2)
C(58)	42(2)	57(3)	33(2)	5(2)	-9(2)	4(2)
C(59)	42(2)	55(3)	45(3)	8(2)	1(2)	5(2)
C(60)	92(4)	39(3)	77(3)	-3(3)	-9(3)	8(2)
Li(1)	44(3)	46(4)	40(4)	-3(3)	-3(3)	-2(3)
Li(2)	41(3)	51(4)	35(3)	2(3)	-2(3)	1(3)
Li(3)	50(4)	40(4)	32(3)	-6(3)	-1(3)	-4(3)
Li(4)	44(3)	43(4)	31(3)	0(3)	-2(3)	4(3)
N(1)	33(2)	53(2)	35(2)	-6(2)	-3(1)	2(2)
N(2)	39(2)	50(2)	43(2)	12(2)	-3(2)	-5(2)
N(3)	42(2)	49(2)	42(2)	11(2)	-4(2)	2(2)
N(4)	32(2)	49(2)	35(2)	-11(2)	2(1)	-6(2)
O(3)	61(2)	44(2)	40(2)	1(1)	6(1)	2(1)
O(4)	70(2)	51(2)	32(2)	-4(1)	4(1)	-1(2)
O(1)	61(2)	54(2)	37(2)	-3(1)	-4(1)	-6(1)
O(2)	58(2)	42(2)	39(2)	1(1)	-4(1)	1(1)
Si(1)	43(1)	54(1)	39(1)	-7(1)	-6(1)	-7(1)
Si(2)	48(1)	53(1)	36(1)	0(1)	-3(1)	7(1)
Si(3)	44(1)	50(1)	38(1)	1(1)	5(1)	-5(1)
Si(4)	42(1)	52(1)	37(1)	-7(1)	4(1)	6(1)

8.2.2.3 Kristallstruktur von [(R,S)-126]₂

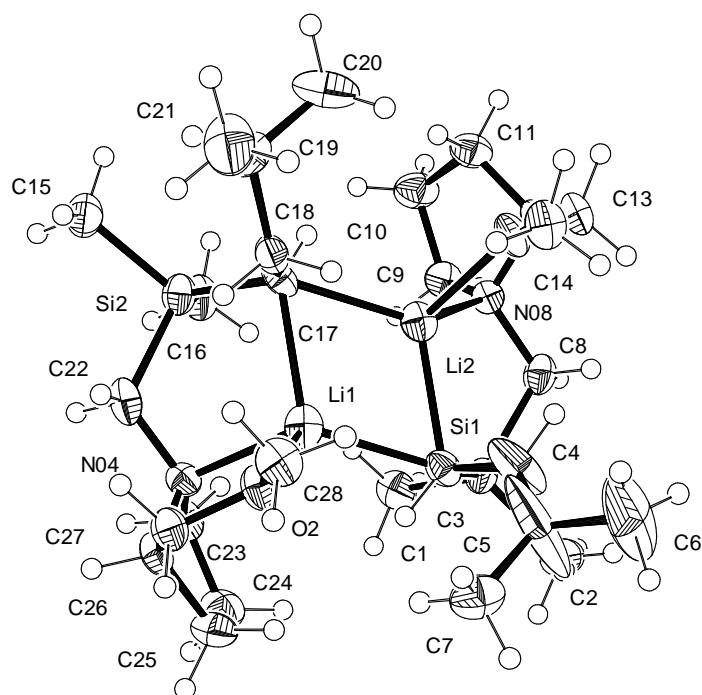


Abb. 8.8 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung [(R,S)-126]₂ im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.15 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{Å}^2 \cdot 10^3$) von [(R,S)-126]₂.

Atom	x	y	z	U(eq)
C(1)	9937(2)	7645(2)	9285(1)	40(1)
C(2)	11069(2)	7231(2)	8023(1)	48(1)
C(3)	10140(3)	9092(2)	8348(1)	30(1)
C(4)	10309(3)	9391(2)	7662(1)	74(1)
C(5)	11375(4)	9659(4)	7374(2)	166(3)
C(6)	11295(3)	9813(3)	6662(1)	125(2)
C(7)	12498(3)	10164(2)	7642(1)	49(1)
C(8)	8142(2)	7711(2)	8092(1)	35(1)
C(9)	6385(2)	7728(2)	8926(1)	35(1)
C(10)	4994(2)	8136(2)	9037(1)	43(1)
C(11)	4646(2)	8567(2)	8419(1)	39(1)
C(12)	5758(2)	8272(2)	7963(1)	31(1)
C(13)	6064(3)	8868(2)	7436(1)	36(1)
C(14)	6907(2)	10209(2)	7217(1)	39(1)
C(15)	6498(2)	11104(2)	10555(1)	42(1)
C(16)	7104(2)	9278(2)	10388(1)	43(1)
C(17)	7440(3)	10364(2)	9224(1)	31(1)
C(18)	7494(2)	11226(2)	8919(1)	33(1)
C(19)	6190(3)	11765(2)	8902(1)	42(1)
C(20)	5074(3)	11384(2)	8498(1)	67(1)
C(21)	6530(3)	12630(2)	8669(1)	64(1)
C(22)	9357(2)	10644(2)	10323(1)	36(1)
C(23)	10874(3)	9428(2)	10336(1)	39(1)
C(24)	12295(2)	9203(2)	10066(1)	47(1)
C(25)	12831(2)	9996(2)	9762(1)	42(1)
C(26)	11805(3)	10660(2)	9971(1)	33(1)
C(27)	11677(2)	11386(2)	9530(1)	34(1)
C(28)	10911(2)	11787(2)	8526(1)	41(1)
Li(1)	9721(4)	10092(3)	9080(2)	35(1)
Li(2)	7847(4)	9363(3)	8488(2)	31(1)
N(04)	10495(2)	10189(1)	10007(1)	28(1)
N(08)	6974(2)	8169(1)	8380(1)	27(1)

O(1)	6698(2)	9596(1)	7685(1)	33(1)
O(2)	11023(2)	11122(1)	8965(1)	34(1)
Si(1)	9891(1)	7981(1)	8444(1)	32(1)
Si(2)	7540(1)	10331(1)	10077(1)	33(1)

Tab. 8.16 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von $[(R,S)\text{-126}]_2$.

Atom	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
C(1)	44(2)	26(2)	50(2)	0(2)	-5(2)	1(2)
C(2)	37(2)	37(2)	71(2)	-16(2)	-1(2)	-4(2)
C(3)	33(2)	33(2)	23(2)	5(2)	-4(2)	-7(2)
C(4)	58(2)	126(4)	38(2)	16(2)	-8(2)	-54(2)
C(5)	139(4)	323(8)	36(2)	22(4)	-14(2)	-193(5)
C(6)	127(3)	224(6)	26(2)	8(3)	11(2)	-111(4)
C(7)	39(2)	55(3)	53(2)	20(2)	10(2)	-2(2)
C(8)	43(2)	26(2)	37(2)	-8(2)	3(1)	2(2)
C(9)	34(2)	39(2)	31(2)	9(2)	2(2)	-5(2)
C(10)	31(2)	51(3)	46(2)	9(2)	5(2)	-1(2)
C(11)	27(2)	44(2)	45(2)	5(2)	-2(2)	-6(2)
C(12)	33(2)	29(2)	30(2)	-2(2)	-10(1)	-6(2)
C(13)	41(2)	38(2)	30(2)	-3(2)	-10(1)	-5(2)
C(14)	54(2)	32(2)	32(2)	9(2)	2(1)	-8(2)
C(15)	48(2)	40(2)	37(2)	-7(2)	1(2)	2(2)
C(16)	53(2)	38(2)	38(2)	-2(2)	-1(1)	-6(2)
C(17)	27(2)	35(2)	30(2)	1(2)	-8(2)	-9(2)
C(18)	36(2)	36(2)	28(2)	-5(2)	-7(2)	2(2)
C(19)	51(2)	42(3)	32(2)	8(2)	7(2)	16(2)
C(20)	38(2)	71(3)	90(2)	20(3)	-14(2)	8(2)
C(21)	96(3)	36(2)	60(2)	2(2)	-18(2)	20(2)
C(22)	52(2)	32(2)	25(2)	2(2)	-6(1)	-9(2)
C(23)	47(2)	33(2)	38(2)	0(2)	-10(2)	-3(2)
C(24)	42(2)	44(2)	54(2)	2(2)	-14(2)	9(2)
C(25)	30(2)	43(2)	54(2)	3(2)	-11(2)	2(2)
C(26)	40(2)	28(2)	31(2)	-2(2)	-9(2)	-7(2)
C(27)	37(2)	29(2)	37(2)	-5(2)	-3(2)	-5(2)
C(28)	50(2)	37(2)	38(2)	7(2)	-3(2)	-1(2)
Li(1)	46(3)	24(3)	33(3)	8(3)	-1(2)	0(2)
Li(2)	40(3)	26(3)	26(2)	10(3)	-5(2)	1(2)
N(04)	32(1)	21(2)	31(1)	1(1)	-5(1)	3(1)
N(08)	29(1)	24(2)	27(1)	1(1)	-1(1)	-1(1)
O(1)	40(1)	33(2)	25(1)	6(1)	-7(1)	-11(1)
O(2)	45(1)	30(2)	26(1)	4(1)	-7(1)	-3(1)
Si(1)	34(1)	30(1)	33(1)	-7(1)	1(1)	1(1)
Si(2)	42(1)	27(1)	30(1)	-1(1)	1(1)	-2(1)

8.2.2.4 Kristallstruktur von [(R,S)-127]₂.

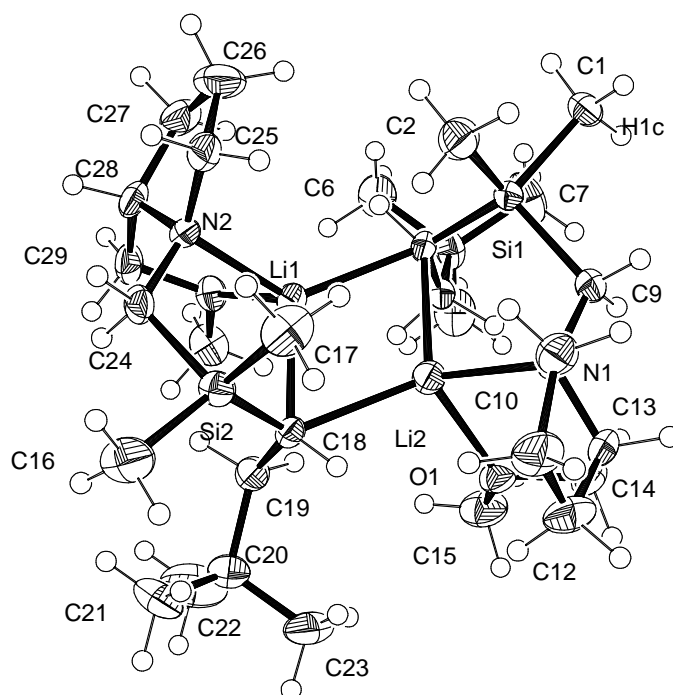


Abb. 8.9 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung [(R,S)-127]₂ im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.17 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von [(R,S)-127]₂.

Atom	x	y	z	U(eq)
C(1)	1624(3)	4461(1)	9889(2)	39(1)
C(2)	-519(2)	3781(1)	7394(2)	42(1)
C(3)	2712(2)	3487(1)	7880(2)	24(1)
C(4)	4406(2)	3365(1)	8661(2)	27(1)
C(5)	5553(3)	3990(1)	9146(2)	35(1)
C(6)	5375(3)	4491(1)	7960(2)	45(1)
C(7)	5345(3)	4419(1)	10269(3)	53(1)
C(8)	7121(2)	3671(1)	9704(2)	51(1)
C(9)	1574(2)	2890(1)	9891(2)	29(1)
C(10)	-346(2)	1988(1)	8747(2)	39(1)
C(11)	-374(3)	1186(1)	8455(3)	50(1)
C(12)	1177(3)	916(1)	9396(3)	50(1)
C(13)	2007(3)	1581(1)	10172(2)	36(1)
C(14)	3682(3)	1578(1)	10551(2)	40(1)
C(15)	5500(3)	1584(1)	9612(2)	48(1)
C(16)	-840(3)	1137(1)	2883(2)	54(1)
C(17)	-1563(2)	2023(1)	4795(2)	49(1)
C(18)	1787(2)	1736(1)	5727(2)	23(1)
C(19)	3280(2)	1613(1)	5573(2)	31(1)
C(20)	3818(2)	850(1)	5393(2)	35(1)
C(21)	2699(3)	490(1)	4133(3)	54(1)
C(22)	5308(3)	922(1)	5235(3)	72(1)
C(23)	4032(3)	382(1)	6618(3)	59(1)
C(24)	283(2)	2599(1)	3201(2)	31(1)
C(25)	-538(2)	3734(1)	3863(2)	37(1)
C(26)	89(3)	4483(1)	4204(3)	58(1)
C(27)	1540(3)	4486(1)	3980(2)	45(1)
C(28)	1574(2)	3764(1)	3338(2)	33(1)
C(29)	3132(2)	3485(1)	3630(2)	35(1)
C(30)	5384(2)	3119(1)	5385(2)	40(1)
Li(1)	2268(4)	2967(2)	5839(3)	27(1)
Li(2)	2278(4)	2255(2)	7821(4)	28(1)

N(1)	1251(2)	2177(1)	9236(2)	26(1)
N(2)	756(2)	3295(1)	3919(2)	24(1)
O(1)	3934(2)	1648(1)	9332(1)	36(1)
O(2)	3857(1)	3323(1)	5042(1)	29(1)
Si(1)	1449(1)	3673(1)	8712(1)	26(1)
Si(2)	34(1)	1835(1)	4261(1)	28(1)

Tab. 8.18 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von [(*R,S*)-**127**]₂.

Atom	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
C(1)	59(2)	27(1)	41(2)	-1(1)	32(1)	5(1)
C(2)	41(2)	49(2)	42(2)	7(1)	22(1)	8(1)
C(3)	30(1)	23(1)	17(1)	2(1)	9(1)	1(1)
C(4)	36(2)	25(1)	21(1)	1(1)	15(1)	1(1)
C(5)	38(2)	40(1)	26(1)	-8(1)	13(1)	-8(1)
C(6)	57(2)	37(1)	42(2)	-7(1)	20(1)	-20(1)
C(7)	55(2)	61(2)	49(2)	-29(1)	25(2)	-25(1)
C(8)	37(2)	63(2)	47(2)	-6(2)	12(1)	-14(2)
C(9)	38(2)	25(1)	24(1)	-2(1)	14(1)	-1(1)
C(10)	43(2)	35(2)	42(2)	3(1)	21(1)	-3(1)
C(11)	60(2)	32(2)	59(2)	1(1)	24(2)	-15(1)
C(12)	59(2)	27(1)	64(2)	11(1)	26(2)	-2(1)
C(13)	57(2)	30(1)	26(1)	7(1)	20(1)	2(1)
C(14)	55(2)	33(1)	24(1)	7(1)	7(1)	5(1)
C(15)	37(2)	43(2)	50(2)	4(1)	3(1)	10(1)
C(16)	49(2)	39(2)	50(2)	-8(1)	-5(1)	-7(1)
C(17)	32(2)	59(2)	59(2)	11(1)	20(1)	1(1)
C(18)	26(1)	23(1)	21(1)	4(1)	9(1)	-1(1)
C(19)	34(1)	27(1)	28(1)	-1(1)	9(1)	-4(1)
C(20)	32(2)	30(1)	44(2)	-1(1)	15(1)	4(1)
C(21)	62(2)	41(2)	62(2)	-19(1)	28(2)	5(1)
C(22)	44(2)	58(2)	125(3)	-5(2)	44(2)	10(1)
C(23)	79(2)	32(2)	59(2)	8(1)	19(2)	19(1)
C(24)	30(2)	39(1)	19(1)	-3(1)	5(1)	2(1)
C(25)	38(1)	44(1)	25(1)	3(1)	8(1)	9(1)
C(26)	80(2)	30(1)	74(2)	9(2)	42(2)	14(1)
C(27)	63(2)	28(1)	41(2)	8(1)	16(2)	1(1)
C(28)	42(2)	33(1)	22(1)	9(1)	12(1)	1(1)
C(29)	45(2)	40(2)	25(1)	1(1)	20(1)	-8(1)
C(30)	30(2)	48(2)	45(2)	-7(1)	18(1)	-6(1)
Li(1)	28(2)	28(2)	22(2)	1(2)	7(2)	3(2)
Li(2)	29(2)	28(2)	27(2)	1(2)	11(2)	-1(2)
N(1)	38(1)	20(1)	24(1)	4(1)	14(1)	-1(1)
N(2)	28(1)	23(1)	23(1)	4(1)	11(1)	4(1)
O(1)	34(1)	35(1)	31(1)	7(1)	5(1)	7(1)
O(2)	27(1)	34(1)	26(1)	-2(1)	12(1)	-2(1)
Si(1)	37(1)	21(1)	25(1)	1(1)	16(1)	2(1)
Si(2)	25(1)	28(1)	29(1)	-3(1)	7(1)	-2(1)

8.2.2.5 Kristallstruktur von [(R,S)-128]₂

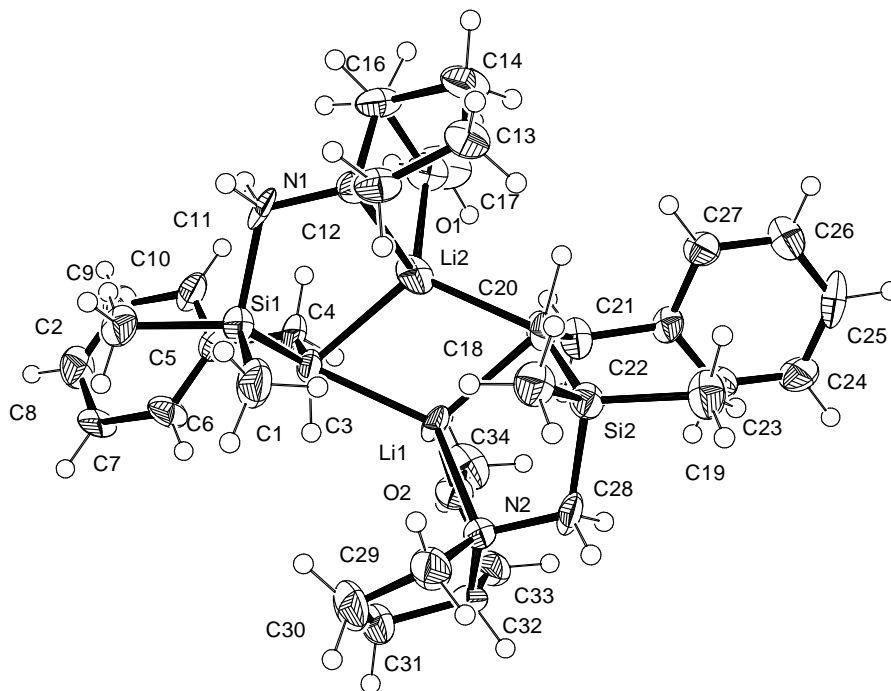


Abb. 8.10 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung [(R,S)-128]₂ im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.19 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{Å}^2 \cdot 10^3$) von [(R,S)-128]₂.

Atom	x	y	z	U(eq)
C(1)	5656(1)	3258(4)	1770(3)	42(1)
C(2)	5529(1)	6769(4)	1694(3)	36(1)
C(3)	6539(1)	5027(4)	3679(3)	45(1)
C(4)	6855(1)	6471(4)	4146(3)	46(1)
C(5)	7234(1)	6398(4)	5624(3)	41(1)
C(6)	7173(1)	7296(4)	6630(3)	40(1)
C(7)	7518(1)	7231(4)	7951(3)	46(1)
C(8)	7941(1)	6257(4)	8283(3)	48(1)
C(9)	8017(1)	5363(4)	7293(3)	49(1)
C(10)	7668(1)	5410(4)	5975(3)	52(1)
C(11)	6317(1)	5418(4)	635(3)	41(1)
C(12)	5802(1)	4108(4)	-1470(3)	44(1)
C(13)	5527(2)	4516(4)	-2969(3)	55(1)
C(14)	5778(2)	6022(4)	-3127(3)	52(1)
C(15)	6142(1)	6462(4)	-1699(3)	41(1)
C(16)	6148(1)	8143(4)	-1388(3)	42(1)
C(17)	5586(1)	10128(4)	-1171(3)	55(1)
C(18)	8189(2)	7178(5)	3229(4)	72(1)
C(19)	7815(2)	6987(6)	1817(4)	86(1)
C(20)	8913(2)	6106(5)	4938(4)	74(1)
C(21)	9316(2)	4886(6)	5245(4)	96(2)
Li(1)	5321(2)	6879(5)	-563(5)	31(1)
N(1)	5945(1)	5563(2)	-785(2)	33(1)
O(1)	5642(1)	8544(2)	-1377(2)	39(1)
O(2)	8573(1)	6040(3)	3573(2)	60(1)
Si(1)	5987(1)	5186(1)	1961(1)	37(1)

Tab. 8.20 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von $[(R,S)\text{-128}]_2$.

Atom	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
C(1)	42(2)	45(2)	37(2)	8(2)	10(2)	3(2)
C(2)	30(2)	41(2)	34(2)	-1(2)	9(2)	0(2)
C(3)	36(2)	46(2)	45(2)	5(2)	1(1)	2(2)
C(4)	37(2)	49(2)	47(2)	7(2)	7(2)	2(2)
C(5)	33(2)	41(2)	43(2)	5(2)	4(1)	-2(2)
C(6)	28(2)	45(2)	49(2)	1(2)	15(2)	4(1)
C(7)	34(2)	63(2)	38(2)	-4(2)	9(2)	-1(2)
C(8)	44(2)	54(2)	34(2)	-3(2)	-1(2)	-4(2)
C(9)	40(2)	45(2)	51(2)	-2(2)	1(2)	8(2)
C(10)	52(2)	50(2)	43(2)	-8(2)	3(2)	1(2)
C(11)	28(1)	33(2)	56(2)	10(2)	9(1)	4(1)
C(12)	47(2)	26(2)	68(2)	-1(2)	30(2)	0(1)
C(13)	72(3)	52(2)	51(2)	-16(2)	34(2)	-8(2)
C(14)	70(2)	50(2)	46(2)	-3(2)	32(2)	-4(2)
C(15)	40(2)	41(2)	54(2)	0(2)	30(2)	-1(2)
C(16)	40(2)	39(2)	49(2)	4(2)	20(2)	-7(2)
C(17)	71(2)	25(2)	65(2)	-4(2)	20(2)	-3(2)
C(18)	65(3)	95(3)	58(3)	-12(2)	24(2)	9(3)
C(19)	59(2)	134(4)	63(3)	-14(3)	18(2)	7(3)
C(20)	67(3)	103(4)	46(2)	-4(2)	12(2)	-15(3)
C(21)	68(3)	115(4)	81(3)	-13(3)	-2(2)	0(3)
Li(1)	22(2)	29(3)	38(3)	1(2)	5(2)	1(2)
N(1)	31(1)	28(2)	44(1)	3(1)	16(1)	1(1)
O(1)	42(1)	24(1)	50(1)	0(1)	16(1)	-4(1)
O(2)	51(1)	76(2)	51(2)	-20(1)	15(1)	2(1)
Si(1)	28(1)	41(1)	36(1)	2(1)	1(1)	4(1)

8.2.2.6 Kristallstruktur von $[(R,S)\text{-138}]_2$

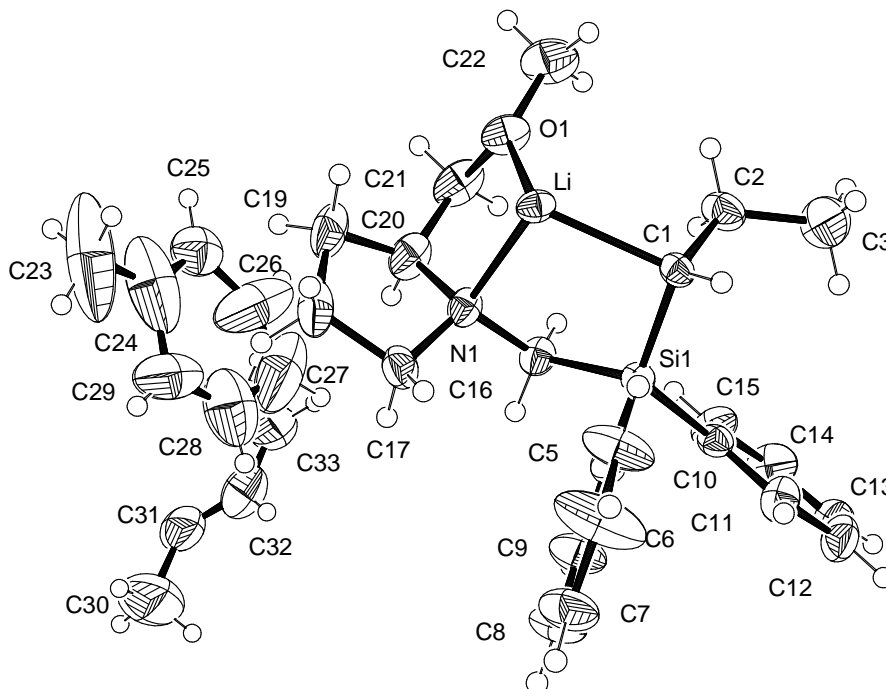


Abb. 8.11 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung $[(R,S)\text{-138}]_2$ im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.21 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von [(R,S)-**138**]₂.

Atom	x	y	z	U(eq)
C(1)	767(1)	7838(2)	6014(2)	26(1)
C(2)	993(2)	9159(3)	6236(2)	41(1)
C(3)	1147(2)	9469(4)	7346(3)	73(1)
C(4)	1210(1)	5190(2)	5954(2)	28(1)
C(5)	586(2)	4866(3)	6119(3)	59(1)
C(6)	416(2)	3665(4)	6233(5)	88(2)
C(7)	871(2)	2780(3)	6158(3)	53(1)
C(8)	1488(2)	3069(3)	5979(3)	50(1)
C(9)	1655(2)	4269(3)	5883(3)	48(1)
C(10)	2264(1)	6968(3)	6816(2)	29(1)
C(11)	2337(2)	6357(3)	7728(2)	41(1)
C(12)	2894(2)	6505(3)	8465(2)	48(1)
C(13)	3401(2)	7262(3)	8312(2)	45(1)
C(14)	3357(2)	7865(3)	7405(3)	53(1)
C(15)	2794(1)	7720(3)	6674(2)	45(1)
C(16)	1730(1)	7148(3)	4625(2)	33(1)
C(17)	1074(2)	5860(3)	3367(2)	40(1)
C(18)	634(2)	6017(4)	2344(2)	54(1)
C(19)	707(2)	7335(4)	2088(2)	56(1)
C(20)	1266(2)	7812(3)	2889(2)	45(1)
C(21)	1255(2)	9142(3)	3095(3)	50(1)
C(22)	647(2)	10673(3)	3769(3)	61(1)
C(23)	1036(4)	6533(10)	-669(5)	189(5)
C(24)	1534(3)	6820(8)	-72(5)	130(3)
C(25)	1860(2)	7867(4)	95(3)	68(1)
C(26)	2410(4)	7750(9)	819(5)	162(4)
C(27)	2722(3)	7052(12)	1366(4)	158(4)
C(28)	2327(3)	5921(7)	1128(5)	103(2)
C(29)	1786(3)	5676(6)	489(4)	98(2)
C(30)	5000	4835(8)	0	141(4)
C(31)	5000	6161(6)	0	79(2)
C(32)	4725(2)	6801(6)	714(3)	82(1)
C(33)	4720(2)	8029(5)	727(4)	79(1)
C(34)	5000	8628(7)	0	74(2)
Li	382(2)	7953(4)	4353(3)	28(1)
N(1)	1170(1)	7078(2)	3773(2)	31(1)
O(1)	706(1)	9402(2)	3597(2)	42(1)
Si(1)	1456(1)	6829(1)	5879(1)	25(1)

Tab. 8.22 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von [(R,S)-**138**]₂.

Atom	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
C(1)	26(1)	24(1)	30(1)	-4(1)	4(1)	-1(1)
C(2)	39(2)	30(2)	51(2)	-9(1)	2(1)	0(1)
C(3)	103(3)	42(2)	63(2)	-17(2)	-19(2)	-1(2)
C(4)	26(1)	31(2)	27(1)	-2(1)	2(1)	4(1)
C(5)	32(2)	32(2)	117(3)	-7(2)	24(2)	-2(1)
C(6)	54(2)	37(2)	184(5)	-7(3)	57(3)	-9(2)
C(7)	53(2)	24(2)	78(2)	-2(2)	3(2)	-2(2)
C(8)	39(2)	31(2)	77(2)	-4(2)	6(2)	11(1)
C(9)	29(2)	37(2)	79(2)	-3(2)	14(2)	5(1)
C(10)	24(1)	28(2)	34(1)	-4(1)	2(1)	2(1)
C(11)	30(2)	57(2)	35(2)	-1(1)	4(1)	-2(1)
C(12)	43(2)	66(2)	33(2)	-4(1)	-3(1)	5(2)
C(13)	35(2)	49(2)	45(2)	-13(2)	-12(1)	2(1)
C(14)	39(2)	45(2)	69(2)	0(2)	-9(2)	-14(2)
C(15)	37(2)	43(2)	49(2)	9(2)	-6(1)	-9(1)
C(16)	23(1)	44(2)	31(1)	0(1)	4(1)	0(1)
C(17)	37(2)	47(2)	35(2)	-10(1)	9(1)	5(1)
C(18)	54(2)	74(3)	32(2)	-13(2)	6(2)	-6(2)
C(19)	54(2)	90(3)	24(2)	1(2)	10(1)	1(2)
C(20)	39(2)	68(2)	33(2)	13(2)	16(1)	1(2)
C(21)	42(2)	64(2)	47(2)	27(2)	14(2)	-8(2)
C(22)	67(2)	36(2)	79(3)	15(2)	7(2)	-6(2)
C(23)	138(6)	325(13)	124(5)	-136(7)	81(5)	-133(8)
C(24)	83(4)	187(7)	136(5)	-94(6)	66(4)	-66(5)

C(25)	65(2)	72(3)	71(3)	2(2)	25(2)	5(2)
C(26)	155(6)	269(10)	82(4)	83(5)	79(4)	151(7)
C(27)	80(4)	328(13)	62(3)	-33(6)	2(3)	80(7)
C(28)	85(4)	137(5)	98(4)	-39(4)	45(4)	-27(4)
C(29)	119(5)	111(4)	81(3)	42(3)	64(4)	63(4)
C(30)	186(10)	62(5)	164(9)	0	-8(8)	0
C(31)	78(4)	73(5)	74(4)	0	-22(4)	0
C(32)	69(3)	103(4)	67(3)	4(3)	-10(2)	-8(3)
C(33)	63(3)	85(4)	81(3)	-2(3)	-6(2)	12(2)
C(34)	55(3)	88(5)	77(4)	0	-1(3)	0
Li	27(2)	27(2)	31(2)	8(2)	7(2)	2(2)
N(1)	26(1)	43(2)	26(1)	2(1)	6(1)	-1(1)
O(1)	40(1)	37(1)	50(1)	14(1)	9(1)	-4(1)
Si(1)	20(1)	26(1)	28(1)	-1(1)	2(1)	0(1)

8.2.2.7 Kristallstruktur von $[(S,S_{Si})\text{-140}]_2$

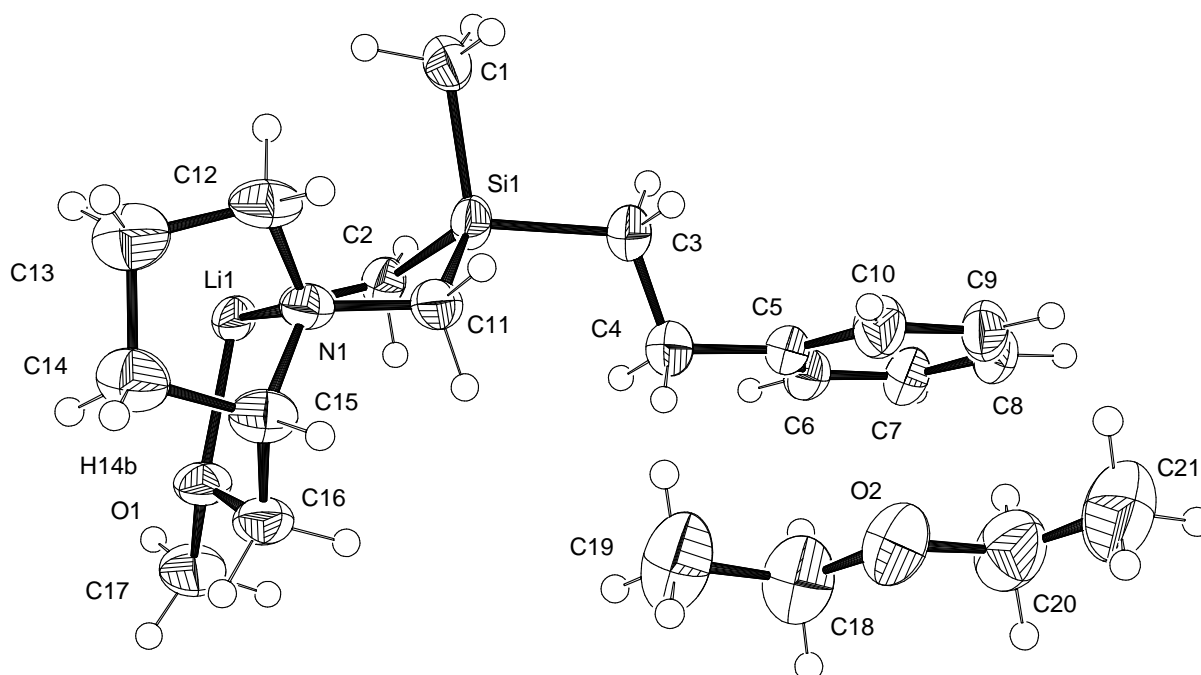


Abb. 8.12 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung $[(S,S_{Si})\text{-140}]_2$ im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.23 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von $[(S,S_{Si})\text{-140}]_2$.

Atom	x	y	z	U(eq)
C(1)	5656(1)	3258(4)	1770(3)	42(1)
C(2)	5529(1)	6769(4)	1694(3)	36(1)
C(3)	6539(1)	5027(4)	3679(3)	45(1)
C(4)	6855(1)	6471(4)	4146(3)	46(1)
C(5)	7234(1)	6398(4)	5624(3)	41(1)
C(6)	7173(1)	7296(4)	6630(3)	40(1)
C(7)	7518(1)	7231(4)	7951(3)	46(1)
C(8)	7941(1)	6257(4)	8283(3)	48(1)
C(9)	8017(1)	5363(4)	7293(3)	49(1)
C(10)	7668(1)	5410(4)	5975(3)	52(1)
C(11)	6317(1)	5418(4)	635(3)	41(1)
C(12)	5802(1)	4108(4)	-1470(3)	44(1)
C(13)	5527(2)	4516(4)	-2969(3)	55(1)
C(14)	5778(2)	6022(4)	-3127(3)	52(1)

C(15)	6142(1)	6462(4)	-1699(3)	41(1)
C(16)	6148(1)	8143(4)	-1388(3)	42(1)
C(17)	5586(1)	10128(4)	-1171(3)	55(1)
C(18)	8189(2)	7178(5)	3229(4)	72(1)
C(19)	7815(2)	6987(6)	1817(4)	86(1)
C(20)	8913(2)	6106(5)	4938(4)	74(1)
C(21)	9316(2)	4886(6)	5245(4)	96(2)
Li(1)	5321(2)	6879(5)	-563(5)	31(1)
N(1)	5945(1)	5563(2)	-785(2)	33(1)
O(1)	5642(1)	8544(2)	-1377(2)	39(1)
O(2)	8573(1)	6040(3)	3573(2)	60(1)
Si(1)	5987(1)	5186(1)	1961(1)	37(1)

Tab. 8.24 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von $[(S,S_{Si})\text{-140}]_2$.

Atom	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
C(1)	42(2)	45(2)	37(2)	8(2)	10(2)	3(2)
C(2)	30(2)	41(2)	34(2)	-1(2)	9(2)	0(2)
C(3)	36(2)	46(2)	45(2)	5(2)	1(1)	2(2)
C(4)	37(2)	49(2)	47(2)	7(2)	7(2)	2(2)
C(5)	33(2)	41(2)	43(2)	5(2)	4(1)	-2(2)
C(6)	28(2)	45(2)	49(2)	1(2)	15(2)	4(1)
C(7)	34(2)	63(2)	38(2)	-4(2)	9(2)	-1(2)
C(8)	44(2)	54(2)	34(2)	-3(2)	-1(2)	-4(2)
C(9)	40(2)	45(2)	51(2)	-2(2)	1(2)	8(2)
C(10)	52(2)	50(2)	43(2)	-8(2)	3(2)	1(2)
C(11)	28(1)	33(2)	56(2)	10(2)	9(1)	4(1)
C(12)	47(2)	26(2)	68(2)	-1(2)	30(2)	0(1)
C(13)	72(3)	52(2)	51(2)	-16(2)	34(2)	-8(2)
C(14)	70(2)	50(2)	46(2)	-3(2)	32(2)	-4(2)
C(15)	40(2)	41(2)	54(2)	0(2)	30(2)	-1(2)
C(16)	40(2)	39(2)	49(2)	4(2)	20(2)	-7(2)
C(17)	71(2)	25(2)	65(2)	-4(2)	20(2)	-3(2)
C(18)	65(3)	95(3)	58(3)	-12(2)	24(2)	9(3)
C(19)	59(2)	134(4)	63(3)	-14(3)	18(2)	7(3)
C(20)	67(3)	103(4)	46(2)	-4(2)	12(2)	-15(3)
C(21)	68(3)	115(4)	81(3)	-13(3)	-2(2)	0(3)
Li(1)	22(2)	29(3)	38(3)	1(2)	5(2)	1(2)
N(1)	31(1)	28(2)	44(1)	3(1)	16(1)	1(1)
O(1)	42(1)	24(1)	50(1)	0(1)	16(1)	-4(1)
O(2)	51(1)	76(2)	51(2)	-20(1)	15(1)	2(1)
Si(1)	28(1)	41(1)	36(1)	2(1)	1(1)	4(1)

8.2.2.8 Kristallstruktur von $[(R,R,S)\text{-142}\cdot n\text{-BuLi}]_2$

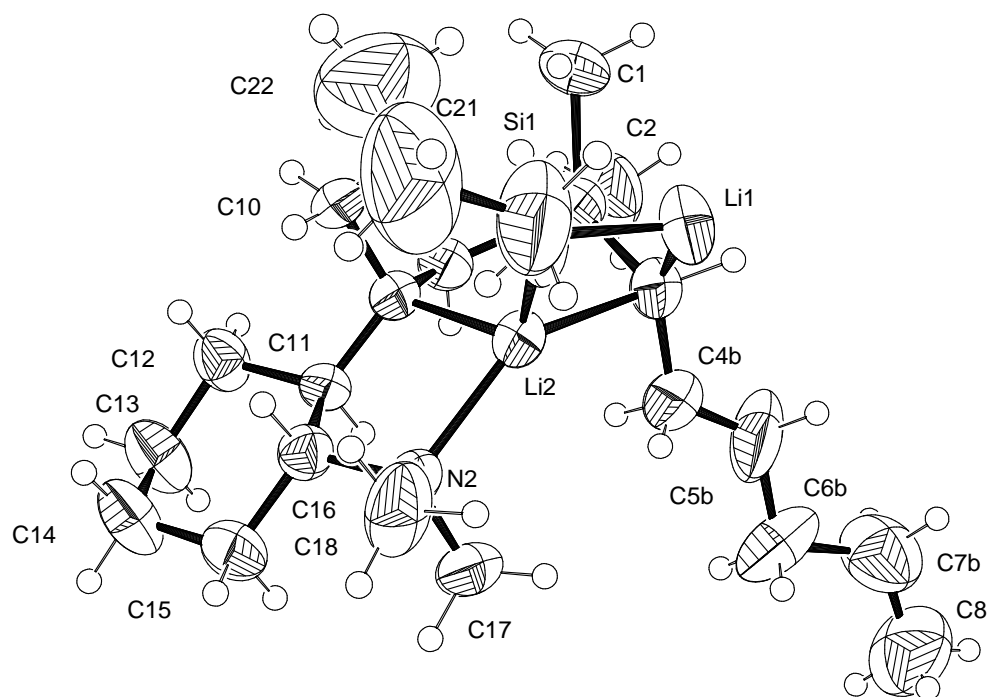


Abb. 8.13 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung $[(R,R,S)\text{-142}\cdot n\text{-BuLi}]_2$ im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.25 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von $[(R,R,S)\text{-142}\cdot n\text{-BuLi}]_2$.

Atom	x	y	z	U(eq)
C(1)	1852(3)	8305(3)	8329(3)	101(2)
C(2)	3461(5)	7920(3)	7539(3)	116(2)
C(3)	3488(3)	8996(3)	8896(3)	79(1)
C(8)	7211(5)	10303(4)	8374(5)	145(3)
C(9)	3323(3)	7361(2)	9025(2)	63(1)
C(10)	2228(2)	7267(2)	9968(3)	68(1)
C(11)	3744(2)	7021(2)	10264(2)	48(1)
C(12)	3560(3)	6189(2)	10296(2)	63(1)
C(13)	4236(3)	5775(2)	10748(2)	79(1)
C(14)	4250(4)	6081(2)	11502(2)	81(1)
C(15)	4452(3)	6913(2)	11484(2)	69(1)
C(16)	3804(2)	7345(2)	11027(2)	51(1)
C(17)	4874(3)	8342(3)	10842(3)	81(1)
C(18)	3704(4)	8518(2)	11675(3)	94(2)
C(20)	1541(4)	9584(3)	11112(4)	123(2)
C(21)	933(8)	9190(4)	11707(7)	203(5)
C(22)	468(6)	8779(6)	11292(5)	166(4)
C(19)	2061(5)	9202(3)	10494(5)	112(2)
C(4)	4448(4)	9049(4)	9020(4)	133(3)
C(5)	4983(4)	9464(3)	8645(5)	137(3)
C(6)	5918(3)	9584(3)	8812(4)	104(2)
C(7)	6382(4)	10083(4)	8195(4)	120(2)
Li(1)	2534(7)	9667(5)	9472(6)	103(3)
Li(2)	3268(4)	8580(3)	10063(4)	61(2)
N(1)	3139(2)	7446(2)	9809(2)	53(1)
N(2)	3969(2)	8158(2)	10993(2)	62(1)
Si(1)	3049(1)	8199(1)	8445(1)	74(1)

Tab. 8.26 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von $[(R,R,S)\text{-142}\cdot n\text{-BuLi}]_2$.

Atom	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
C(1)	92(4)	110(4)	101(4)	30(3)	-55(3)	-19(3)
C(2)	169(6)	109(4)	69(3)	21(3)	-20(3)	-28(4)
C(3)	80(3)	77(3)	79(3)	35(2)	-18(2)	-23(2)
C(8)	128(6)	154(7)	153(7)	22(5)	26(5)	-42(5)
C(9)	67(3)	71(2)	53(2)	10(2)	-15(2)	-15(2)
C(10)	49(2)	57(2)	98(3)	20(2)	-21(2)	-18(2)
C(11)	47(2)	54(2)	44(2)	5(2)	-9(2)	-6(2)
C(12)	83(3)	47(2)	58(2)	-1(2)	-10(2)	4(2)
C(13)	111(4)	68(3)	57(2)	-1(2)	-6(2)	27(3)
C(14)	116(4)	76(3)	51(2)	11(2)	-10(2)	22(3)
C(15)	80(3)	81(3)	48(2)	3(2)	-14(2)	-3(2)
C(16)	54(2)	50(2)	48(2)	-1(2)	-1(2)	-5(2)
C(17)	70(3)	97(3)	76(3)	13(2)	-23(2)	-35(3)
C(18)	151(5)	54(2)	77(3)	-12(2)	5(3)	-28(3)
C(20)	110(5)	87(4)	173(6)	38(4)	55(4)	13(3)
C(21)	327(15)	70(4)	213(11)	-4(5)	-38(11)	-11(6)
C(22)	164(8)	151(7)	184(9)	-44(7)	-40(7)	-23(6)
C(19)	108(5)	50(3)	176(6)	44(4)	34(5)	16(3)
C(4B)	98(4)	134(5)	166(6)	86(5)	-57(4)	-64(4)
C(5B)	66(3)	72(3)	273(9)	70(4)	40(4)	1(3)
C(6B)	74(3)	93(4)	145(5)	-43(3)	23(3)	-30(3)
C(7B)	91(4)	142(5)	127(5)	23(4)	6(4)	22(4)
Li(1)	119(8)	67(5)	124(7)	44(5)	-31(6)	-12(5)
Li(2)	63(4)	51(3)	71(4)	10(3)	-12(3)	-15(3)
N(1)	50(2)	54(2)	53(2)	9(1)	-10(1)	-13(2)
N(2)	75(2)	53(2)	56(2)	-4(2)	-9(2)	-22(2)
Si(1)	78(1)	81(1)	62(1)	23(1)	-23(1)	-24(1)

8.2.2.9 Kristallstruktur von $[(R,R,R)\text{-143}]_2$

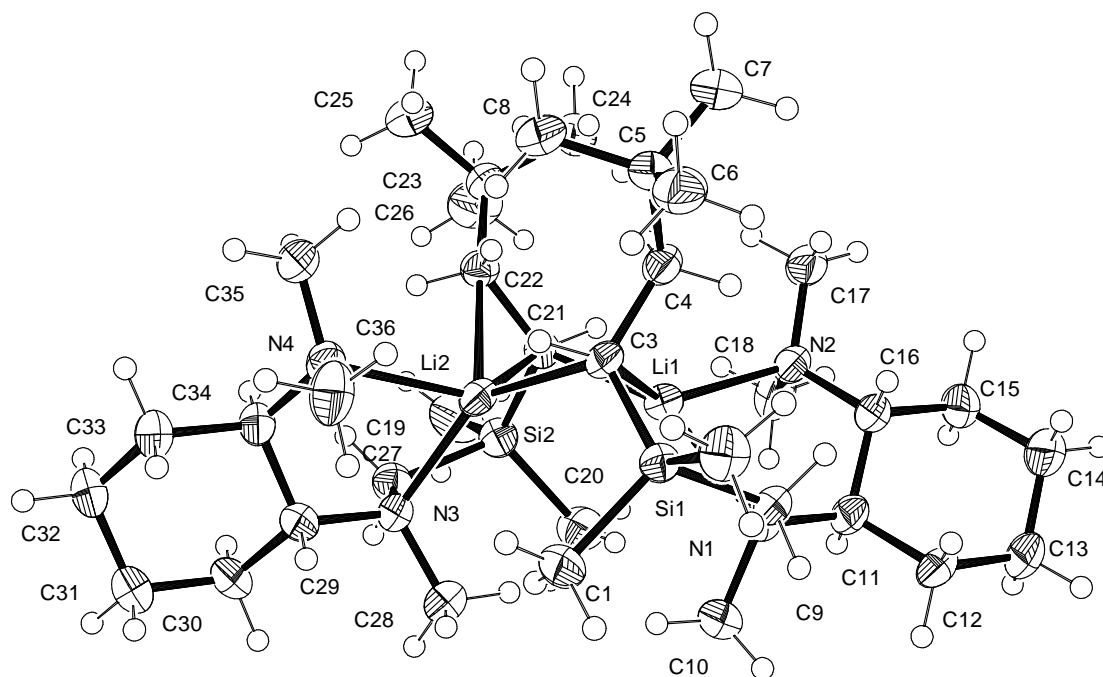


Abb. 8.14 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung $[(R,R,R)\text{-143}]_2$ im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.27 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von $[(R,R,R)\text{-143}]_2$.

Atom	x	y	z	U(eq)
C(1)	5160(4)	2795(3)	7679(2)	46(1)
C(2)	5166(4)	4610(3)	7028(1)	42(1)
C(3)	6578(3)	4579(3)	8053(1)	32(1)
C(4)	6993(3)	5704(3)	8083(1)	35(1)
C(5)	7954(3)	6087(3)	7742(1)	40(1)
C(6)	7631(4)	5971(3)	7210(1)	49(1)
C(7)	8187(4)	7223(3)	7857(2)	51(1)
C(8)	9036(3)	5459(3)	7837(2)	50(1)
C(9)	4064(3)	4967(3)	7939(1)	34(1)
C(10)	3189(4)	3937(3)	8559(2)	46(1)
C(11)	3113(3)	5816(3)	8641(1)	36(1)
C(12)	2084(3)	6080(3)	8313(2)	43(1)
C(13)	1407(3)	7010(3)	8496(2)	50(1)
C(14)	2179(4)	7939(3)	8551(2)	53(1)
C(15)	3146(3)	7690(3)	8900(2)	44(1)
C(16)	3853(3)	6764(3)	8718(1)	36(1)
C(17)	5706(3)	7348(3)	8996(2)	51(1)
C(18)	4560(4)	6355(4)	9536(1)	52(1)
C(19)	6793(4)	3430(4)	10450(1)	56(1)
C(20)	4753(4)	3643(3)	9837(2)	54(1)
C(21)	6931(3)	4490(3)	9371(1)	35(1)
C(22)	8216(3)	4492(3)	9278(1)	34(1)
C(23)	9013(3)	5252(3)	9551(1)	40(1)
C(24)	8760(4)	6364(3)	9397(2)	51(1)
C(25)	10239(4)	4991(4)	9416(2)	57(1)
C(26)	8866(4)	5159(4)	10095(2)	62(1)
C(27)	6801(3)	2220(3)	9557(1)	38(1)
C(28)	5362(3)	1773(3)	8978(1)	45(1)
C(29)	7252(3)	1076(3)	8859(1)	37(1)
C(30)	7212(4)	117(3)	9186(2)	51(1)
C(31)	7882(4)	-787(3)	8977(2)	57(1)
C(32)	9103(4)	-475(3)	8887(2)	53(1)
C(33)	9157(4)	457(3)	8553(2)	48(1)
C(34)	8485(3)	1388(3)	8754(1)	36(1)
C(35)	9676(4)	2797(3)	8469(2)	46(1)
C(36)	8263(4)	2120(4)	7936(1)	53(1)
Li(1)	5591(5)	5014(5)	8752(2)	37(1)
Li(2)	7074(5)	3433(5)	8709(2)	35(1)
N(1)	3798(3)	4912(2)	8462(1)	36(1)
N(2)	4860(2)	6519(2)	9025(1)	37(1)
N(3)	6581(2)	1974(2)	9041(1)	34(1)
N(4)	8541(3)	2335(2)	8445(1)	38(1)
Si(1)	5349(1)	4246(1)	7692(1)	32(1)
Si(2)	6352(1)	3546(1)	9786(1)	36(1)

Tab. 8.28 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von $[(R,R,R)\text{-143}]_2$.

Atom	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
C(1)	46(3)	31(2)	62(2)	-7(2)	-9(2)	-3(2)
C(2)	48(2)	50(2)	28(2)	0(2)	-6(2)	2(2)
C(3)	21(2)	35(2)	38(2)	2(1)	2(1)	1(2)
C(4)	26(2)	37(2)	40(2)	-3(2)	0(2)	3(2)
C(5)	32(2)	34(2)	54(2)	4(2)	4(2)	-4(2)
C(6)	41(3)	53(3)	54(2)	10(2)	7(2)	-5(2)
C(7)	43(3)	42(2)	69(3)	6(2)	1(2)	-11(2)
C(8)	31(2)	51(3)	69(3)	7(2)	9(2)	-5(2)
C(9)	25(2)	33(2)	45(2)	-1(2)	-4(2)	1(2)
C(10)	41(2)	34(2)	62(2)	3(2)	1(2)	-5(2)
C(11)	25(2)	40(2)	44(2)	1(2)	6(1)	4(2)
C(12)	25(2)	46(2)	58(2)	-1(2)	-5(2)	1(2)
C(13)	28(2)	52(2)	71(3)	5(2)	2(2)	10(2)
C(14)	39(2)	44(2)	77(3)	-1(2)	-1(2)	9(2)
C(15)	39(2)	36(2)	57(2)	0(2)	3(2)	6(2)
C(16)	27(2)	35(2)	44(2)	1(2)	3(2)	3(2)
C(17)	35(2)	37(2)	79(3)	-11(2)	-7(2)	1(2)
C(18)	51(3)	58(3)	47(2)	-9(2)	-10(2)	16(2)

C(19)	81(3)	58(3)	29(2)	6(2)	1(2)	-11(2)
C(20)	48(3)	50(2)	62(2)	-8(2)	19(2)	-3(2)
C(21)	33(2)	30(2)	43(2)	1(2)	-2(2)	2(2)
C(22)	33(2)	34(2)	34(2)	2(2)	-1(1)	-2(2)
C(23)	31(2)	38(2)	52(2)	3(2)	-9(2)	-2(2)
C(24)	44(3)	38(2)	72(3)	-3(2)	-10(2)	-3(2)
C(25)	35(3)	53(3)	82(3)	4(2)	-6(2)	-7(2)
C(26)	62(3)	72(3)	53(2)	-3(2)	-19(2)	-11(3)
C(27)	38(2)	37(2)	40(2)	6(2)	5(2)	0(2)
C(28)	32(2)	46(2)	57(2)	0(2)	0(2)	0(2)
C(29)	35(2)	29(2)	47(2)	-5(2)	-4(2)	-1(2)
C(30)	47(3)	28(2)	78(3)	2(2)	4(2)	-3(2)
C(31)	52(3)	31(2)	90(3)	1(2)	-2(2)	3(2)
C(32)	48(3)	30(2)	81(3)	-4(2)	-3(2)	10(2)
C(33)	40(2)	37(2)	65(2)	-7(2)	4(2)	9(2)
C(34)	34(2)	31(2)	42(2)	0(2)	-1(2)	5(2)
C(35)	34(2)	41(2)	64(2)	1(2)	14(2)	3(2)
C(36)	56(3)	58(3)	47(2)	-1(2)	7(2)	22(2)
Li(1)	29(3)	35(3)	47(3)	2(3)	0(3)	-2(3)
Li(2)	25(3)	38(3)	42(3)	-1(3)	-3(2)	1(3)
N(1)	28(2)	29(2)	50(2)	0(1)	3(1)	-2(1)
N(2)	27(2)	35(2)	49(2)	-6(1)	-4(1)	2(1)
N(3)	27(2)	32(2)	43(2)	0(1)	2(1)	2(1)
N(4)	36(2)	37(2)	40(2)	-1(1)	6(1)	6(1)
Si(1)	30(1)	30(1)	37(1)	-2(1)	-3(1)	-1(1)
Si(2)	38(1)	38(1)	33(1)	0(1)	6(1)	1(1)

8.2.2.10 Kristallstruktur von [(R,R)-117·Bu₂Mg]

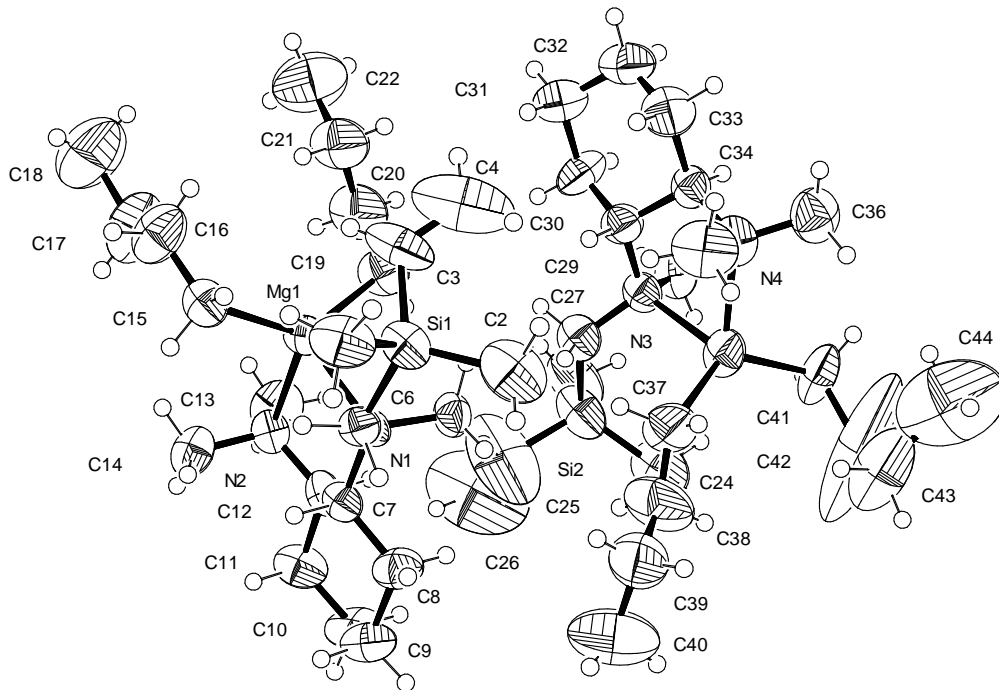


Abb. 8.15 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung [(R,R)-117·Bu₂Mg] im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.29 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{Å}^2 \cdot 10^3$) von [(R,R)-117-Bu₂Mg].

Atom	x	y	z	U(eq)
C(1)	-48(7)	12033(7)	7237(8)	79(2)
C(2)	1071(9)	10361(8)	5160(8)	102(3)
C(3)	-548(9)	9190(8)	6712(10)	99(3)
C(4)	-1028(13)	8154(14)	5709(17)	187(7)
C(5)	2208(6)	11133(5)	7841(6)	48(2)
C(6)	2888(7)	9176(6)	6832(6)	57(2)
C(7)	4163(6)	10823(6)	8797(6)	49(2)
C(8)	5202(7)	11224(7)	8079(7)	68(2)
C(9)	6562(8)	11917(7)	8867(8)	77(2)
C(10)	6990(7)	11013(8)	9429(9)	84(3)
C(11)	5987(7)	10664(7)	10154(8)	72(2)
C(12)	4602(7)	10005(6)	9434(6)	52(2)
C(13)	3764(9)	8463(7)	10370(8)	85(3)
C(14)	3667(8)	10660(7)	11346(6)	68(2)
C(15)	492(7)	10354(6)	10087(7)	64(2)
C(16)	-572(9)	9842(8)	10668(9)	94(3)
C(17)	-305(12)	9186(11)	11395(10)	127(4)
C(18)	-1503(13)	8606(13)	11928(12)	163(5)
C(19)	1155(8)	7045(6)	7897(8)	78(2)
C(20)	359(10)	6119(7)	8283(9)	100(3)
C(21)	-1072(10)	6120(8)	8178(10)	99(3)
C(22)	-1914(12)	5189(11)	8651(12)	149(5)
C(23)	4925(12)	3781(10)	5914(10)	139(4)
C(24)	5819(10)	5412(9)	4427(10)	121(4)
C(25)	5310(20)	6710(30)	6983(19)	236(13)
C(26)	5990(20)	7070(20)	7580(30)	269(13)
C(27)	3046(7)	5293(7)	5202(7)	70(2)
C(28)	2461(8)	3178(6)	3545(7)	67(2)
C(29)	819(7)	4450(6)	3990(7)	61(2)
C(30)	175(8)	3647(8)	4628(8)	84(2)
C(31)	-1313(8)	3620(9)	4618(9)	88(3)
C(32)	-1997(9)	3117(8)	3352(9)	88(3)
C(33)	-1414(8)	3947(9)	2726(8)	84(3)
C(34)	71(7)	4036(6)	2682(6)	57(2)
C(35)	370(9)	6091(7)	2380(9)	100(3)
C(36)	373(9)	4124(8)	707(8)	88(3)
C(37)	3532(10)	7484(7)	3556(9)	102(3)
C(38)	4814(11)	8231(8)	3976(11)	124(4)
C(39)	5199(12)	9675(8)	4275(10)	115(3)
C(40)	6555(12)	10371(14)	4946(15)	178(6)
C(42)	4930(30)	4939(17)	822(19)	390(20)
C(43)	4857(18)	5753(8)	464(14)	184(8)
C(44)	3690(20)	4840(16)	-850(20)	285(13)
Mg(1)	1621(2)	9104(2)	9017(2)	55(1)
Mg(2)	2912(3)	5397(2)	2663(2)	69(1)
N(1)	2824(5)	10134(4)	8029(4)	45(1)
N(2)	3602(5)	9635(5)	10163(5)	50(1)
N(3)	2262(6)	4490(5)	3981(5)	55(2)
N(4)	738(6)	4856(5)	2056(6)	68(2)
C(41)	3807(10)	4175(7)	1317(8)	93(3)
Si(1)	667(2)	10629(2)	6708(2)	63(1)
Si(2)	4794(3)	5292(2)	5607(2)	91(1)

Tab. 8.30 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von [(*R,R*)-117-Bu₂Mg].

Atom	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
C(1)	57(6)	81(5)	109(7)	43(5)	-9(5)	31(4)
C(2)	97(8)	99(6)	110(7)	38(6)	-19(6)	40(6)
C(3)	70(7)	68(5)	124(8)	18(6)	-33(6)	1(5)
C(4)	114(11)	131(11)	290(20)	83(13)	-42(12)	-4(9)
C(5)	49(5)	34(3)	60(4)	15(3)	13(4)	14(3)
C(6)	58(5)	59(4)	49(4)	11(4)	10(4)	24(4)
C(7)	45(5)	42(3)	56(4)	9(3)	3(4)	19(3)
C(8)	47(5)	68(4)	91(6)	31(5)	15(5)	19(4)
C(9)	54(6)	67(5)	109(7)	38(5)	16(5)	9(4)
C(10)	24(5)	96(6)	133(8)	38(6)	13(5)	28(4)
C(11)	51(5)	63(4)	101(6)	27(4)	-5(5)	26(4)
C(12)	66(5)	44(3)	47(4)	11(3)	3(4)	29(4)
C(13)	106(7)	75(5)	108(7)	58(5)	28(5)	49(5)
C(14)	64(6)	96(5)	65(5)	40(5)	18(4)	45(4)
C(15)	63(5)	60(4)	69(5)	17(4)	5(4)	30(4)
C(16)	104(8)	87(6)	119(8)	50(6)	52(6)	54(5)
C(17)	151(11)	142(9)	128(9)	70(8)	61(8)	77(8)
C(18)	177(13)	182(11)	173(12)	108(11)	82(10)	51(10)
C(19)	86(6)	40(4)	106(7)	21(4)	24(5)	20(4)
C(20)	116(9)	50(5)	132(8)	26(5)	19(7)	34(5)
C(21)	90(8)	66(5)	135(8)	27(6)	21(6)	26(5)
C(22)	136(12)	147(10)	196(13)	107(10)	39(9)	27(8)
C(23)	138(11)	143(9)	104(8)	31(7)	-33(7)	26(8)
C(24)	91(8)	103(7)	138(9)	-5(6)	13(7)	58(6)
C(25)	141(17)	300(20)	197(17)	-34(15)	-72(12)	173(18)
C(26)	180(20)	186(18)	420(40)	50(20)	-20(20)	138(18)
C(27)	75(6)	60(4)	73(6)	19(4)	12(5)	30(4)
C(28)	81(6)	56(4)	70(5)	22(4)	15(4)	33(4)
C(29)	59(6)	52(4)	67(5)	18(4)	14(4)	14(4)
C(30)	63(6)	112(6)	97(6)	56(6)	39(5)	30(5)
C(31)	61(6)	97(6)	109(8)	44(6)	17(6)	16(5)
C(32)	57(6)	87(6)	113(8)	35(6)	12(6)	13(5)
C(33)	61(6)	105(6)	97(7)	38(6)	6(5)	46(5)
C(34)	60(6)	54(4)	55(5)	14(4)	12(4)	23(4)
C(35)	100(8)	76(5)	137(8)	50(6)	11(6)	37(5)
C(36)	107(8)	88(6)	77(6)	43(5)	13(5)	25(5)
C(37)	119(9)	42(4)	118(8)	9(5)	48(7)	3(5)
C(38)	113(9)	55(5)	164(10)	3(6)	7(8)	16(6)
C(39)	130(10)	83(6)	114(8)	31(6)	21(7)	8(6)
C(40)	88(10)	173(12)	252(17)	86(12)	-20(11)	6(9)
C(42)	860(50)	248(18)	400(30)	280(20)	520(40)	420(30)
C(43)	330(20)	46(5)	197(13)	45(8)	173(14)	65(9)
C(44)	300(30)	140(13)	430(40)	90(20)	160(30)	84(16)
Mg(1)	50(2)	43(1)	68(2)	15(1)	10(1)	19(1)
Mg(2)	94(2)	42(1)	72(2)	15(1)	33(2)	25(1)
N(1)	45(4)	34(3)	49(3)	8(2)	0(3)	15(2)
N(2)	61(4)	47(3)	48(4)	20(3)	5(3)	24(3)
N(3)	60(4)	44(3)	57(4)	14(3)	8(3)	17(3)
N(4)	87(5)	54(3)	70(5)	27(3)	12(4)	28(3)
C(41)	157(9)	62(4)	86(6)	40(5)	76(6)	45(5)
Si(1)	64(2)	55(1)	67(2)	20(1)	-2(1)	20(1)
Si(2)	81(2)	80(2)	91(2)	-2(1)	-11(2)	48(1)

8.2.2.11 Kristallstruktur von (R,R)-144

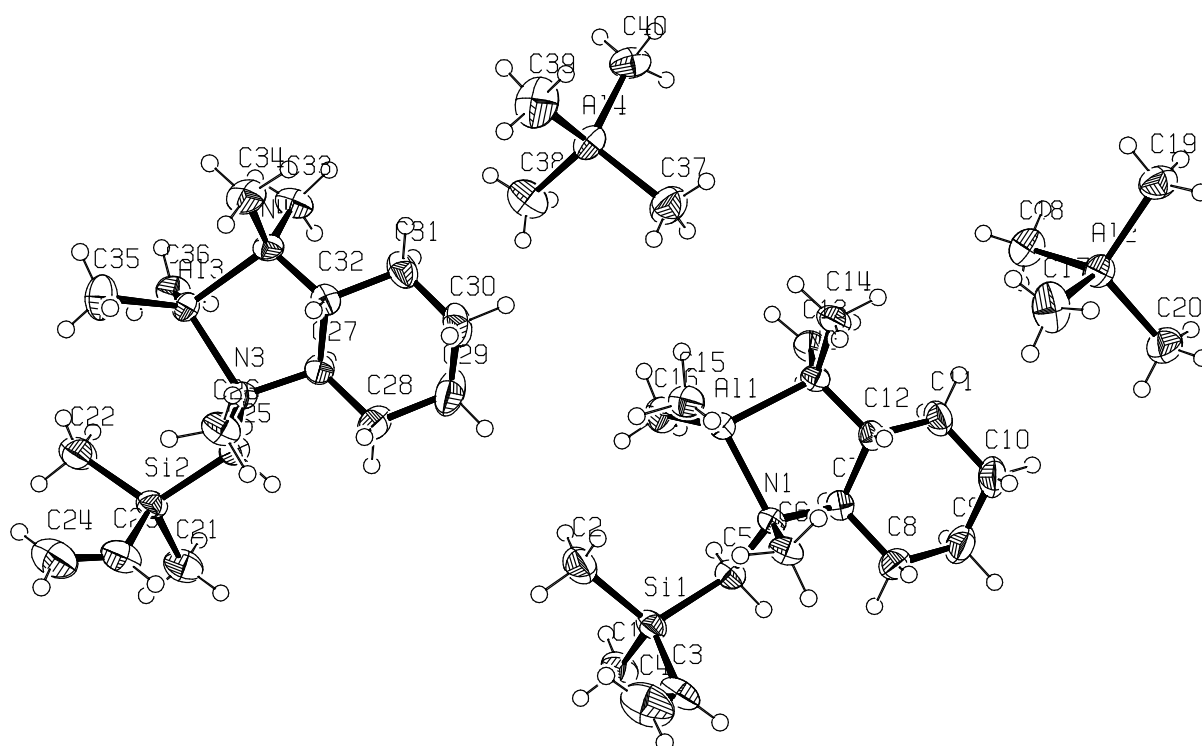


Abb. 8.16 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung (R,R)-144 im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.31 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von (R,R)-144.

Atom	x	y	z	U(eq)
Al(1)	6802(1)	8251(1)	5705(1)	25(1)
Al(2)	2708(1)	7873(1)	8376(1)	35(1)
Al(3)	7096(1)	8110(1)	638(1)	28(1)
Al(4)	2643(1)	8565(1)	3524(1)	36(1)
C(1)	11315(2)	9687(2)	5714(1)	48(1)
C(2)	9683(2)	7871(2)	4979(1)	54(1)
C(3)	11310(2)	7295(2)	6278(1)	43(1)
C(4)	11556(2)	6328(2)	6019(2)	73(1)
C(5)	9227(2)	8985(2)	6330(1)	30(1)
C(6)	8575(2)	7122(2)	6666(1)	30(1)
C(7)	7605(2)	8864(2)	7034(1)	27(1)
C(8)	8350(2)	8751(2)	7720(1)	40(1)
C(9)	7745(2)	9339(2)	8255(1)	50(1)
C(10)	6489(2)	8861(2)	8259(1)	51(1)
C(11)	5734(2)	9006(2)	7583(1)	41(1)
C(12)	6325(2)	8423(2)	7037(1)	28(1)
C(13)	5033(2)	9634(2)	6213(1)	39(1)
C(14)	4623(2)	7645(2)	6271(1)	39(1)
C(15)	6594(2)	6756(2)	5299(1)	38(1)
C(16)	6842(3)	9578(2)	5146(1)	45(1)
C(17)	3621(3)	6609(2)	8013(2)	59(1)
C(18)	2470(3)	9207(2)	7751(1)	44(1)
C(19)	1102(2)	7268(2)	8523(1)	45(1)
C(20)	3602(3)	8408(3)	9247(1)	57(1)
C(21)	11505(2)	10158(2)	1413(1)	51(1)
C(22)	10013(2)	9389(2)	112(1)	58(1)
C(23)	11447(2)	7688(2)	1022(1)	48(1)
C(24)	11717(2)	7167(2)	510(2)	65(1)
C(25)	9280(2)	8905(2)	1525(1)	31(1)

C(26)	8934(2)	6862(2)	1481(1)	39(1)
C(27)	7563(2)	8113(2)	2023(1)	31(1)
C(28)	8215(2)	7807(2)	2710(1)	53(1)
C(29)	7402(2)	7964(2)	3243(1)	63(1)
C(30)	6284(2)	7230(2)	3089(1)	51(1)
C(31)	5609(2)	7532(2)	2409(1)	41(1)
C(32)	6414(2)	7408(2)	1870(1)	29(1)
C(33)	4899(2)	8605(2)	1160(1)	41(1)
C(34)	5119(2)	6637(2)	889(1)	44(1)
C(35)	7318(3)	6931(2)	-4(1)	53(1)
C(36)	6851(2)	9657(2)	326(1)	39(1)
C(37)	3396(3)	8135(3)	4447(1)	55(1)
C(38)	3747(3)	9647(2)	3150(2)	54(1)
C(39)	2367(4)	7147(2)	2977(2)	67(1)
C(40)	1037(2)	9280(2)	3567(1)	45(1)
N(1)	8155(1)	8297(1)	6477(1)	25(1)
N(2)	5612(1)	8499(1)	6346(1)	27(1)
N(3)	8319(1)	7996(1)	1459(1)	28(1)
N(4)	5792(1)	7664(1)	1173(1)	29(1)
Si(1)	10376(1)	8410(1)	5811(1)	34(1)
Si(2)	10541(1)	9010(1)	991(1)	35(1)

Tab. 8.32 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von (*R,R*)-**144**.

Atom	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
Al(1)	25(1)	23(1)	27(1)	1(1)	5(1)	0(1)
Al(2)	40(1)	30(1)	35(1)	4(1)	4(1)	3(1)
Al(3)	32(1)	25(1)	26(1)	-2(1)	3(1)	-1(1)
Al(4)	48(1)	25(1)	33(1)	-2(1)	0(1)	0(1)
C(1)	37(1)	48(1)	60(2)	5(1)	14(1)	-11(1)
C(2)	43(1)	72(2)	50(1)	-19(1)	17(1)	-6(1)
C(3)	28(1)	39(1)	66(2)	-7(1)	16(1)	-3(1)
C(4)	60(2)	54(2)	107(2)	-16(2)	18(2)	14(1)
C(5)	31(1)	24(1)	37(1)	-4(1)	6(1)	-6(1)
C(6)	26(1)	20(1)	44(1)	1(1)	6(1)	3(1)
C(7)	33(1)	20(1)	30(1)	2(1)	7(1)	5(1)
C(8)	39(1)	44(1)	34(1)	-1(1)	0(1)	1(1)
C(9)	60(2)	63(2)	27(1)	-4(1)	4(1)	6(1)
C(10)	62(2)	62(2)	33(1)	1(1)	18(1)	8(1)
C(11)	42(1)	47(1)	38(1)	-1(1)	16(1)	5(1)
C(12)	31(1)	25(1)	28(1)	5(1)	8(1)	4(1)
C(13)	36(1)	38(1)	43(1)	2(1)	6(1)	16(1)
C(14)	25(1)	46(1)	47(1)	1(1)	8(1)	-3(1)
C(15)	34(1)	34(1)	45(1)	-11(1)	4(1)	0(1)
C(16)	48(2)	43(1)	45(2)	14(1)	10(1)	1(1)
C(17)	81(2)	38(2)	62(2)	18(1)	27(2)	23(1)
C(18)	56(2)	28(1)	45(2)	3(1)	4(1)	8(1)
C(19)	43(1)	44(1)	47(2)	7(1)	-3(1)	1(1)
C(20)	54(2)	74(2)	41(1)	1(2)	-1(1)	-22(2)
C(21)	39(1)	50(1)	65(2)	4(1)	12(1)	-11(1)
C(22)	38(1)	85(2)	51(2)	20(1)	10(1)	6(1)
C(23)	34(1)	50(1)	62(2)	9(1)	11(1)	4(1)
C(24)	47(2)	60(2)	89(2)	-12(2)	17(1)	0(1)
C(25)	32(1)	29(1)	32(1)	5(1)	2(1)	-5(1)
C(26)	36(1)	29(1)	54(1)	10(1)	9(1)	7(1)
C(27)	34(1)	29(1)	31(1)	-1(1)	6(1)	-10(1)
C(28)	48(1)	77(2)	32(1)	12(1)	0(1)	-33(1)
C(29)	84(2)	74(2)	30(1)	-2(1)	12(1)	-35(2)
C(30)	63(2)	53(1)	41(1)	-2(1)	27(1)	-22(1)
C(31)	44(1)	40(1)	45(1)	-8(1)	21(1)	-14(1)
C(32)	33(1)	20(1)	34(1)	-2(1)	9(1)	-5(1)
C(33)	30(1)	36(1)	58(1)	-1(1)	8(1)	1(1)
C(34)	47(1)	33(1)	51(1)	-9(1)	1(1)	-18(1)
C(35)	72(2)	44(2)	44(2)	-14(1)	16(2)	2(1)
C(36)	36(1)	36(1)	43(1)	9(1)	4(1)	1(1)
C(37)	55(2)	64(2)	44(1)	1(1)	-1(1)	13(2)
C(38)	51(2)	40(2)	73(2)	2(1)	17(2)	4(1)
C(39)	98(3)	35(2)	67(2)	-19(1)	14(2)	-8(2)
C(40)	42(1)	31(1)	58(2)	6(1)	-5(1)	-9(1)
N(1)	23(1)	22(1)	32(1)	-2(1)	6(1)	-1(1)

N(2)	24(1)	23(1)	33(1)	2(1)	4(1)	5(1)
N(3)	26(1)	27(1)	30(1)	4(1)	4(1)	-2(1)
N(4)	27(1)	23(1)	34(1)	-7(1)	1(1)	-5(1)
Si(1)	26(1)	38(1)	40(1)	-6(1)	11(1)	-7(1)
Si(2)	28(1)	41(1)	36(1)	9(1)	6(1)	-1(1)

8.2.2.12 Kristallstruktur von [(R,R)-117·ZnBr₂]

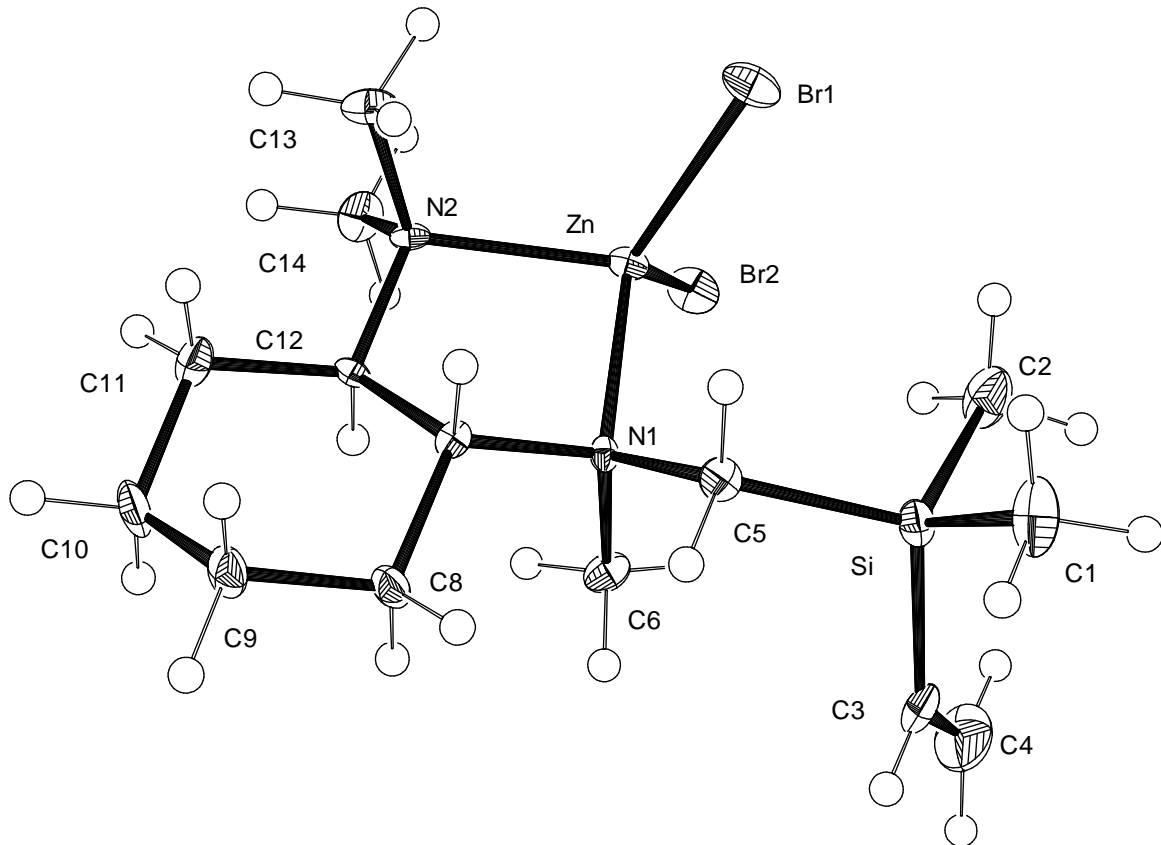


Abb. 8.17 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung [(R,R)-117·ZnBr₂] im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.33 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von [(R,R)-117-ZnBr₂].

Atom	x	y	z	U(eq)
Br(1)	8141(1)	-1672(1)	1444(1)	22(1)
Br(2)	8081(1)	1688(1)	1284(1)	21(1)
C(1)	5135(3)	-1724(3)	3867(3)	32(1)
C(2)	5462(3)	-60(4)	2341(2)	29(1)
C(3)	5353(3)	746(3)	4266(2)	27(1)
C(4)	4803(4)	1670(4)	4008(3)	46(1)
C(5)	7529(3)	-688(3)	3732(2)	15(1)
C(6)	8179(3)	1263(3)	3734(2)	16(1)
C(7)	9712(2)	-251(2)	3778(2)	9(1)
C(8)	9855(2)	-95(4)	4794(2)	18(1)
C(9)	11106(3)	-432(3)	5125(2)	19(1)
C(10)	12062(3)	237(3)	4631(2)	22(1)
C(11)	11974(2)	46(4)	3624(2)	18(1)
C(12)	10720(2)	332(2)	3257(2)	10(1)
C(13)	11165(3)	-910(3)	1959(2)	21(1)
C(14)	11149(3)	1078(3)	1755(2)	20(1)
N(1)	8483(2)	105(3)	3425(1)	9(1)
N(2)	10596(2)	148(2)	2264(1)	10(1)
Si	5863(1)	-401(1)	3521(1)	16(1)
Zn	8722(1)	72(1)	2045(1)	12(1)

Tab. 8.34 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von [(R,R)-117-ZnBr₂].

Atom	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
Br(1)	33(1)	12(1)	22(1)	-5(1)	-2(1)	-4(1)
Br(2)	31(1)	13(1)	19(1)	5(1)	-5(1)	4(1)
C(1)	19(2)	31(2)	45(2)	8(2)	-4(2)	-7(2)
C(2)	18(2)	44(2)	24(2)	10(2)	-2(1)	6(3)
C(3)	10(2)	38(3)	32(2)	-9(2)	6(2)	-1(2)
C(4)	27(3)	37(3)	74(3)	-25(3)	3(2)	8(3)
C(5)	16(2)	13(2)	14(2)	3(2)	2(2)	-4(2)
C(6)	18(2)	12(2)	19(2)	1(1)	4(2)	3(2)
C(7)	11(2)	4(2)	14(2)	3(1)	1(1)	1(1)
C(8)	15(2)	28(2)	10(2)	-1(2)	-2(1)	-5(2)
C(9)	15(2)	29(2)	13(2)	5(2)	-5(1)	0(2)
C(10)	15(2)	31(3)	20(2)	1(2)	-10(1)	-4(2)
C(11)	11(1)	22(2)	20(2)	5(2)	2(1)	0(2)
C(12)	14(2)	8(2)	9(2)	-2(1)	-1(1)	-1(1)
C(13)	29(2)	16(2)	18(2)	-4(2)	4(2)	5(2)
C(14)	19(2)	19(2)	20(2)	8(2)	6(2)	-6(2)
N(1)	8(1)	6(1)	13(1)	1(1)	-1(1)	-1(1)
N(2)	15(1)	6(2)	9(1)	0(1)	2(1)	2(1)
Si	13(1)	18(1)	17(1)	2(1)	-3(1)	-2(1)
Zn	17(1)	9(1)	10(1)	0(1)	-1(1)	1(1)

8.2.2.13 Kristallstruktur von [(R,R)-145-ZnBr₂]

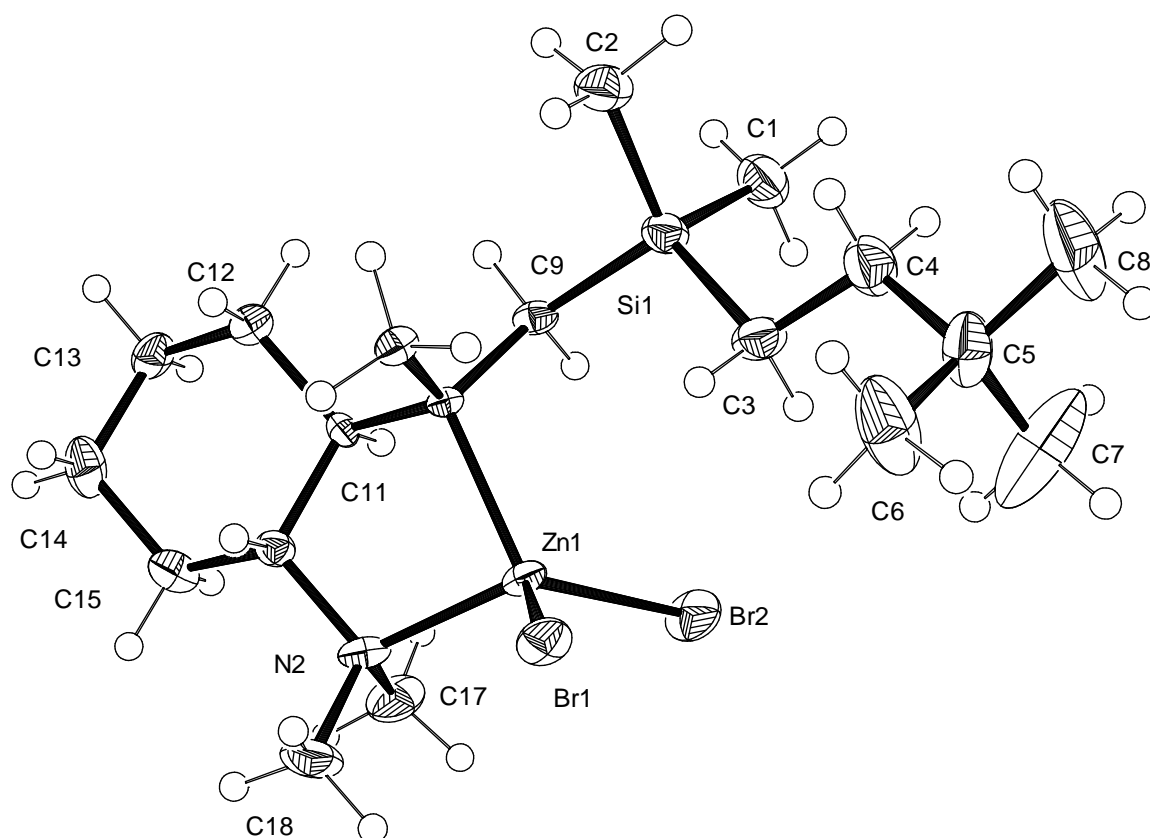


Abb. 8.18 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung [(R,R)-145-ZnBr₂] im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.35 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{Å}^2 \cdot 10^3$) von [(R,R)-145-ZnBr₂].

Atom	x	y	z	U(eq)
Br(1)	8141(1)	-1672(1)	1444(1)	22(1)
Br(2)	8081(1)	1688(1)	1284(1)	21(1)
C(1)	5135(3)	-1724(3)	3867(3)	32(1)
C(2)	5462(3)	-60(4)	2341(2)	29(1)
C(3)	5353(3)	746(3)	4266(2)	27(1)
C(4)	4803(4)	1670(4)	4008(3)	46(1)
C(5)	7529(3)	-688(3)	3732(2)	15(1)
C(6)	8179(3)	1263(3)	3734(2)	16(1)
C(7)	9712(2)	-251(2)	3778(2)	9(1)
C(8)	9855(2)	-95(4)	4794(2)	18(1)
C(9)	11106(3)	-432(3)	5125(2)	19(1)
C(10)	12062(3)	237(3)	4631(2)	22(1)
C(11)	11974(2)	46(4)	3624(2)	18(1)
C(12)	10720(2)	332(2)	3257(2)	10(1)
C(13)	11165(3)	-910(3)	1959(2)	21(1)
C(14)	11149(3)	1078(3)	1755(2)	20(1)
N(1)	8483(2)	105(3)	3425(1)	9(1)
N(2)	10596(2)	148(2)	2264(1)	10(1)
Si	5863(1)	-401(1)	3521(1)	16(1)
Zn	8722(1)	72(1)	2045(1)	12(1)

Tab. 8.36 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von $[(R,R)\text{-145}\cdot\text{ZnBr}_2]$.

Atom	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
Br(1)	14(1)	31(1)	35(1)	-1(1)	3(1)	-3(1)
Br(2)	39(1)	21(1)	53(1)	-12(1)	-6(1)	5(1)
Zn(1)	13(1)	17(1)	28(1)	-2(1)	1(1)	2(1)
Si(1)	19(1)	31(1)	23(1)	3(1)	-1(1)	2(1)
N(2)	15(1)	26(2)	33(2)	4(1)	-1(1)	6(1)
N(1)	11(1)	14(1)	16(2)	2(1)	1(1)	2(1)
C(1)	35(2)	49(3)	30(3)	-2(2)	-5(2)	-2(2)
C(13)	20(2)	30(2)	28(3)	-3(2)	8(2)	1(2)
C(16)	15(2)	23(2)	18(2)	1(2)	0(2)	0(1)
C(11)	17(2)	15(2)	12(2)	0(1)	-3(2)	-1(1)
C(5)	37(2)	47(3)	31(3)	-11(2)	9(2)	-14(2)
C(9)	13(2)	16(2)	27(2)	1(2)	-2(2)	0(1)
C(4)	30(2)	59(3)	26(3)	-1(2)	1(2)	-2(2)
C(14)	39(2)	45(3)	18(2)	-4(2)	8(2)	-9(2)
C(15)	27(2)	35(2)	27(3)	5(2)	-6(2)	0(2)
C(12)	18(2)	20(2)	25(2)	1(2)	2(2)	-1(2)
C(3)	21(2)	35(2)	33(3)	3(2)	1(2)	6(2)
C(6)	50(3)	108(4)	32(3)	-6(3)	8(2)	-38(3)
C(8)	64(3)	117(5)	24(3)	-1(3)	4(3)	-30(3)
C(18)	17(2)	62(3)	35(3)	6(2)	-6(2)	5(2)
C(2)	28(2)	41(3)	31(3)	11(2)	2(2)	6(2)
C(10)	19(2)	17(2)	22(2)	1(2)	2(2)	3(2)
C(17)	42(2)	34(2)	37(3)	15(2)	7(2)	16(2)
C(7)	94(4)	63(4)	145(6)	-33(4)	75(4)	-4(4)

8.2.2.14 Kristallstruktur von $[(R,R)\text{-146}\cdot\text{ZnBr}_2]$

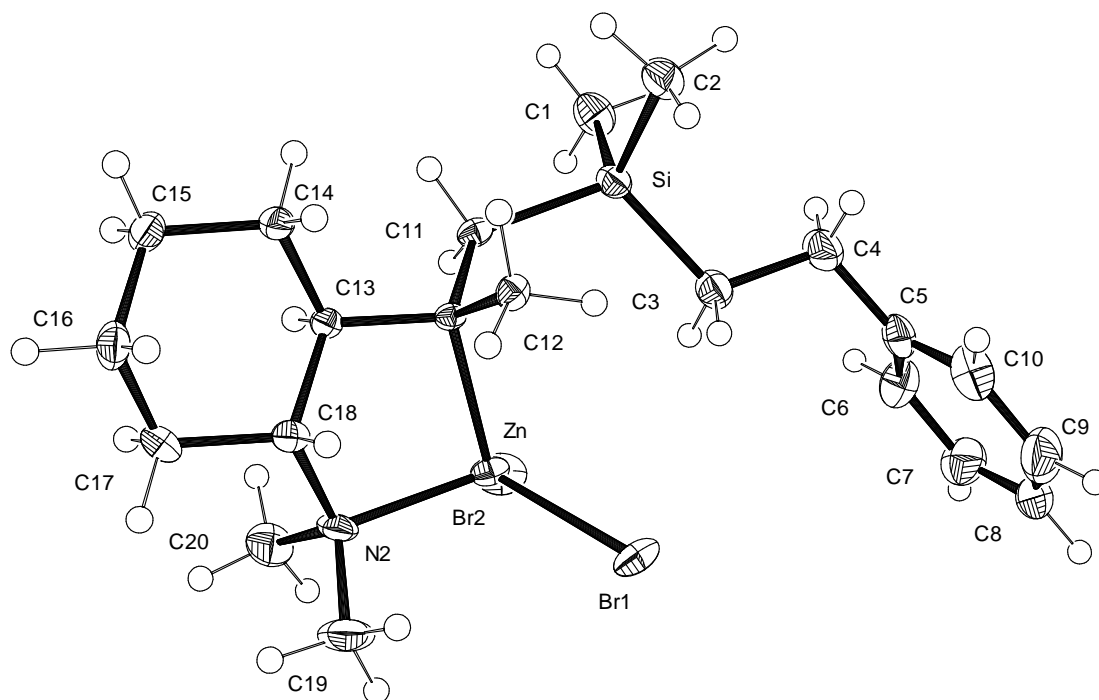


Abb. 8.19 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung $[(R,R)\text{-146}\cdot\text{ZnBr}_2]$ im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.37 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von [(R,R)-146-ZnBr₂].

Atom	x	y	z	U(eq)
Br(1)	8126(1)	-2904(1)	8811(1)	27(1)
Br(2)	5067(1)	-585(1)	8532(1)	33(1)
C(1)	6564(2)	4023(3)	6713(2)	32(1)
C(2)	9153(2)	3363(3)	7153(2)	30(1)
C(3)	7476(2)	543(3)	6694(2)	26(1)
C(4)	7704(2)	508(3)	5548(2)	33(1)
C(5)	7534(2)	-1123(3)	5060(2)	28(1)
C(6)	6442(2)	-1660(3)	4674(2)	35(1)
C(7)	6261(2)	-3180(3)	4252(2)	40(1)
C(8)	7181(3)	-4190(3)	4192(2)	40(1)
C(9)	8278(3)	-3698(4)	4560(2)	47(1)
C(10)	8459(2)	-2171(4)	4995(2)	40(1)
C(11)	7361(2)	2593(2)	8741(2)	17(1)
C(12)	9124(2)	1099(3)	9358(2)	17(1)
C(13)	7742(2)	1914(2)	10612(2)	15(1)
C(14)	8582(2)	3270(3)	10997(2)	19(1)
C(15)	8466(2)	3761(3)	12116(2)	23(1)
C(16)	8656(2)	2325(3)	12837(2)	27(1)
C(17)	7763(2)	1031(3)	12500(2)	27(1)
C(18)	7855(2)	499(2)	11376(2)	19(1)
C(19)	7412(2)	-2373(3)	11441(2)	37(1)
C(20)	5810(2)	-503(3)	11298(2)	35(1)
N(1)	7886(1)	1373(2)	9512(1)	14(1)
N(2)	7002(1)	-812(2)	10999(1)	22(1)
Si	7665(1)	2575(1)	7323(1)	20(1)
Zn	6974(1)	-805(1)	9375(1)	18(1)

Tab. 8.38 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von [(R,R)-146-ZnBr₂].

Atom	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
Br(1)	28(1)	14(1)	39(1)	-5(1)	1(1)	3(1)
Br(2)	16(1)	35(1)	46(1)	5(1)	-5(1)	-3(1)
C(1)	34(1)	37(2)	24(1)	7(1)	1(1)	2(1)
C(2)	28(1)	33(1)	30(2)	1(1)	9(1)	-5(1)
C(3)	27(1)	29(1)	21(1)	0(1)	4(1)	-4(1)
C(4)	44(2)	36(2)	21(1)	-1(1)	5(1)	-9(1)
C(5)	35(1)	36(2)	13(1)	1(1)	4(1)	1(1)
C(6)	36(2)	37(2)	31(2)	-7(1)	-1(1)	5(1)
C(7)	47(2)	39(2)	33(2)	-8(1)	-2(1)	-5(1)
C(8)	68(2)	32(2)	23(2)	-2(1)	15(2)	-2(2)
C(9)	55(2)	47(2)	43(2)	1(2)	18(2)	19(2)
C(10)	34(2)	55(2)	32(2)	-2(2)	7(1)	1(1)
C(11)	15(1)	13(1)	22(1)	0(1)	1(1)	1(1)
C(12)	13(1)	18(1)	21(1)	-2(1)	3(1)	2(1)
C(13)	14(1)	13(1)	18(1)	2(1)	4(1)	3(1)
C(14)	19(1)	17(1)	20(1)	0(1)	5(1)	-1(1)
C(15)	27(1)	20(1)	23(1)	-5(1)	2(1)	1(1)
C(16)	37(1)	28(1)	16(1)	-5(1)	2(1)	4(1)
C(17)	37(1)	25(1)	19(1)	7(1)	6(1)	-2(1)
C(18)	19(1)	16(1)	22(1)	2(1)	3(1)	-1(1)
C(19)	51(2)	20(1)	39(2)	12(1)	0(1)	-5(1)
C(20)	28(1)	38(2)	40(2)	-1(1)	12(1)	-14(1)
N(1)	13(1)	11(1)	17(1)	1(1)	2(1)	1(1)
N(2)	25(1)	17(1)	25(1)	6(1)	7(1)	-5(1)
Si	22(1)	22(1)	18(1)	2(1)	2(1)	-3(1)
Zn	15(1)	13(1)	26(1)	0(1)	0(1)	-2(1)

8.2.3 Kristallstrukturen Kapitel 4.3

8.2.3.1 Kristallstruktur von 157

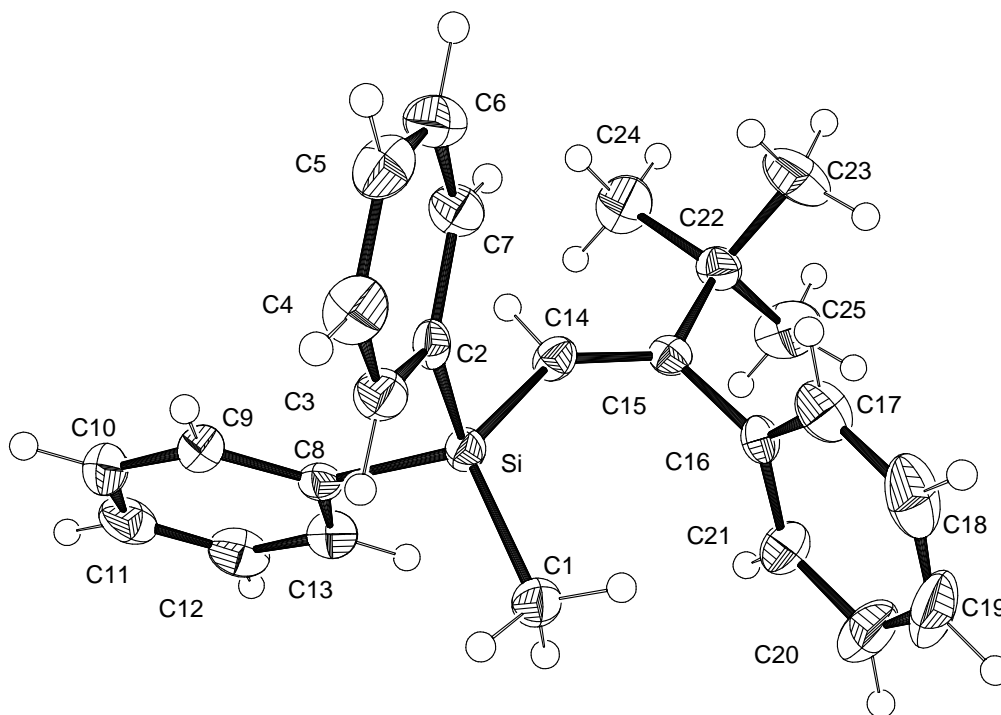


Abb. 8.20 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung **157** im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.39 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von **157**.

Atom	x	y	z	U(eq)
C(1)	3075(1)	2316(2)	8644(1)	30(1)
C(2)	734(1)	1320(2)	8714(1)	22(1)
C(3)	376(1)	2367(2)	8235(1)	30(1)
C(4)	-559(1)	2241(2)	7809(1)	37(1)
C(5)	-1173(1)	1050(2)	7859(1)	36(1)
C(6)	-848(1)	-1(2)	8333(1)	36(1)
C(7)	91(1)	133(2)	8755(1)	30(1)
C(8)	1822(1)	2556(2)	10135(1)	23(1)
C(9)	862(1)	3260(2)	10309(1)	29(1)
C(10)	747(1)	3974(2)	10991(1)	38(1)
C(11)	1579(2)	4004(2)	11510(1)	40(1)
C(12)	2539(2)	3331(2)	11349(1)	39(1)
C(13)	2654(1)	2621(2)	10671(1)	32(1)
C(14)	2371(1)	-272(2)	9636(1)	26(1)
C(15)	3050(1)	-1257(2)	9396(1)	22(1)
C(16)	3771(1)	-1000(2)	8721(1)	23(1)
C(17)	3414(2)	-1247(2)	7986(1)	37(1)
C(18)	4072(2)	-982(2)	7367(1)	53(1)
C(19)	5099(2)	-456(2)	7467(1)	56(1)
C(20)	5464(1)	-210(2)	8187(1)	51(1)
C(21)	4812(1)	-486(2)	8811(1)	34(1)
C(22)	3107(1)	-2706(2)	9754(1)	28(1)
C(23)	2633(2)	-3743(2)	9190(1)	54(1)
C(24)	2445(2)	-2801(2)	10491(1)	45(1)
C(25)	4275(1)	-3104(2)	9935(1)	53(1)
Si	2036(1)	1474(1)	9260(1)	22(1)

Tab. 8.40 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von **157**.

Atom	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
C(1)	32(1)	28(1)	30(1)	4(1)	5(1)	0(1)
C(2)	27(1)	21(1)	19(1)	-1(1)	5(1)	5(1)
C(3)	29(1)	27(1)	32(1)	4(1)	2(1)	1(1)
C(4)	36(1)	41(1)	33(1)	11(1)	-3(1)	7(1)
C(5)	28(1)	51(1)	28(1)	-3(1)	-2(1)	0(1)
C(6)	37(1)	36(1)	36(1)	-1(1)	-1(1)	-9(1)
C(7)	35(1)	27(1)	29(1)	4(1)	-2(1)	-1(1)
C(8)	25(1)	19(1)	24(1)	4(1)	2(1)	-3(1)
C(9)	26(1)	30(1)	31(1)	-1(1)	2(1)	0(1)
C(10)	39(1)	33(1)	40(1)	-7(1)	12(1)	1(1)
C(11)	60(1)	32(1)	28(1)	-6(1)	7(1)	-14(1)
C(12)	49(1)	38(1)	28(1)	1(1)	-10(1)	-10(1)
C(13)	32(1)	33(1)	33(1)	3(1)	-2(1)	-1(1)
C(14)	24(1)	28(1)	25(1)	5(1)	4(1)	2(1)
C(15)	19(1)	23(1)	24(1)	0(1)	-5(1)	0(1)
C(16)	26(1)	19(1)	26(1)	0(1)	-2(1)	7(1)
C(17)	49(1)	33(1)	30(1)	-2(1)	-10(1)	2(1)
C(18)	92(2)	46(1)	22(1)	-3(1)	3(1)	16(1)
C(19)	69(1)	57(1)	43(1)	8(1)	33(1)	21(1)
C(20)	33(1)	61(1)	59(1)	12(1)	16(1)	9(1)
C(21)	27(1)	42(1)	32(1)	2(1)	1(1)	3(1)
C(22)	27(1)	21(1)	36(1)	3(1)	-2(1)	3(1)
C(23)	78(1)	26(1)	59(1)	0(1)	-6(1)	-10(1)
C(24)	53(1)	35(1)	48(1)	21(1)	10(1)	9(1)
C(25)	38(1)	42(1)	80(2)	27(1)	-4(1)	13(1)
Si	24(1)	21(1)	23(1)	2(1)	3(1)	2(1)

8.2.3.2 Kristallstruktur von 159

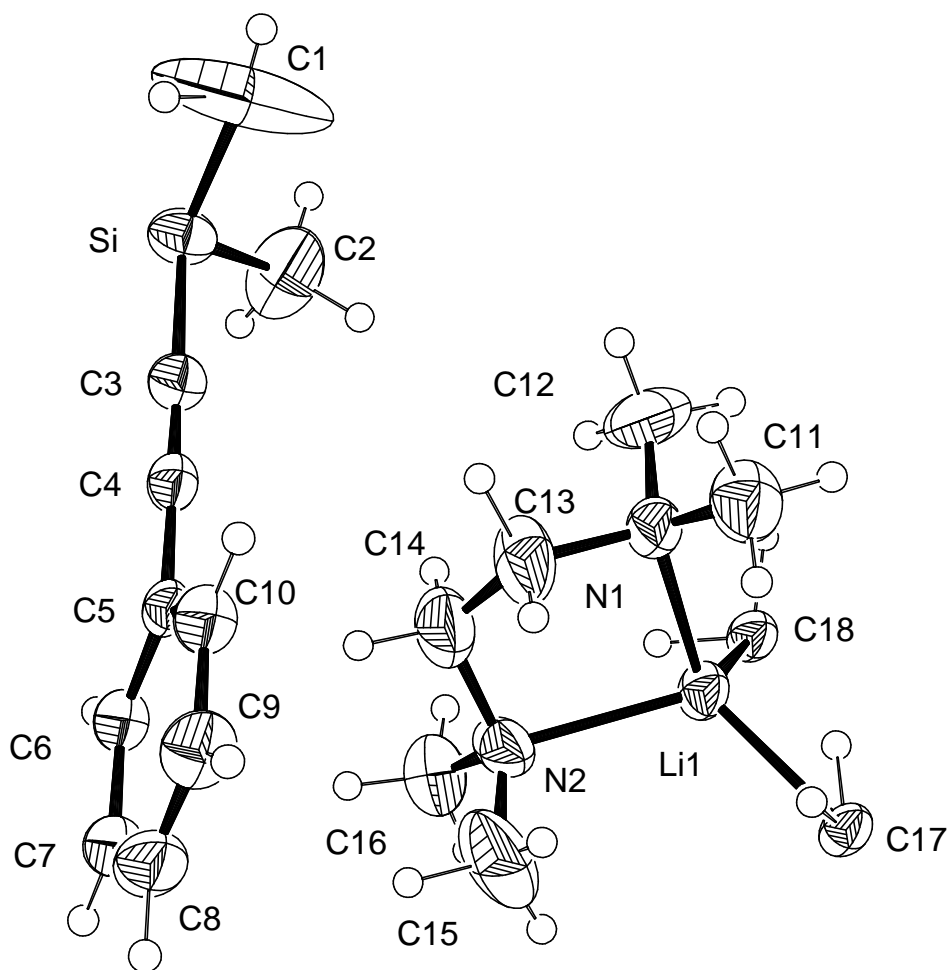


Abb. 8.21 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung **159** im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.41 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von **159**.

Atom	x	y	z	U(eq)
C(1)	0	5838(3)	9660(6)	170(7)
C(2)	1000(2)	5677(2)	7158(5)	87(1)
C(3)	0	4536(1)	8286(3)	38(1)
C(4)	0	3941(2)	8381(3)	33(1)
C(5)	0	3228(1)	8468(3)	31(1)
C(6)	0	2846(2)	7354(3)	37(1)
C(7)	0	2156(2)	7427(4)	47(1)
C(8)	0	1854(2)	8586(4)	54(1)
C(9)	0	2221(2)	9722(4)	50(1)
C(10)	0	2910(2)	9649(4)	42(1)
C(11)	3563(2)	4000(2)	10411(3)	65(1)
C(12)	3352(2)	4824(2)	8816(4)	76(1)
C(13)	2455(2)	3839(2)	8792(3)	75(1)
C(14)	2289(2)	3731(2)	7397(4)	82(1)
C(15)	2847(3)	2565(2)	7098(4)	93(1)
C(16)	2821(2)	3350(2)	5446(4)	81(1)
C(17)	5000	2777(1)	8585(3)	34(1)
C(18)	5000	4313(1)	6545(3)	37(1)
Li(1)	4196(2)	3612(2)	7713(4)	38(1)
N(1)	3334(1)	4119(1)	9067(2)	45(1)
N(2)	2939(1)	3266(1)	6827(2)	56(1)

Si	0	5445(1)	8091(1)	43(1)
----	---	---------	---------	-------

Tab. 8.42 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von 159.

Atom	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
C(1)	420(20)	43(3)	43(3)	-5(2)	0	0
C(2)	59(2)	58(2)	145(4)	37(2)	9(2)	-7(2)
C(3)	37(2)	38(2)	39(2)	-3(2)	0	0
C(4)	26(1)	40(2)	33(2)	0(1)	0	0
C(5)	21(1)	31(1)	40(2)	3(1)	0	0
C(6)	33(2)	42(2)	37(2)	2(1)	0	0
C(7)	36(2)	40(2)	63(3)	-8(2)	0	0
C(8)	50(2)	34(2)	77(3)	7(2)	0	0
C(9)	56(2)	45(2)	50(2)	17(2)	0	0
C(10)	39(2)	47(2)	41(2)	1(2)	0	0
C(11)	57(2)	86(2)	51(2)	-7(1)	1(1)	2(2)
C(12)	85(2)	58(2)	84(3)	-10(2)	5(2)	29(2)
C(13)	32(1)	128(3)	65(2)	-36(2)	8(1)	-4(2)
C(14)	41(2)	109(3)	95(3)	-42(2)	-8(2)	1(2)
C(15)	89(3)	82(2)	108(3)	12(2)	-23(2)	-52(2)
C(16)	67(2)	88(2)	88(3)	-11(2)	-28(2)	2(2)
C(17)	27(1)	24(1)	51(2)	7(1)	0	0
C(18)	30(1)	32(1)	49(2)	2(1)	0	0
Li(1)	26(2)	40(2)	48(2)	2(2)	1(1)	-2(1)
N(1)	34(1)	54(1)	46(1)	-10(1)	-1(1)	4(1)
N(2)	36(1)	58(1)	75(2)	-28(1)	6(1)	-8(1)
Si	58(1)	33(1)	37(1)	2(1)	0	0

8.2.4 Kristallstrukturen Kapitel 4.4

8.2.4.1 Kristallstruktur von (*R,S*)-165

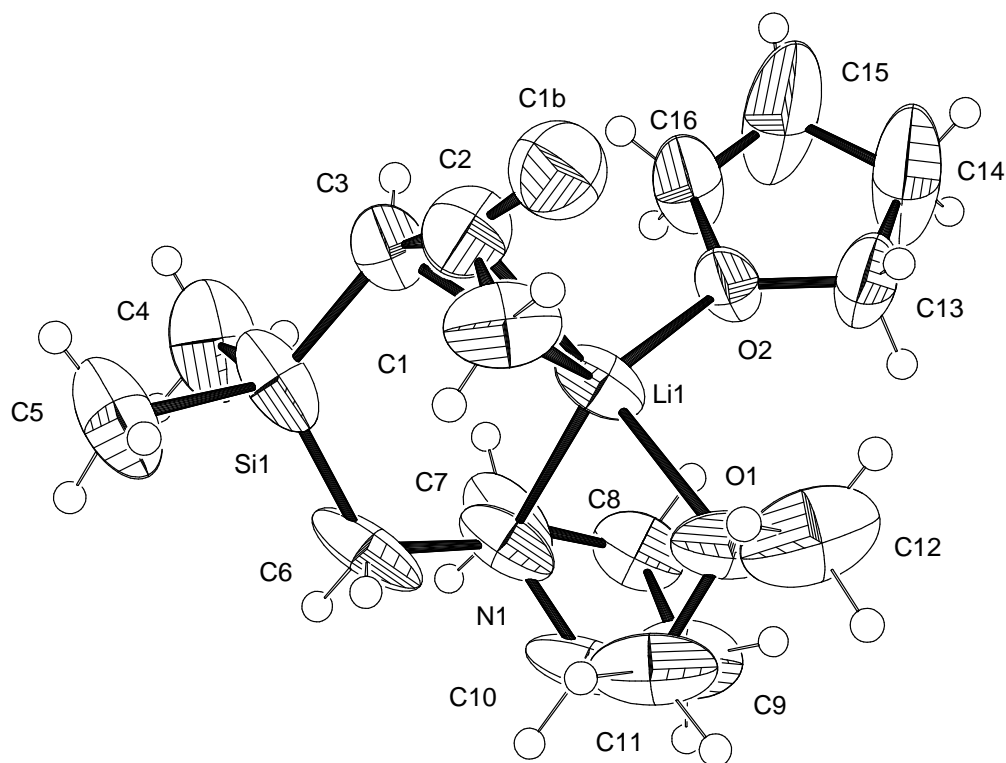


Abb. 8.22 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung (*R,S*)-165 im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.43 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von (*R,S*)-165.

Atom	x	y	z	U(eq)
C(1B)	10780(40)	6430(40)	4490(40)	87(15)
C(1)	10258(10)	6782(10)	3024(14)	70(3)
C(2)	10338(7)	5719(6)	3670(8)	72(2)
C(3)	9711(7)	4528(5)	3332(6)	57(2)
C(4)	8279(8)	2251(5)	1879(7)	100(2)
C(5)	10302(7)	3974(8)	464(5)	104(2)
C(6)	7339(6)	5002(6)	941(5)	79(2)
C(7)	5246(6)	4515(6)	2184(5)	78(2)
C(8)	4065(7)	5220(5)	2790(5)	71(2)
C(9)	3908(6)	6491(6)	2050(6)	82(2)
C(10)	5295(6)	6541(7)	1306(5)	80(2)
C(11)	6174(6)	7774(6)	1499(6)	81(2)
C(12)	7573(7)	9079(5)	3124(7)	105(2)
C(13)	6649(7)	6990(5)	5959(5)	76(2)
C(14)	6567(11)	6438(6)	7243(7)	149(4)
C(15)	7204(15)	5120(8)	7146(8)	198(6)
C(16)	7310(10)	4900(5)	5952(5)	95(2)
Li(1)	7817(10)	6184(8)	3481(8)	57(2)
N(1)	6308(5)	5496(5)	1840(4)	64(1)
O(1)	6761(4)	7895(3)	2833(4)	72(1)
O(2)	7109(4)	6035(3)	5174(3)	62(1)
Si(1)	8961(2)	3965(2)	1741(2)	71(1)

Tab. 8.44 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von (*R,S*)-165.

Atom	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
C(1)	50(5)	59(6)	95(9)	15(7)	-13(6)	-38(5)
C(2)	52(4)	63(6)	97(5)	-22(4)	-7(4)	-14(3)
C(3)	82(4)	39(3)	55(4)	5(3)	23(3)	-12(3)
C(4)	112(5)	63(4)	132(6)	-43(4)	42(5)	-55(4)
C(5)	109(5)	140(6)	73(4)	-39(5)	39(4)	-32(5)
C(6)	64(4)	140(5)	29(3)	-5(3)	-4(3)	-67(4)
C(7)	73(4)	107(5)	62(4)	-18(3)	33(3)	-64(4)
C(8)	71(4)	81(4)	64(4)	17(3)	20(3)	-33(3)
C(9)	44(3)	108(5)	90(5)	28(4)	-2(3)	-39(3)
C(10)	47(3)	140(6)	45(3)	29(4)	-22(3)	-46(4)
C(11)	55(4)	103(5)	83(5)	58(4)	2(3)	-28(4)
C(12)	92(4)	53(4)	159(6)	38(4)	-21(4)	-35(3)
C(13)	108(5)	50(3)	78(4)	7(3)	44(4)	24(3)
C(14)	294(11)	66(5)	118(6)	24(4)	129(7)	55(6)
C(15)	402(18)	113(6)	116(7)	80(6)	155(9)	150(9)
C(16)	204(8)	34(3)	57(4)	21(3)	47(5)	25(4)
Li(1)	67(6)	60(5)	41(5)	1(4)	0(4)	-35(4)
N(1)	61(3)	97(4)	34(2)	5(2)	10(2)	-43(3)
O(1)	85(3)	51(2)	71(3)	35(2)	-15(2)	-30(2)
O(2)	116(3)	35(2)	36(2)	9(2)	17(2)	7(2)
Si(1)	81(1)	86(1)	53(1)	-25(1)	29(1)	-51(1)

8.2.4.2 Kristallstruktur von (R,S)-166

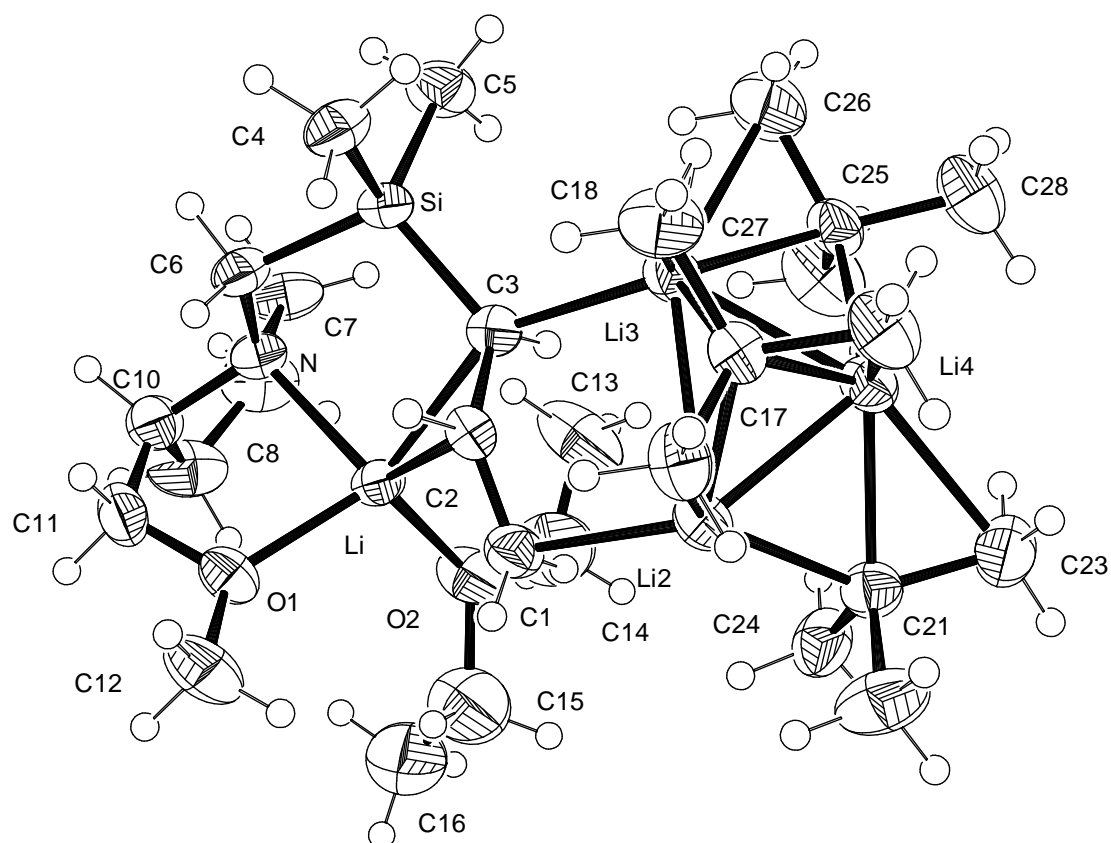


Abb. 8.23 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung (R,S)-166 im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.45 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von (R,S)-166.

Atom	x	y	z	U(eq)
C(1)	3593(3)	1613(2)	398(2)	42(1)
C(2)	2270(2)	1761(2)	303(2)	33(1)
C(3)	1548(2)	2622(2)	281(2)	33(1)
C(4)	-1229(2)	1755(2)	144(2)	46(1)
C(5)	-1013(3)	3889(2)	-263(2)	53(1)
C(6)	-630(2)	2361(2)	-1941(2)	41(1)
C(7)	-132(3)	3829(2)	-2798(3)	54(1)
C(8)	518(4)	4090(2)	-3716(3)	67(1)
C(9)	868(3)	3154(2)	-4147(3)	65(1)
C(10)	190(3)	2411(2)	-3619(2)	49(1)
C(11)	829(3)	1442(2)	-3487(2)	51(1)
C(12)	2716(3)	554(2)	-2440(3)	66(1)
C(13)	3338(4)	4760(2)	-809(3)	87(1)
C(14)	4236(4)	4200(2)	-1174(4)	95(1)
C(15)	5031(4)	2676(3)	-1576(3)	91(1)
C(16)	5227(4)	2822(4)	-2648(3)	104(1)
C(17)	3059(2)	1488(2)	3342(2)	36(1)
C(18)	1522(3)	1418(2)	3120(3)	56(1)
C(19)	3530(3)	489(2)	3128(2)	45(1)
C(20)	3688(3)	1687(2)	4602(2)	52(1)
C(21)	6167(2)	2581(2)	3104(2)	42(1)
C(22)	7012(3)	1659(2)	3405(3)	72(1)
C(23)	6698(3)	3240(2)	4117(2)	58(1)
C(24)	6538(3)	3053(2)	2132(2)	55(1)
C(25)	2821(3)	4086(2)	3087(2)	41(1)
C(26)	1293(4)	4176(3)	2799(3)	80(1)

C(27)	3285(4)	4812(2)	2377(3)	74(1)
C(28)	3363(3)	4403(2)	4319(3)	67(1)
Li	2235(3)	2494(3)	-1460(3)	36(1)
Li(2)	4400(4)	1714(3)	2295(3)	39(1)
Li(3)	2138(4)	2725(3)	2192(3)	40(1)
Li(4)	4304(4)	2950(3)	3548(3)	41(1)
N	253(2)	2833(2)	-2513(2)	37(1)
O(1)	2083(2)	1466(1)	-2602(1)	44(1)
O(2)	3830(2)	3272(1)	-1479(2)	57(1)
Si	-282(1)	2682(1)	-392(1)	33(1)

Tab. 8.46 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von (R,S)-166.

Atom	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
C(1)	43(2)	49(2)	35(1)	1(1)	14(1)	8(2)
C(2)	39(1)	30(1)	30(1)	-2(1)	12(1)	-1(1)
C(3)	35(1)	26(1)	41(1)	2(1)	15(1)	-3(1)
C(4)	32(1)	56(2)	51(2)	6(1)	14(1)	-2(1)
C(5)	53(2)	50(2)	56(2)	7(2)	16(1)	21(2)
C(6)	28(1)	49(2)	48(2)	1(1)	14(1)	-1(1)
C(7)	42(2)	53(2)	71(2)	23(2)	24(1)	19(1)
C(8)	72(2)	68(2)	65(2)	28(2)	30(2)	17(2)
C(9)	67(2)	86(2)	52(2)	28(2)	32(2)	23(2)
C(10)	45(2)	70(2)	32(1)	-1(1)	12(1)	5(1)
C(11)	56(2)	57(2)	44(2)	-19(2)	22(2)	-17(2)
C(12)	98(2)	36(2)	70(2)	0(2)	35(2)	21(2)
C(13)	129(3)	53(2)	117(3)	-26(2)	93(3)	-33(2)
C(14)	84(3)	49(2)	157(4)	-21(2)	43(3)	-15(2)
C(15)	85(2)	85(3)	117(3)	-16(3)	53(2)	-25(3)
C(16)	83(2)	136(4)	98(3)	-18(3)	36(2)	4(3)
C(17)	45(2)	31(1)	34(1)	2(1)	14(1)	-2(1)
C(18)	61(2)	54(2)	64(2)	11(2)	34(2)	-4(2)
C(19)	61(2)	31(2)	43(2)	0(1)	12(1)	-6(1)
C(20)	75(2)	45(2)	41(2)	5(1)	25(1)	-1(2)
C(21)	41(1)	39(2)	47(1)	1(1)	15(1)	2(1)
C(22)	52(2)	55(2)	109(3)	14(2)	23(2)	14(2)
C(23)	53(2)	65(2)	50(2)	-3(2)	8(2)	-5(2)
C(24)	44(2)	62(2)	56(2)	-2(1)	11(1)	-14(1)
C(25)	51(2)	30(1)	43(2)	-7(1)	14(1)	5(1)
C(26)	77(3)	71(3)	89(3)	-27(2)	20(2)	24(2)
C(27)	119(3)	31(2)	80(2)	10(2)	42(2)	6(2)
C(28)	90(3)	47(2)	64(2)	-22(2)	25(2)	-4(2)
Li	29(2)	33(2)	46(2)	-1(2)	12(2)	1(2)
Li(2)	47(2)	32(2)	39(2)	-1(2)	17(2)	1(2)
Li(3)	44(2)	34(2)	41(2)	-2(2)	13(2)	7(2)
Li(4)	46(2)	37(3)	42(2)	-6(2)	16(2)	1(2)
N	32(1)	39(1)	42(1)	4(1)	15(1)	1(1)
O(1)	57(1)	32(1)	47(1)	-2(1)	20(1)	6(1)
O(2)	61(1)	42(1)	86(1)	-16(1)	48(1)	-20(1)
Si	30(1)	33(1)	41(1)	2(1)	15(1)	2(1)

8.2.5 Kristallstrukturen Kapitel 4.5

8.2.5.1 Kristallstruktur von [(S)-171·MeLi]₂

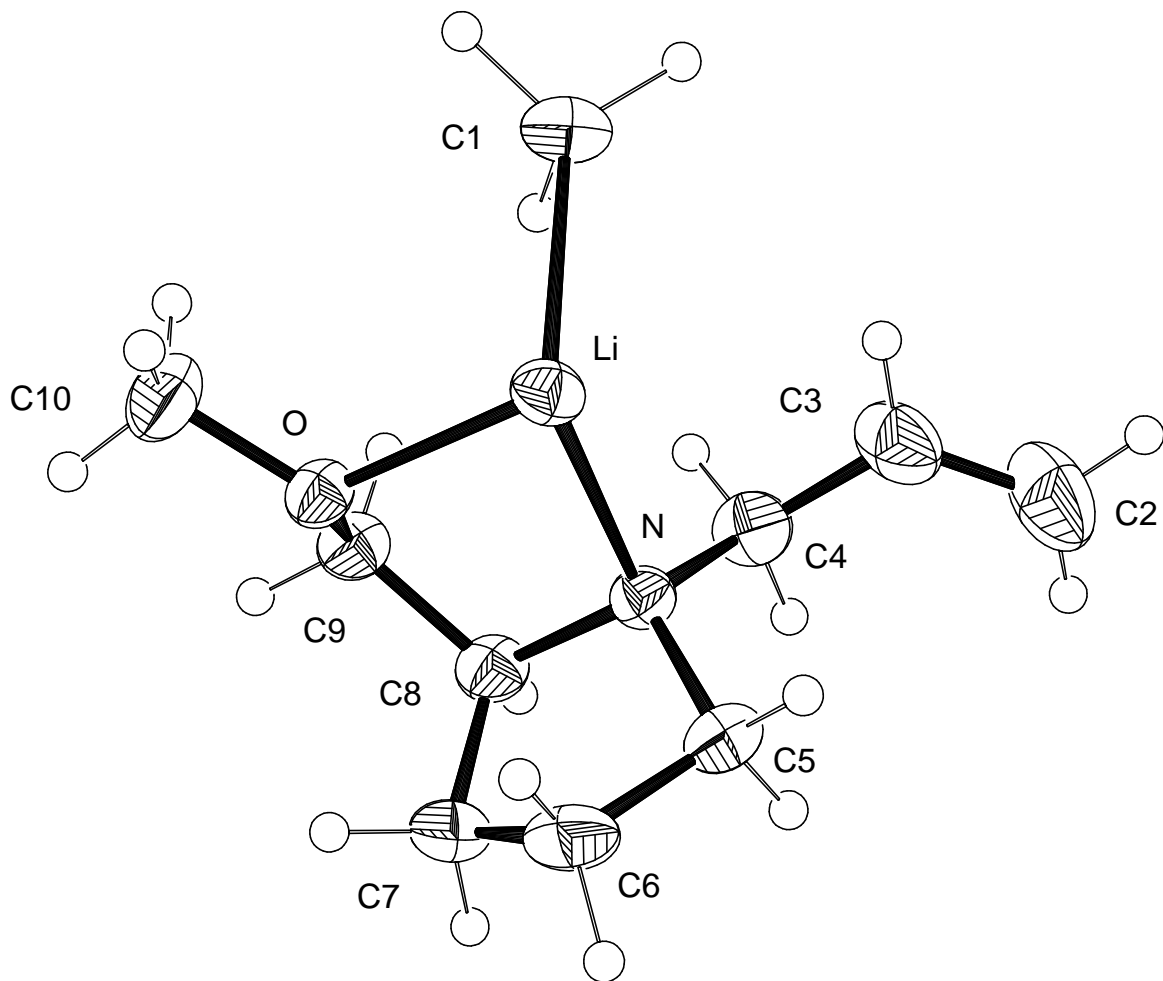


Abb. 8.24 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung [(S)-171·MeLi]₂ im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.47 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von [(S)-171·MeLi]₂.

Atom	x	y	z	U(eq)
C(1)	8264(2)	10956(1)	8010(2)	24(1)
C(2)	7841(2)	9158(2)	4077(2)	69(1)
C(3)	7654(2)	9377(1)	5223(1)	53(1)
C(4)	6534(2)	8789(1)	6047(1)	42(1)
C(5)	8472(2)	7367(1)	6430(1)	38(1)
C(6)	8811(2)	6658(1)	7480(1)	46(1)
C(7)	7144(2)	6633(1)	8125(1)	46(1)
C(8)	6354(2)	7695(1)	7853(1)	35(1)
C(9)	6178(2)	8368(1)	8960(1)	34(1)
C(10)	7787(2)	9023(1)	10571(1)	48(1)
Li	9042(3)	9270(2)	8031(2)	31(1)
N	7473(1)	8209(1)	6961(1)	29(1)
O	7808(1)	8567(1)	9407(1)	31(1)

Tab. 8.48 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von [(S)-171-MeLi]₂.

Atom	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
C(1)	16(1)	17(1)	40(1)	-2(1)	-1(1)	-3(1)
C(2)	77(1)	82(1)	48(1)	24(1)	-13(1)	-17(1)
C(3)	64(1)	46(1)	48(1)	14(1)	-17(1)	-5(1)
C(4)	43(1)	41(1)	43(1)	1(1)	-12(1)	7(1)
C(5)	38(1)	36(1)	41(1)	-9(1)	1(1)	3(1)
C(6)	50(1)	30(1)	59(1)	-3(1)	-5(1)	9(1)
C(7)	64(1)	28(1)	46(1)	-1(1)	1(1)	-6(1)
C(8)	31(1)	35(1)	39(1)	-4(1)	0(1)	-8(1)
C(9)	27(1)	37(1)	39(1)	-3(1)	4(1)	-6(1)
C(10)	49(1)	57(1)	37(1)	-13(1)	2(1)	-10(1)
Li	30(1)	27(1)	37(1)	2(1)	1(1)	-2(1)
N	30(1)	28(1)	30(1)	-1(1)	-2(1)	3(1)
O	28(1)	34(1)	31(1)	-5(1)	1(1)	-5(1)

8.2.5.2 Kristallstruktur von (181)₂

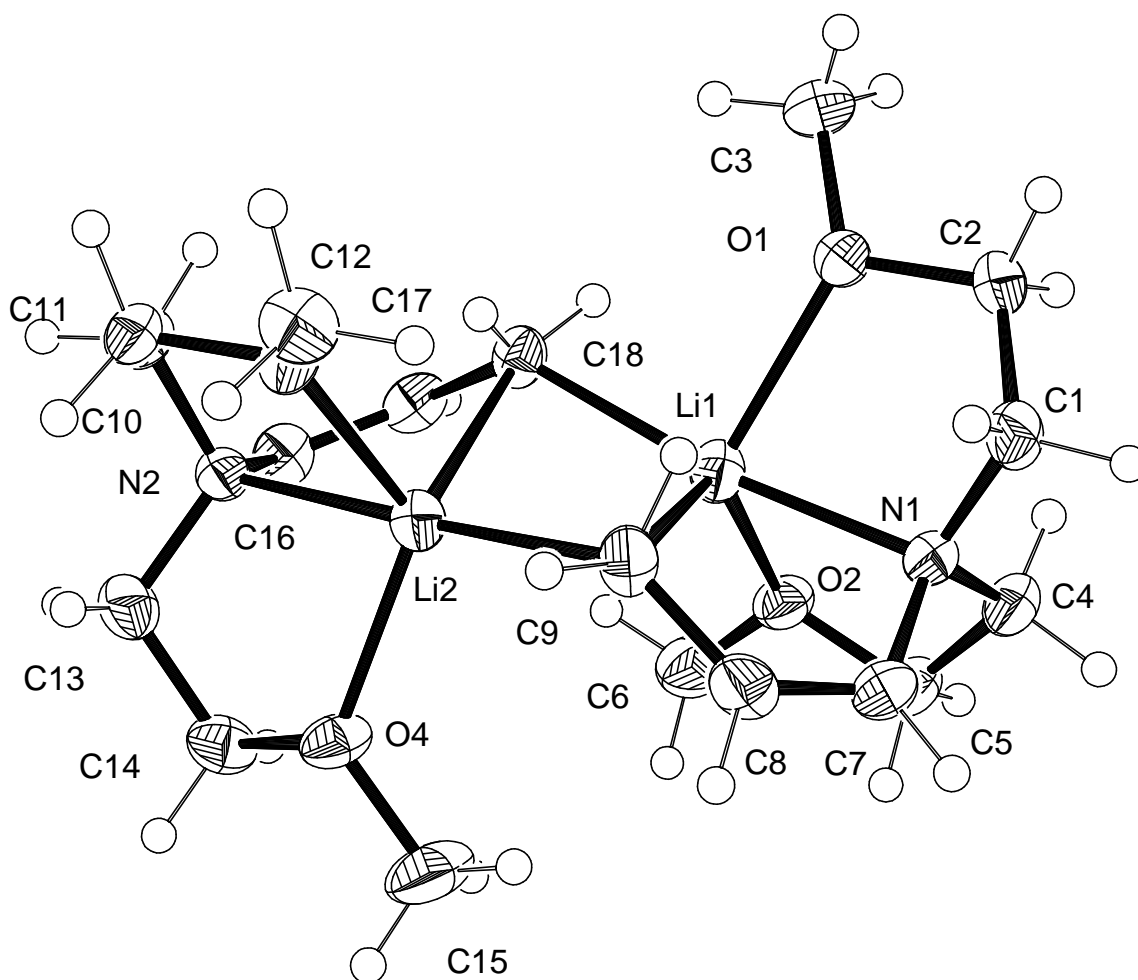


Abb. 8.25 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung (181)₂ im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.49 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von **(181)₂**.

Atom	x	y	z	U(eq)
C(1)	-1664(3)	-1254(2)	3263(2)	33(1)
Li(1)	-72(5)	1116(4)	2296(3)	30(1)
N(1)	-2251(2)	-664(2)	2289(2)	27(1)
O(1)	1254(2)	105(1)	3464(1)	32(1)
C(2)	108(3)	-1202(2)	3431(2)	32(1)
Li(2)	621(5)	3733(4)	3047(3)	29(1)
N(2)	2465(2)	5477(2)	2715(1)	26(1)
O(2)	-1320(2)	389(2)	565(1)	32(1)
C(3)	3021(3)	295(3)	3884(2)	44(1)
O(3)	2303(2)	4810(1)	4775(1)	30(1)
C(4)	-2829(3)	-1517(2)	1178(2)	36(1)
O(4)	-1092(2)	4414(2)	2037(1)	32(1)
C(5)	-2938(3)	-755(2)	223(2)	36(1)
C(6)	-1277(3)	1161(3)	-289(2)	43(1)
C(7)	-3514(3)	-200(2)	2367(2)	35(1)
C(8)	-2958(3)	1017(2)	2950(2)	35(1)
C(9)	-1196(3)	1982(2)	3531(2)	31(1)
C(10)	3982(3)	6142(2)	3789(2)	31(1)
C(11)	3436(3)	6130(2)	4815(2)	31(1)
C(12)	1988(3)	4680(2)	5827(2)	37(1)
C(13)	1523(3)	6279(2)	2351(2)	36(1)
C(14)	-296(3)	5444(2)	1519(2)	35(1)
C(15)	-2847(3)	3584(3)	1315(2)	52(1)
C(16)	2872(3)	4998(2)	1798(2)	32(1)
C(17)	2839(3)	3798(2)	1700(2)	31(1)
C(18)	2428(3)	2855(2)	2403(2)	29(1)

Tab. 8.50 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von **(181)₂**.

Atom	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
C(1)	30(1)	28(1)	45(1)	15(1)	20(1)	10(1)
Li(1)	32(2)	25(2)	30(2)	4(2)	11(2)	10(2)
N(1)	21(1)	25(1)	32(1)	4(1)	8(1)	8(1)
O(1)	23(1)	28(1)	44(1)	12(1)	10(1)	9(1)
C(2)	33(1)	25(1)	37(1)	12(1)	13(1)	12(1)
Li(2)	30(2)	25(2)	31(2)	6(2)	11(2)	11(2)
N(2)	23(1)	25(1)	29(1)	7(1)	10(1)	10(1)
O(2)	27(1)	34(1)	27(1)	5(1)	4(1)	9(1)
C(3)	24(1)	43(2)	57(2)	10(1)	6(1)	14(1)
O(3)	35(1)	28(1)	23(1)	4(1)	11(1)	9(1)
C(4)	28(1)	27(1)	42(1)	0(1)	7(1)	6(1)
O(4)	24(1)	43(1)	24(1)	10(1)	5(1)	11(1)
C(5)	29(1)	34(1)	34(1)	-2(1)	3(1)	8(1)
C(6)	39(1)	51(2)	35(1)	14(1)	10(1)	17(1)
C(7)	21(1)	35(1)	50(2)	11(1)	14(1)	10(1)
C(8)	29(1)	38(2)	54(2)	20(1)	26(1)	20(1)
C(9)	32(1)	26(1)	40(1)	7(1)	20(1)	12(1)
C(10)	23(1)	27(1)	36(1)	3(1)	8(1)	5(1)
C(11)	26(1)	26(1)	31(1)	-2(1)	4(1)	8(1)
C(12)	44(1)	44(2)	28(1)	9(1)	16(1)	22(1)
C(13)	38(1)	30(1)	41(1)	16(1)	15(1)	16(1)
C(14)	37(1)	42(2)	30(1)	16(1)	11(1)	22(1)
C(15)	28(1)	64(2)	44(2)	14(1)	-1(1)	9(1)
C(16)	33(1)	34(1)	30(1)	12(1)	18(1)	11(1)
C(17)	26(1)	38(1)	28(1)	2(1)	14(1)	10(1)
C(18)	29(1)	26(1)	32(1)	2(1)	14(1)	10(1)

8.2.5.3 Kristallstruktur von 183

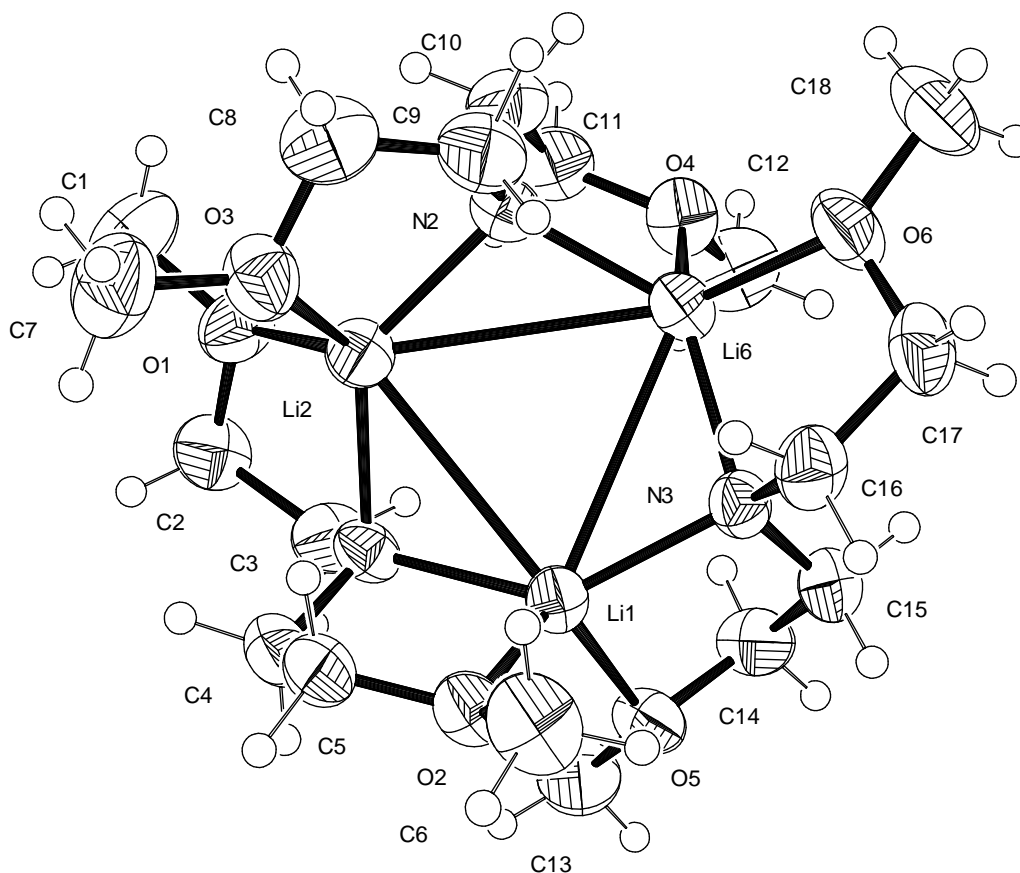


Abb. 8.26 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung **183** im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.51 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von **183**.

Atom	x	y	z	U(eq)
C(1)	6224(3)	-524(3)	2462(3)	84(1)
C(2)	5273(2)	-1069(2)	3555(2)	61(1)
C(3)	4157(2)	-968(2)	3814(2)	57(1)
C(4)	2883(3)	-1938(2)	2754(2)	58(1)
C(5)	1806(2)	-2025(2)	1909(2)	53(1)
C(6)	-134(3)	-1585(2)	1386(2)	69(1)
C(7)	3726(3)	-1385(2)	189(3)	78(1)
C(8)	3200(3)	43(2)	48(2)	68(1)
C(9)	2612(3)	664(2)	463(2)	65(1)
C(10)	3959(3)	1450(2)	1743(2)	65(1)
C(11)	4249(2)	1681(2)	2813(2)	63(1)
C(12)	3346(3)	2211(2)	3969(2)	76(1)
C(13)	2068(3)	-899(3)	5114(2)	71(1)
C(14)	1202(3)	360(2)	4380(2)	56(1)
C(15)	390(3)	690(2)	3437(2)	56(1)
C(16)	-110(2)	688(2)	1697(2)	54(1)
C(17)	-318(3)	1592(2)	1421(2)	61(1)
C(18)	708(4)	2774(3)	1112(2)	82(1)
Li(1)	1610(4)	-575(3)	2928(3)	41(1)
Li(2)	3549(4)	-338(3)	2012(3)	46(1)
Li(6)	1987(4)	1193(3)	2197(3)	45(1)

N(1)	3129(2)	-1065(2)	2987(1)	42(1)
N(2)	3093(2)	813(2)	1518(1)	46(1)
N(3)	793(2)	519(1)	2608(1)	42(1)
O(1)	5238(2)	-493(1)	2787(1)	60(1)
O(2)	913(2)	-1593(1)	2166(1)	47(1)
O(3)	3294(2)	-710(1)	592(1)	59(1)
O(4)	3219(2)	1958(1)	2998(1)	56(1)
O(5)	1331(2)	-509(1)	4263(1)	51(1)
O(6)	745(2)	1923(2)	1360(1)	62(1)

Tab. 8.52 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von **183**.

Atom	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
C(1)	54(2)	123(4)	78(2)	-8(2)	25(2)	-8(2)
C(2)	41(2)	67(3)	63(2)	14(2)	-2(1)	5(2)
C(3)	49(2)	68(3)	45(1)	16(1)	2(1)	4(2)
C(4)	51(2)	42(3)	81(2)	8(2)	20(2)	7(2)
C(5)	59(2)	36(2)	69(2)	-11(1)	24(1)	-8(1)
C(6)	55(2)	66(3)	67(2)	-10(2)	-11(1)	-6(2)
C(7)	76(2)	80(4)	85(2)	-27(2)	33(2)	-5(2)
C(8)	72(2)	86(3)	41(2)	-1(2)	10(1)	-6(2)
C(9)	74(2)	71(3)	47(2)	17(2)	12(2)	10(2)
C(10)	63(2)	62(3)	73(2)	3(2)	27(2)	-10(2)
C(11)	46(2)	57(3)	81(2)	-6(2)	12(2)	-18(2)
C(12)	75(2)	92(3)	55(2)	-15(2)	9(2)	-18(2)
C(13)	87(2)	80(3)	50(2)	15(2)	26(2)	7(2)
C(14)	73(2)	51(3)	49(2)	-9(1)	25(1)	-10(2)
C(15)	59(2)	46(2)	68(2)	-2(1)	26(2)	7(2)
C(16)	36(2)	61(3)	59(2)	-3(2)	4(1)	2(1)
C(17)	50(2)	64(3)	61(2)	9(2)	6(1)	22(2)
C(18)	121(3)	49(3)	76(2)	18(2)	27(2)	24(2)
Li(1)	39(2)	40(3)	43(2)	-3(2)	9(2)	0(2)
Li(2)	45(2)	50(4)	40(2)	4(2)	8(2)	3(2)
Li(6)	44(2)	38(4)	48(2)	1(2)	7(2)	1(2)
N(1)	40(1)	36(2)	44(1)	6(1)	4(1)	1(1)
N(2)	51(1)	43(2)	43(1)	4(1)	12(1)	-1(1)
N(3)	37(1)	40(2)	46(1)	0(1)	8(1)	2(1)
O(1)	43(1)	78(2)	57(1)	12(1)	13(1)	5(1)
O(2)	43(1)	42(2)	50(1)	-3(1)	5(1)	-3(1)
O(3)	72(2)	56(2)	49(1)	-5(1)	17(1)	9(1)
O(4)	51(1)	54(2)	57(1)	-11(1)	6(1)	-3(1)
O(5)	68(1)	41(2)	45(1)	0(1)	18(1)	-3(1)
O(6)	61(1)	45(2)	73(1)	16(1)	9(1)	14(1)

8.2.5.4 Kristallstruktur von 184

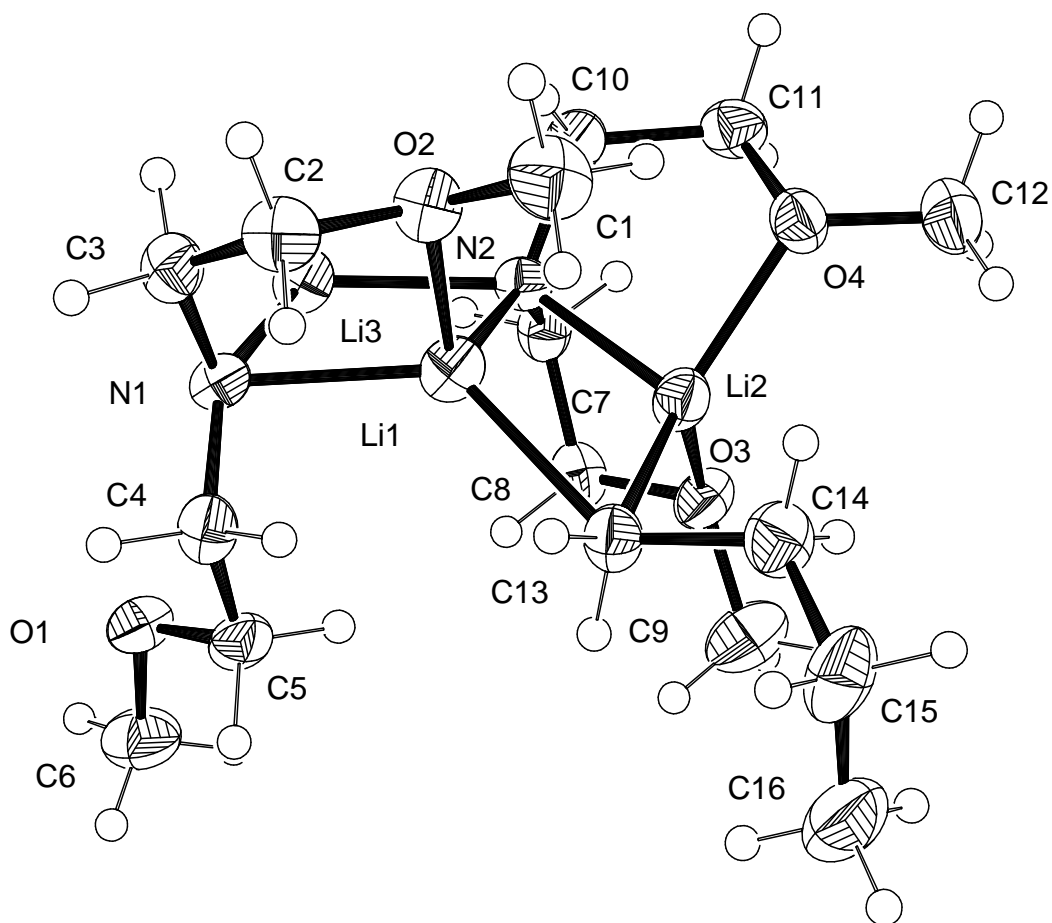


Abb. 8.27 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung **184** im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.53 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von **184**.

Atom	x	y	z	U(eq)
C(1)	993(2)	2938(1)	2980(1)	49(1)
C(2)	-359(2)	4118(1)	2655(1)	40(1)
C(3)	-564(2)	4772(1)	1899(1)	35(1)
C(4)	-2313(2)	4180(1)	796(1)	34(1)
C(5)	-2692(2)	3974(1)	-241(1)	36(1)
C(6)	-3301(2)	4589(1)	-1741(1)	50(1)
C(7)	2482(2)	3442(1)	-880(1)	36(1)
C(8)	1407(2)	2964(1)	-1490(1)	37(1)
C(9)	459(2)	1655(1)	-1662(1)	58(1)
C(10)	3445(2)	3445(1)	760(1)	35(1)
C(11)	4278(2)	2659(1)	759(1)	37(1)
C(12)	3968(2)	1285(1)	1011(1)	48(1)
C(13)	-749(2)	2189(1)	810(2)	34(1)
C(14)	-291(2)	1344(1)	1097(1)	43(1)
C(15)	-1493(2)	731(1)	1247(2)	55(1)
C(16)	-2308(2)	492(1)	341(2)	67(1)
Li(1)	253(3)	3388(2)	936(2)	34(1)
Li(2)	1404(3)	2301(2)	267(2)	34(1)
Li(3)	1145(3)	4595(2)	176(2)	35(1)
N(1)	-826(2)	4511(1)	899(1)	26(1)
N(2)	2099(2)	3453(1)	140(1)	28(1)

O(1)	-2633(1)	4682(1)	-802(1)	36(1)
O(2)	766(1)	3597(1)	2346(1)	36(1)
O(3)	1455(1)	2165(1)	-1139(1)	37(1)
O(4)	3276(1)	2042(1)	998(1)	35(1)

Tab. 8.54 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von **184**.

Atom	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
C(1)	58(2)	51(2)	38(1)	13(1)	0(1)	-1(1)
C(2)	39(2)	50(1)	30(1)	-2(1)	10(1)	-3(1)
C(3)	30(1)	38(1)	37(1)	-4(1)	12(1)	2(1)
C(4)	34(1)	30(1)	40(1)	3(1)	14(1)	1(1)
C(5)	27(1)	33(1)	49(2)	-7(1)	7(1)	-11(1)
C(6)	49(2)	60(2)	41(1)	-11(1)	-6(1)	-6(1)
C(7)	34(1)	32(1)	42(1)	2(1)	8(1)	3(1)
C(8)	45(2)	38(1)	28(1)	4(1)	6(1)	6(1)
C(9)	73(2)	53(2)	49(2)	-15(1)	2(1)	-16(1)
C(10)	31(1)	37(1)	38(1)	-3(1)	12(1)	-4(1)
C(11)	29(1)	42(1)	39(1)	-3(1)	3(1)	-2(1)
C(12)	44(1)	41(1)	59(2)	3(1)	0(1)	10(1)
C(13)	35(1)	29(1)	40(2)	3(1)	7(1)	3(1)
C(14)	43(2)	39(1)	47(1)	7(1)	3(1)	-2(1)
C(15)	70(2)	32(1)	64(2)	5(1)	16(2)	-6(1)
C(16)	58(2)	45(2)	100(2)	-15(2)	19(2)	-16(1)
Li(1)	32(2)	37(2)	34(2)	-2(2)	11(2)	0(2)
Li(2)	35(2)	26(2)	40(2)	-3(2)	5(2)	-2(2)
Li(3)	40(2)	33(2)	34(2)	-1(2)	11(2)	-5(2)
N(1)	24(1)	32(1)	24(1)	-7(1)	9(1)	-6(1)
N(2)	23(1)	35(1)	25(1)	-2(1)	4(1)	-2(1)
O(1)	41(1)	33(1)	33(1)	-2(1)	-2(1)	-8(1)
O(2)	39(1)	38(1)	32(1)	1(1)	10(1)	1(1)
O(3)	48(1)	29(1)	34(1)	-4(1)	0(1)	-4(1)
O(4)	29(1)	32(1)	44(1)	3(1)	2(1)	4(1)

8.2.6 Kristallstrukturen Kapitel 4.6

8.2.6.1 Kristallstruktur von $[(R,R)\text{-188}]_2$

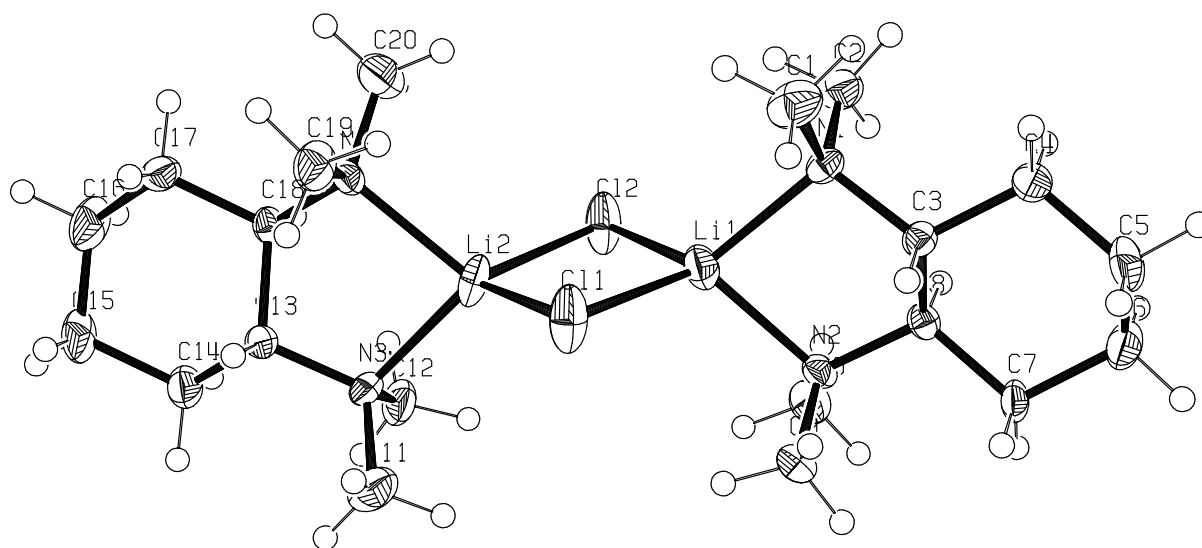


Abb. 8.28 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung $[(R,R)\text{-TMCDAlithium}]_2$ im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.55 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von $[(R,R)\text{-188}]_2$.

Atom	x	y	z	U(eq)
C(1)	3820(4)	4218(3)	5164(3)	39(1)
C(2)	629(3)	2435(3)	3867(2)	33(1)
C(3)	3066(3)	1062(3)	4405(2)	20(1)
C(4)	3744(4)	1063(3)	3250(2)	29(1)
C(5)	4687(4)	-288(3)	2977(2)	35(1)
C(6)	3207(4)	-2130(3)	2945(2)	33(1)
C(7)	2542(4)	-2153(3)	4098(2)	25(1)
C(8)	1595(3)	-796(3)	4383(2)	20(1)
C(9)	2232(4)	-992(3)	6439(2)	30(1)
C(10)	-1153(3)	-2208(3)	5281(2)	31(1)
C(11)	-40(4)	1585(3)	10244(2)	42(1)
C(12)	-3351(4)	845(3)	9079(2)	34(1)
C(13)	-1491(3)	3845(3)	10390(2)	20(1)
C(14)	-2936(4)	3376(3)	11195(2)	31(1)
C(15)	-2981(4)	5048(3)	11966(2)	40(1)
C(16)	-3544(4)	6164(4)	11220(2)	43(1)
C(17)	-2108(4)	6678(3)	10440(2)	29(1)
C(18)	-1968(3)	5051(3)	9669(2)	20(1)
C(19)	1450(3)	6767(3)	9434(2)	34(1)
C(20)	-1449(4)	6084(4)	7906(2)	41(1)
Cl(1)	2809(1)	3234(1)	8030(1)	41(1)
Cl(2)	-2168(1)	1714(1)	6284(1)	41(1)
Li(1)	943(7)	1697(6)	6155(4)	29(1)
Li(2)	-320(6)	3105(5)	8195(4)	29(1)
N(1)	2234(3)	2427(2)	4774(2)	20(1)
N(2)	861(3)	-809(3)	5477(2)	21(1)
N(3)	-1359(3)	2291(2)	9624(2)	24(1)
N(4)	-591(3)	5476(3)	8862(2)	22(1)

Tab. 8.56 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von $[(R,R)\text{-188}]_2$.

Atom	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
C(1)	41(2)	24(2)	41(2)	2(1)	-2(1)	8(1)
C(2)	35(2)	33(2)	37(2)	13(1)	11(1)	18(1)
C(3)	20(1)	18(1)	22(2)	4(1)	5(1)	7(1)
C(4)	35(2)	22(2)	36(2)	13(1)	20(1)	10(1)
C(5)	35(2)	44(2)	32(2)	9(1)	22(1)	15(2)
C(6)	35(2)	32(2)	37(2)	4(1)	16(1)	18(1)
C(7)	31(2)	24(2)	24(2)	4(1)	16(1)	12(1)
C(8)	19(1)	23(1)	16(1)	4(1)	3(1)	7(1)
C(9)	41(2)	35(2)	21(2)	10(1)	7(1)	19(1)
C(10)	28(2)	32(2)	30(2)	8(1)	8(1)	6(1)
C(11)	47(2)	36(2)	45(2)	6(1)	0(1)	24(2)
C(12)	43(2)	24(2)	31(2)	-3(1)	10(1)	11(1)
C(13)	23(1)	19(1)	18(1)	3(1)	2(1)	8(1)
C(14)	41(2)	27(2)	27(2)	5(1)	15(1)	11(1)
C(15)	51(2)	34(2)	35(2)	5(1)	32(1)	10(1)
C(16)	46(2)	39(2)	54(2)	7(2)	34(2)	20(2)
C(17)	36(2)	27(2)	34(2)	13(1)	16(1)	19(1)
C(18)	18(1)	25(2)	18(1)	3(1)	4(1)	9(1)
C(19)	34(2)	32(2)	40(2)	8(1)	20(1)	12(1)
C(20)	52(2)	41(2)	32(2)	14(2)	12(2)	16(2)
Cl(1)	23(1)	61(1)	30(1)	-12(1)	0(1)	19(1)
Cl(2)	24(1)	64(1)	28(1)	-9(1)	0(1)	22(1)
Li(1)	29(3)	43(3)	21(3)	8(2)	9(2)	19(2)
Li(2)	23(3)	28(3)	31(3)	-9(2)	4(2)	12(2)
N(1)	18(1)	19(1)	23(1)	3(1)	1(1)	8(1)
N(2)	21(1)	25(1)	21(1)	10(1)	9(1)	9(1)
N(3)	31(1)	17(1)	24(1)	3(1)	5(1)	12(1)
N(4)	24(1)	24(1)	18(1)	7(1)	9(1)	8(1)

8.2.7 Kristallstrukturen Kapitel 4.8

8.2.7.1 Kristallstruktur von [(S)-195-TMEDA]

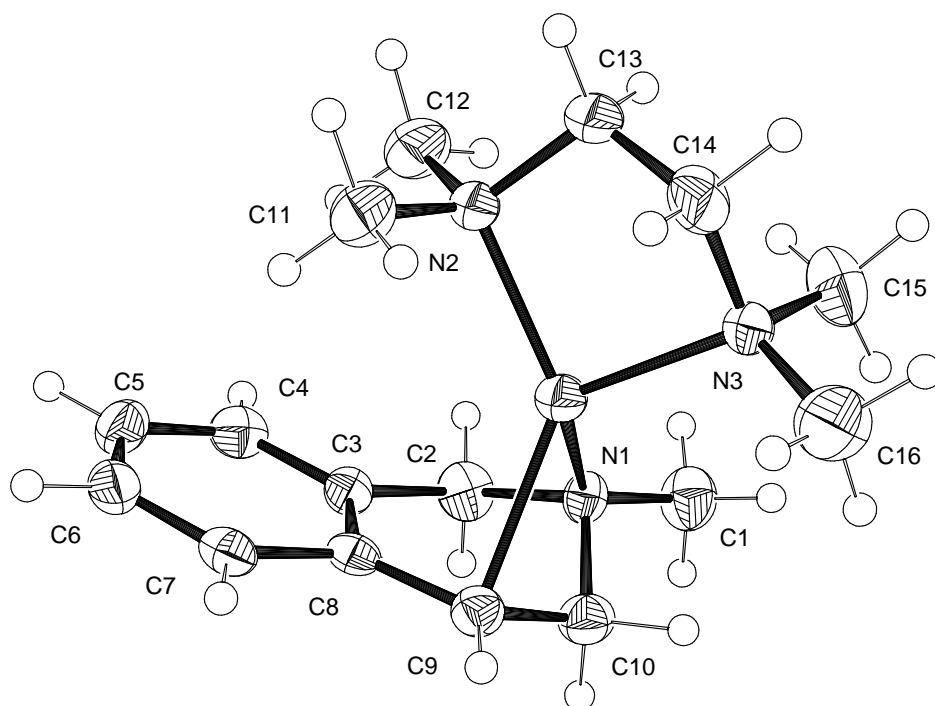


Abb. 8.29 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung [195-TMEDA] im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.57 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{Å}^2 \cdot 10^3$) von [195-TMEDA].

Atom	x	y	z	U(eq)
Li	2193(2)	1969(3)	1406(1)	28(1)
C(1)	3899(1)	831(2)	3134(1)	43(1)
N(1)	3229(1)	516(1)	2294(1)	27(1)
C(2)	3891(1)	-527(2)	1885(1)	35(1)
N(2)	2588(1)	3283(1)	479(1)	28(1)
C(3)	3230(1)	-902(2)	1018(1)	26(1)
N(3)	1603(1)	4032(1)	1851(1)	28(1)
C(4)	3798(1)	-1234(2)	418(1)	34(1)
C(5)	3220(1)	-1568(2)	-384(1)	37(1)
C(6)	2021(1)	-1552(2)	-583(1)	35(1)
C(7)	1428(1)	-1222(2)	0(1)	30(1)
C(8)	1997(1)	-861(2)	828(1)	25(1)
C(9)	1434(1)	-421(2)	1431(1)	29(1)
C(10)	2125(1)	-264(2)	2295(1)	33(1)
C(11)	1761(1)	2906(2)	-297(1)	44(1)
C(12)	3761(1)	3073(2)	386(1)	46(1)
C(13)	2440(1)	4916(2)	728(1)	46(1)
C(14)	1456(1)	5055(2)	1129(1)	43(1)
C(15)	2521(1)	4640(2)	2524(1)	53(1)
C(16)	535(1)	4003(2)	2116(1)	60(1)

Tab. 8.58 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von [195-TMEDA].

Atom	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
Li	33(1)	24(1)	29(1)	2(1)	10(1)	0(1)
C(1)	47(1)	46(1)	32(1)	1(1)	4(1)	4(1)
N(1)	28(1)	30(1)	21(1)	-1(1)	5(1)	2(1)
C(2)	29(1)	34(1)	41(1)	1(1)	6(1)	10(1)
N(2)	35(1)	24(1)	30(1)	-1(1)	13(1)	-1(1)
C(3)	31(1)	21(1)	28(1)	3(1)	8(1)	5(1)
N(3)	30(1)	26(1)	31(1)	-2(1)	12(1)	-1(1)
C(4)	31(1)	29(1)	43(1)	3(1)	12(1)	5(1)
C(5)	49(1)	33(1)	36(1)	0(1)	22(1)	3(1)
C(6)	51(1)	27(1)	26(1)	1(1)	7(1)	-4(1)
C(7)	31(1)	22(1)	34(1)	1(1)	5(1)	-4(1)
C(8)	30(1)	14(1)	31(1)	4(1)	7(1)	1(1)
C(9)	27(1)	29(1)	31(1)	-1(1)	8(1)	-1(1)
C(10)	36(1)	29(1)	38(1)	4(1)	14(1)	1(1)
C(11)	56(1)	42(1)	33(1)	6(1)	10(1)	2(1)
C(12)	44(1)	50(1)	52(1)	0(1)	25(1)	-5(1)
C(13)	77(1)	23(1)	47(1)	3(1)	34(1)	-1(1)
C(14)	58(1)	26(1)	45(1)	2(1)	16(1)	14(1)
C(15)	60(1)	48(1)	47(1)	-14(1)	6(1)	2(1)
C(16)	53(1)	52(1)	90(1)	-7(1)	45(1)	1(1)

8.2.7.2 Kristallstruktur von 199

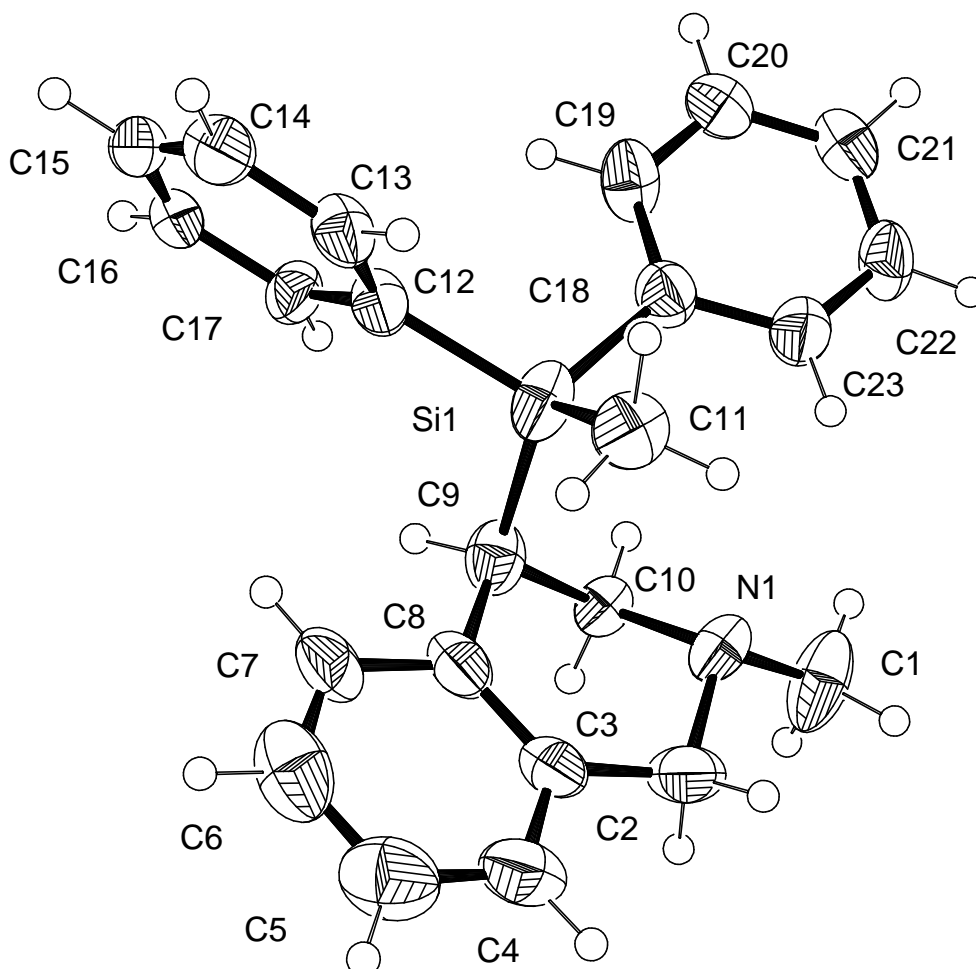


Abb. 8.30 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung **199** im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.59 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von **199**.

Atom	x	y	z	U(eq)
Si(1)	2400(2)	10802(2)	5719(1)	48(1)
N(1)	3222(4)	7387(6)	5030(3)	41(1)
C(10)	2059(5)	7445(7)	5253(3)	34(1)
C(20)	883(6)	13190(8)	4116(3)	45(2)
C(7)	2845(7)	8397(9)	7044(4)	56(2)
C(13)	2014(6)	13373(8)	6630(3)	45(2)
C(17)	388(5)	11653(8)	6373(3)	42(2)
C(16)	-257(6)	12578(8)	6785(3)	48(2)
C(11)	3944(5)	11293(9)	5824(4)	51(2)
C(14)	1348(8)	14314(9)	7033(3)	54(2)
C(19)	1083(5)	12576(9)	4721(3)	50(2)
C(12)	1545(6)	12034(8)	6294(3)	40(2)
C(15)	234(7)	13914(8)	7112(3)	49(2)
C(21)	1543(6)	12682(8)	3623(3)	47(2)
C(3)	3870(6)	7026(9)	6220(4)	52(2)
C(22)	2387(6)	11531(10)	3731(3)	53(2)
C(8)	2937(6)	7968(9)	6385(3)	51(2)
C(2)	3992(6)	6467(9)	5529(4)	57(2)
C(4)	4670(7)	6494(10)	6685(4)	61(2)
C(18)	1970(6)	11515(9)	4858(3)	46(2)
C(1)	3270(7)	6519(11)	4451(4)	70(3)
C(6)	3622(8)	7802(11)	7496(4)	69(2)
C(5)	4533(8)	6845(11)	7327(5)	75(3)
C(23)	2630(7)	11027(10)	4341(4)	59(2)
C(9)	2053(6)	8562(8)	5866(3)	47(2)

Tab. 8.60 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von **199**.

Atom	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
Si(1)	38(1)	47(1)	60(1)	-21(1)	16(1)	-17(1)
N(1)	31(3)	37(3)	57(4)	-16(2)	8(2)	-6(2)
C(10)	24(3)	34(3)	45(4)	-8(3)	1(3)	-7(2)
C(20)	40(4)	41(4)	53(4)	2(3)	-2(3)	-15(3)
C(7)	67(5)	50(4)	52(5)	17(3)	17(4)	-11(4)
C(13)	59(4)	39(4)	37(4)	-3(3)	7(3)	-16(3)
C(17)	47(4)	34(3)	46(4)	-7(3)	16(3)	-5(3)
C(16)	58(4)	43(4)	44(4)	13(3)	22(3)	9(3)
C(11)	35(4)	48(4)	69(5)	-3(3)	4(3)	-14(3)
C(14)	90(6)	40(4)	33(4)	-8(3)	-2(4)	-3(4)
C(19)	29(3)	81(5)	39(4)	3(4)	0(3)	-4(3)
C(12)	52(4)	36(3)	34(3)	-4(3)	8(3)	-12(3)
C(15)	78(5)	40(4)	29(4)	0(3)	9(3)	13(3)
C(21)	57(4)	50(4)	32(4)	0(3)	-3(3)	-19(3)
C(3)	54(4)	49(4)	54(5)	21(3)	10(4)	8(3)
C(22)	54(4)	78(5)	26(4)	-1(3)	6(3)	4(4)
C(8)	57(4)	53(4)	45(4)	18(3)	9(3)	1(3)
C(2)	54(5)	43(4)	73(5)	13(4)	5(4)	11(3)
C(4)	61(5)	56(5)	66(6)	18(4)	-6(4)	6(4)
C(18)	44(4)	54(4)	40(4)	6(3)	4(3)	3(3)
C(1)	51(5)	80(5)	80(6)	-47(5)	25(4)	-24(4)
C(6)	88(7)	75(6)	44(5)	-8(4)	-1(4)	-27(5)
C(5)	79(6)	76(6)	67(6)	5(5)	-21(5)	5(5)
C(23)	64(5)	68(5)	46(4)	10(4)	15(4)	22(4)
C(9)	43(4)	50(4)	49(4)	-7(3)	11(3)	-11(3)

8.2.7.3 Kristallstruktur von [(S)-195-(R,R)-TMCD]A

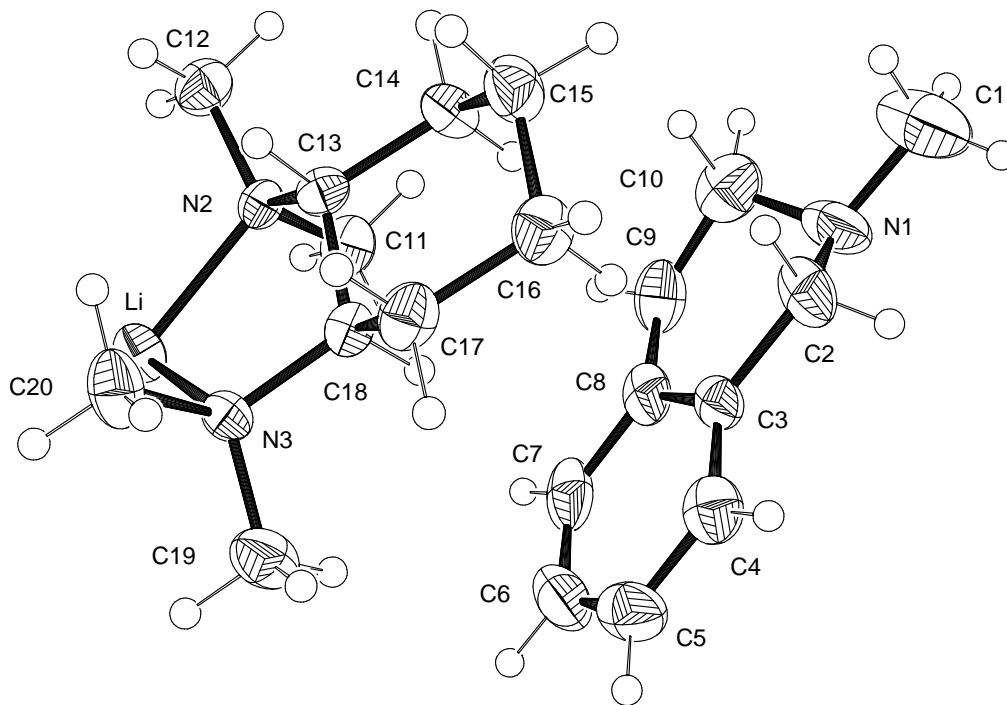


Abb. 8.31 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung [(S)-195-(R,R)-TMCD]A im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.61 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von [(S)-195-(R,R)-TMCD]A.

Atom	x	y	z	U(eq)
Li	7214(4)	711(2)	9418(2)	37(1)
C(1)	4474(4)	-752(2)	9118(2)	76(1)
N(1)	5775(2)	-388(2)	9663(1)	55(1)
C(2)	6739(3)	-1165(2)	9957(2)	45(1)
N(2)	9144(2)	735(1)	8647(1)	26(1)
C(3)	8133(3)	-850(2)	10494(1)	36(1)
N(3)	6410(2)	1839(1)	8748(1)	31(1)
C(4)	9472(4)	-1364(2)	10565(2)	45(1)
C(5)	10769(4)	-1102(2)	11056(2)	52(1)
C(6)	10675(4)	-297(2)	11479(2)	56(1)
C(7)	9363(4)	228(2)	11417(2)	49(1)
C(8)	8008(3)	-9(2)	10913(1)	39(1)
C(9)	6648(4)	533(2)	10794(2)	51(1)
C(10)	5222(4)	149(2)	10367(2)	58(1)
C(11)	8788(3)	-10(2)	8064(2)	37(1)
C(12)	10646(3)	548(2)	9080(2)	38(1)
C(13)	9176(3)	1617(1)	8211(1)	26(1)
C(14)	10216(3)	1645(2)	7401(2)	36(1)
C(15)	10261(3)	2583(2)	7019(2)	39(1)
C(16)	8602(3)	2911(2)	6826(2)	39(1)
C(17)	7564(3)	2886(2)	7622(2)	38(1)
C(18)	7494(3)	1937(1)	7994(1)	28(1)
C(19)	4745(3)	1820(2)	8473(2)	43(1)
C(20)	6638(4)	2533(2)	9399(2)	45(1)

Tab. 8.62 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von [(S)-195-(R,R)-TMEDA].

Atom	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
Li	43(3)	36(2)	31(2)	4(2)	7(2)	2(2)
C(1)	49(2)	80(2)	99(3)	20(2)	-29(2)	-14(2)
N(1)	37(1)	68(2)	60(2)	15(1)	-13(1)	0(1)
C(2)	58(2)	41(2)	37(2)	10(2)	-14(2)	-5(2)
N(2)	29(1)	23(1)	26(1)	-3(1)	-3(1)	1(1)
C(3)	39(2)	41(2)	29(1)	13(1)	-3(1)	-5(1)
N(3)	31(1)	34(1)	27(1)	-4(1)	3(1)	5(1)
C(4)	52(2)	43(2)	39(2)	6(1)	5(2)	-4(2)
C(5)	39(2)	64(2)	54(2)	22(2)	-2(2)	2(2)
C(6)	51(2)	72(2)	45(2)	10(2)	-12(2)	-21(2)
C(7)	71(2)	45(2)	31(2)	8(1)	4(2)	-18(2)
C(8)	51(2)	38(2)	27(1)	11(1)	2(1)	-12(2)
C(9)	71(2)	47(2)	36(2)	9(2)	2(2)	2(2)
C(10)	62(2)	52(2)	60(2)	12(2)	8(2)	8(2)
C(11)	44(2)	28(2)	40(2)	-7(1)	-7(2)	0(1)
C(12)	40(2)	43(2)	32(2)	1(1)	-9(2)	5(2)
C(13)	27(1)	23(1)	28(1)	-5(1)	-2(1)	-3(1)
C(14)	32(2)	37(2)	37(2)	4(1)	3(1)	1(1)
C(15)	39(2)	40(2)	38(2)	10(1)	7(2)	-3(1)
C(16)	51(2)	29(2)	37(2)	10(1)	-1(1)	-3(1)
C(17)	42(2)	36(2)	38(2)	1(1)	-3(2)	3(1)
C(18)	33(2)	27(1)	24(1)	-2(1)	-4(1)	-2(1)
C(19)	35(2)	49(2)	45(2)	-2(2)	4(1)	8(2)
C(20)	58(2)	37(2)	40(2)	-4(2)	10(2)	5(2)

8.2.7.4 Kristallstruktur von $[\text{205} \cdot (\text{THF})_2]_\infty$

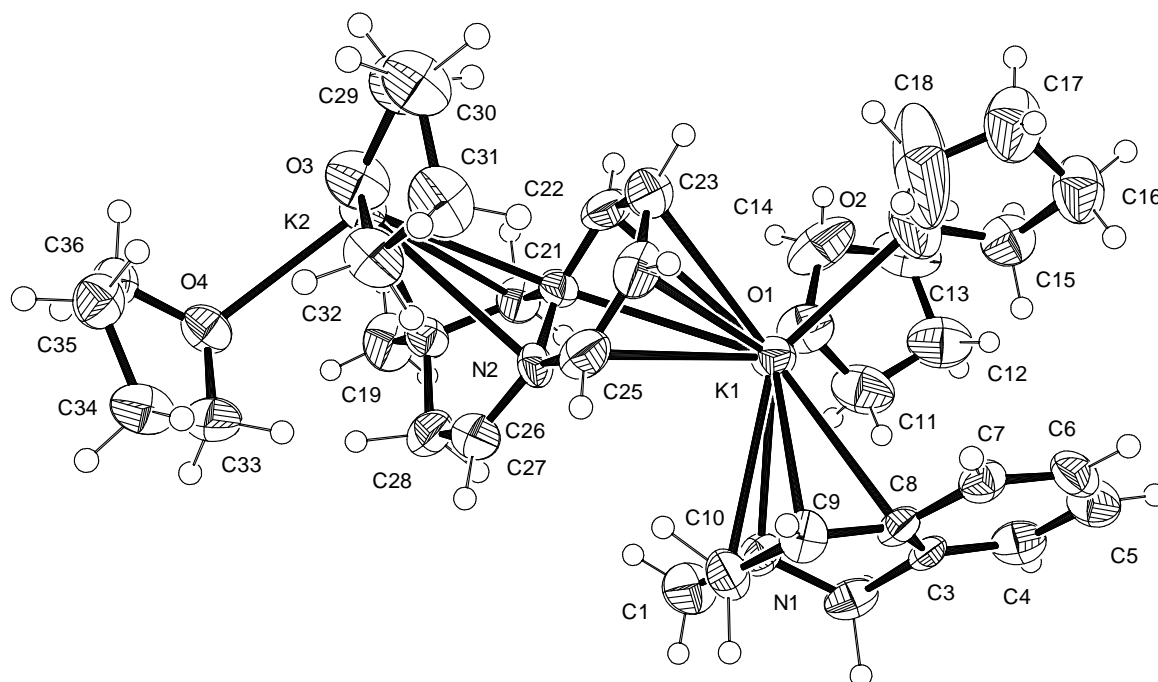


Abb. 8.32 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung $[\text{205} \cdot (\text{THF})_2]_\infty$ im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.63 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von $[\mathbf{205} \cdot (\text{THF})_2]_{\infty}$.

Atom	x	y	z	U(eq)
C(1)	-3486(4)	5404(4)	5559(3)	60(1)
K(1)	-337(1)	6876(1)	3960(1)	41(1)
N(1)	-2116(3)	5558(3)	5734(2)	39(1)
O(1)	-3141(3)	9555(2)	4109(2)	59(1)
C(2)	-2423(4)	6050(4)	6950(3)	46(1)
K(2)	752(1)	4352(1)	-826(1)	37(1)
N(2)	-2315(3)	5388(3)	822(2)	39(1)
O(2)	941(3)	8801(3)	3905(2)	75(1)
C(3)	-1037(3)	6331(3)	7056(2)	29(1)
O(3)	3986(2)	2457(2)	-932(2)	53(1)
C(4)	-1278(4)	7454(4)	7759(3)	45(1)
O(4)	443(2)	1815(2)	-992(2)	47(1)
C(5)	-39(5)	7660(4)	7909(3)	51(1)
C(6)	1544(4)	6711(4)	7302(3)	47(1)
C(7)	1899(4)	5561(3)	6575(3)	39(1)
C(8)	574(4)	5304(3)	6426(3)	36(1)
C(9)	806(4)	4190(4)	5704(3)	44(1)
C(10)	-614(5)	4080(4)	5526(3)	45(1)
C(11)	-4096(4)	9966(4)	5263(3)	70(1)
C(12)	-4226(5)	11435(4)	5525(3)	71(1)
C(13)	-4045(5)	12193(4)	4350(3)	83(1)
C(14)	-3364(5)	10960(5)	3429(3)	92(1)
C(15)	562(4)	9737(4)	4849(3)	56(1)
C(16)	2108(4)	9724(4)	4897(3)	66(1)
C(17)	3254(5)	9050(5)	3743(4)	86(1)
C(18)	2557(7)	8339(7)	3357(5)	210(4)
C(19)	-3878(4)	5975(4)	499(3)	63(1)
C(20)	-2189(4)	6629(4)	1241(3)	49(1)
C(21)	-491(4)	5963(3)	1505(2)	38(1)
C(22)	380(5)	6723(4)	1182(3)	53(1)
C(23)	1941(4)	6124(4)	1408(3)	50(1)
C(24)	2587(4)	4706(5)	1999(3)	52(1)
C(25)	1715(4)	3874(4)	2329(3)	52(1)
C(26)	137(4)	4410(4)	2019(3)	31(1)
C(27)	-685(5)	3575(4)	2190(3)	58(1)
C(28)	-2208(5)	4172(4)	1769(3)	57(1)
C(29)	4979(4)	3218(4)	-1372(3)	62(1)
C(30)	6640(4)	2123(4)	-1169(3)	60(1)
C(31)	6207(4)	1356(4)	3(3)	59(1)
C(32)	4726(4)	1263(3)	-92(3)	54(1)
C(33)	815(4)	627(4)	-90(3)	56(1)
C(34)	2401(4)	-755(3)	-655(3)	53(1)
C(35)	2858(4)	-222(3)	-1921(3)	48(1)
C(36)	1256(4)	1077(3)	-2124(3)	47(1)

Tab. 8.64 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von $[\mathbf{205} \cdot (\text{THF})_2]_{\infty}$.

Atom	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
C(1)	56(2)	82(3)	62(2)	3(2)	-21(2)	-44(2)
K(1)	51(1)	39(1)	36(1)	-3(1)	-7(1)	-23(1)
N(1)	39(2)	45(2)	36(2)	-1(1)	-12(1)	-20(1)
O(1)	66(2)	44(1)	49(2)	-4(1)	-3(1)	-16(1)
C(2)	49(2)	50(2)	34(2)	-1(2)	1(2)	-24(2)
K(2)	33(1)	35(1)	37(1)	-6(1)	-4(1)	-13(1)
N(2)	36(2)	41(2)	40(2)	-7(1)	-4(1)	-17(1)
O(2)	65(2)	104(2)	79(2)	-45(2)	9(2)	-59(2)
C(3)	37(2)	32(2)	16(2)	0(1)	-5(1)	-16(2)
O(3)	38(1)	59(2)	61(2)	-5(1)	-13(1)	-20(1)
C(4)	49(2)	39(2)	39(2)	3(2)	-12(2)	-14(2)
O(4)	53(2)	38(1)	52(2)	-7(1)	-10(1)	-21(1)
C(5)	63(3)	46(2)	52(2)	-4(2)	-19(2)	-28(2)
C(6)	44(2)	51(2)	53(3)	4(2)	-13(2)	-29(2)
C(7)	45(2)	36(2)	33(2)	3(2)	-11(2)	-16(2)
C(8)	51(3)	29(2)	26(2)	-1(2)	-9(2)	-17(2)
C(9)	40(2)	39(2)	42(2)	1(2)	-9(2)	-11(2)
C(10)	54(3)	47(2)	46(2)	-5(2)	-18(2)	-27(2)

C(11)	73(3)	53(2)	79(3)	-2(2)	-2(2)	-32(2)
C(12)	61(3)	71(3)	73(3)	3(2)	-10(2)	-28(2)
C(13)	87(3)	59(3)	81(3)	13(2)	-4(2)	-29(2)
C(14)	111(4)	83(3)	55(3)	14(3)	-24(2)	-28(3)
C(15)	47(2)	60(2)	53(2)	-3(2)	-8(2)	-19(2)
C(16)	52(2)	80(3)	61(3)	-31(2)	-2(2)	-24(2)
C(17)	62(3)	113(3)	86(3)	-37(3)	0(2)	-42(3)
C(18)	132(5)	340(9)	219(7)	-230(7)	104(5)	-168(6)
C(19)	45(2)	92(3)	64(2)	-26(2)	-1(2)	-40(2)
C(20)	32(2)	56(3)	57(3)	-25(2)	-2(2)	-15(2)
C(21)	51(2)	47(2)	23(2)	-13(2)	4(2)	-31(2)
C(22)	62(3)	59(3)	38(2)	-6(2)	-5(2)	-29(2)
C(23)	37(2)	70(3)	46(2)	-16(2)	-4(2)	-26(2)
C(24)	48(3)	70(3)	42(2)	-17(2)	0(2)	-31(2)
C(25)	61(3)	51(2)	32(2)	-13(2)	-4(2)	-16(2)
C(26)	38(2)	33(2)	29(2)	-6(2)	-4(2)	-21(2)
C(27)	76(3)	59(3)	46(2)	-3(2)	-10(2)	-37(2)
C(28)	59(3)	71(3)	41(2)	-10(2)	-1(2)	-34(2)
C(29)	53(2)	69(3)	59(2)	3(2)	-14(2)	-26(2)
C(30)	45(2)	51(2)	88(3)	-4(2)	-20(2)	-24(2)
C(31)	53(2)	54(2)	73(3)	-6(2)	-33(2)	-16(2)
C(32)	53(2)	46(2)	59(2)	-12(2)	-9(2)	-18(2)
C(33)	72(3)	60(2)	37(2)	3(2)	-4(2)	-38(2)
C(34)	57(2)	50(2)	63(2)	19(2)	-29(2)	-31(2)
C(35)	46(2)	49(2)	52(2)	-5(2)	-10(2)	-24(2)
C(36)	70(3)	45(2)	37(2)	4(2)	-20(2)	-33(2)

8.2.7.5 Kristallstruktur von [206·(THF)₃]

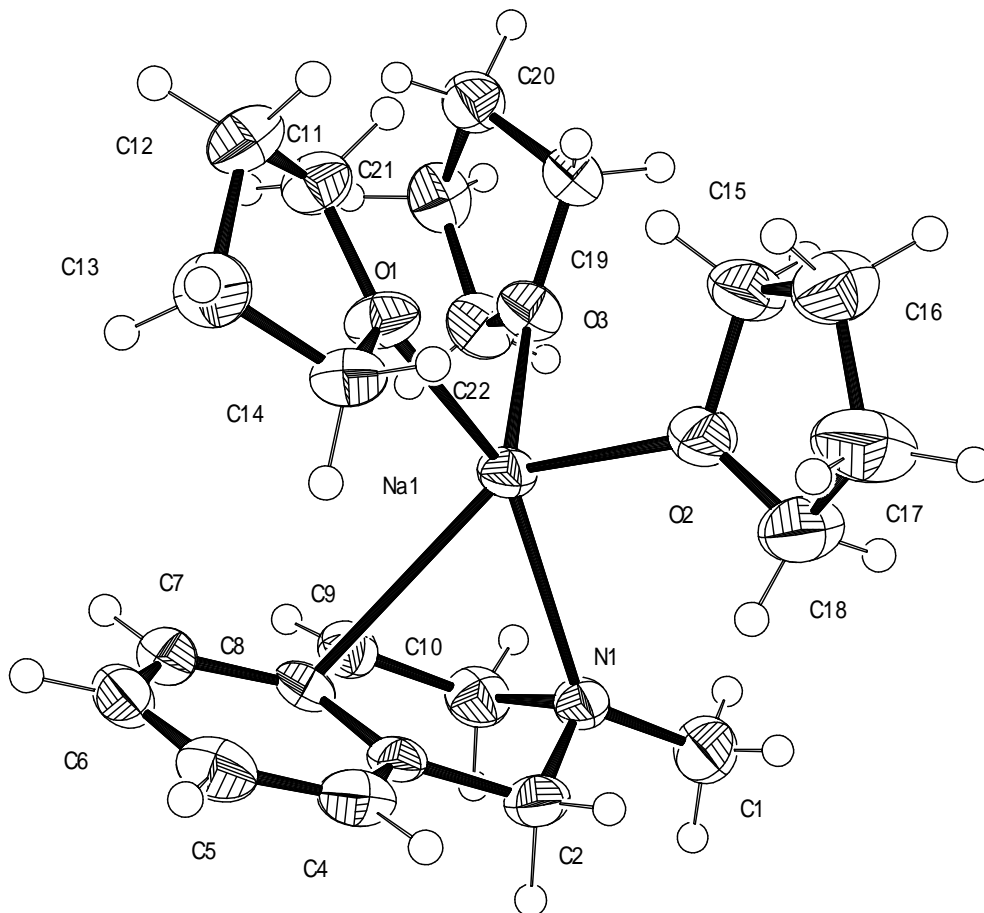


Abb. 8.33 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung [206·(THF)₃] im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.65 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von $[\mathbf{206} \cdot (\text{THF})_3]$.

Atom	x	y	z	U(eq)
C(1)	4713(3)	12039(3)	67(2)	60(1)
C(2)	4969(3)	12987(3)	1514(2)	46(1)
C(3)	5923(2)	12822(2)	2417(1)	34(1)
C(4)	5247(3)	13310(2)	3219(2)	45(1)
C(5)	6094(3)	13277(2)	4023(2)	49(1)
C(6)	7708(3)	12706(2)	4007(2)	45(1)
C(7)	8445(2)	12180(2)	3235(1)	41(1)
C(8)	7583(2)	12209(2)	2369(1)	37(1)
C(9)	8249(3)	11669(2)	1568(2)	42(1)
C(10)	7250(3)	11915(3)	700(2)	47(1)
C(11)	8545(2)	6827(2)	4088(1)	45(1)
C(12)	8253(3)	6756(3)	5132(1)	49(1)
C(13)	7556(3)	8439(3)	5224(2)	51(1)
C(14)	6570(2)	9004(2)	4330(1)	45(1)
C(15)	4359(3)	7179(3)	2687(2)	54(1)
C(16)	2855(3)	7209(3)	3187(2)	59(1)
C(17)	1878(3)	8797(3)	2961(2)	74(1)
C(18)	2770(3)	9637(3)	2268(2)	59(1)
C(19)	8374(2)	5703(2)	1694(2)	44(1)
C(20)	10094(2)	4906(3)	1807(2)	49(1)
C(21)	10826(3)	5893(3)	1073(2)	53(1)
C(22)	9598(3)	7418(3)	850(2)	53(1)
N(1)	5656(2)	11793(2)	928(1)	37(1)
Na(1)	6753(1)	9409(1)	2108(1)	38(1)
O(1)	7426(2)	8173(2)	3631(1)	44(1)
O(2)	4347(2)	8776(2)	2357(1)	49(1)
O(3)	8316(2)	7325(2)	1452(1)	46(1)

Tab. 8.66 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von $[\mathbf{206} \cdot (\text{THF})_3]$.

Atom	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
C(1)	77(2)	55(2)	48(1)	7(1)	-23(1)	-24(1)
C(2)	42(1)	33(1)	57(1)	4(1)	-2(1)	-7(1)
C(3)	39(1)	24(1)	38(1)	0(1)	1(1)	-10(1)
C(4)	46(1)	32(1)	56(1)	-4(1)	10(1)	-8(1)
C(5)	61(2)	39(1)	47(1)	-10(1)	10(1)	-13(1)
C(6)	58(1)	38(1)	42(1)	-9(1)	-2(1)	-17(1)
C(7)	42(1)	37(1)	46(1)	-6(1)	-1(1)	-12(1)
C(8)	44(1)	28(1)	42(1)	-6(1)	8(1)	-16(1)
C(9)	41(1)	41(1)	47(1)	-6(1)	5(1)	-16(1)
C(10)	56(1)	45(1)	40(1)	1(1)	4(1)	-20(1)
C(11)	44(1)	43(1)	44(1)	-5(1)	2(1)	-3(1)
C(12)	47(1)	52(1)	40(1)	6(1)	-2(1)	-5(1)
C(13)	58(1)	51(1)	41(1)	-11(1)	3(1)	-10(1)
C(14)	50(1)	35(1)	47(1)	-4(1)	4(1)	-4(1)
C(15)	51(1)	37(1)	73(2)	-1(1)	9(1)	-16(1)
C(16)	49(1)	57(2)	64(2)	4(1)	10(1)	-9(1)
C(17)	65(2)	45(2)	106(2)	-7(2)	28(2)	-9(1)
C(18)	56(2)	47(1)	68(2)	5(1)	4(1)	-7(1)
C(19)	46(1)	40(1)	48(1)	-8(1)	5(1)	-16(1)
C(20)	46(1)	44(1)	57(1)	-10(1)	3(1)	-10(1)
C(21)	46(1)	60(2)	56(1)	-16(1)	10(1)	-16(1)
C(22)	55(1)	56(2)	52(1)	-7(1)	13(1)	-23(1)
N(1)	45(1)	33(1)	34(1)	0(1)	-4(1)	-12(1)
Na(1)	47(1)	32(1)	37(1)	0(1)	-2(1)	-14(1)
O(1)	54(1)	38(1)	33(1)	-2(1)	3(1)	-1(1)
O(2)	44(1)	40(1)	62(1)	4(1)	0(1)	-15(1)
O(3)	49(1)	41(1)	49(1)	-11(1)	10(1)	-15(1)

8.2.7.6 Kristallstruktur von 207

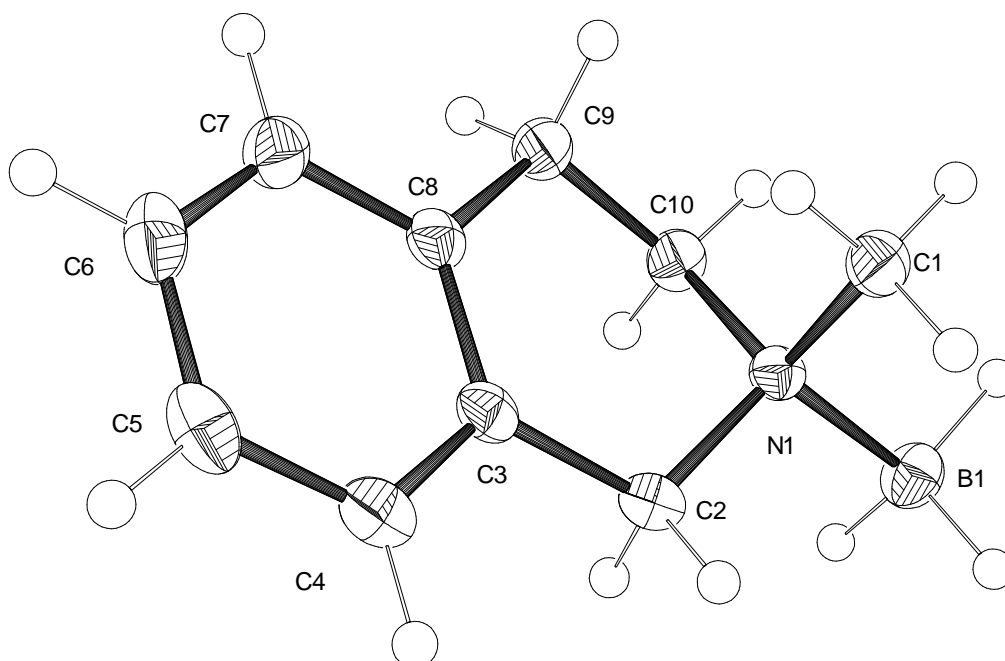


Abb. 8.34 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung **207** im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.67 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von **207**.

Atom	x	y	z	U(eq)
B(1)	4956(1)	-99(1)	7801(1)	26(1)
C(1)	6749(1)	1181(1)	7371(1)	24(1)
C(2)	5120(1)	979(1)	6434(1)	23(1)
C(3)	5807(1)	1225(1)	5675(1)	21(1)
C(4)	5459(1)	2234(1)	5166(1)	26(1)
C(5)	6067(1)	2486(1)	4465(1)	29(1)
C(6)	7042(1)	1737(1)	4275(1)	30(1)
C(7)	7388(1)	734(1)	4775(1)	27(1)
C(8)	6770(1)	451(1)	5480(1)	21(1)
C(9)	7173(1)	-641(1)	6027(1)	25(1)
C(10)	6332(1)	-915(1)	6710(1)	24(1)
N(1)	5809(1)	300(1)	7068(1)	19(1)

Tab. 8.68 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von **207**.

Atom	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
B(1)	26(1)	26(1)	26(1)	1(1)	5(1)	-4(1)
C(1)	23(1)	25(1)	25(1)	-6(1)	0(1)	-5(1)
C(2)	19(1)	24(1)	26(1)	1(1)	-3(1)	1(1)
C(3)	19(1)	21(1)	22(1)	-3(1)	-6(1)	-3(1)
C(4)	25(1)	24(1)	30(1)	0(1)	-7(1)	1(1)
C(5)	36(1)	28(1)	25(1)	3(1)	-10(1)	-7(1)
C(6)	37(1)	34(1)	19(1)	-1(1)	-2(1)	-10(1)
C(7)	27(1)	31(1)	24(1)	-6(1)	0(1)	-2(1)
C(8)	21(1)	22(1)	21(1)	-5(1)	-4(1)	-2(1)
C(9)	27(1)	23(1)	24(1)	-4(1)	-1(1)	6(1)
C(10)	29(1)	18(1)	25(1)	-2(1)	-1(1)	3(1)
N(1)	18(1)	17(1)	21(1)	-2(1)	-1(1)	-1(1)

8.2.8 Kristallstrukturen Kapitel 4.9

8.2.8.1 Kristallstruktur von $[206 \cdot (\text{THF})_{1.5}]_{\infty}$

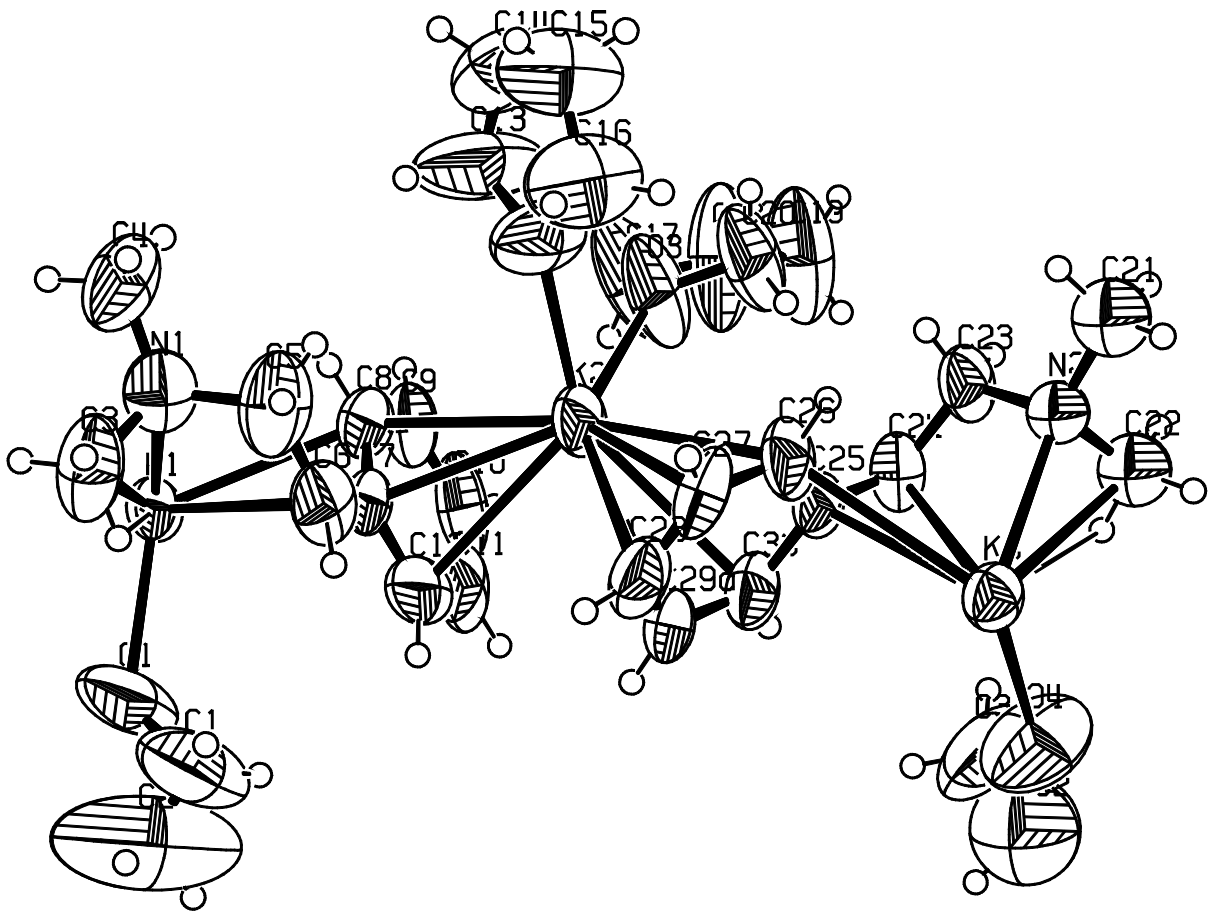


Abb. 8.35 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung $[206 \cdot (\text{THF})_{1.5}]_{\infty}$ im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.69 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von $[206 \cdot (\text{THF})_{1.5}]_{\infty}$.

Atom	x	y	z	U(eq)
C(1)	610(30)	5600(30)	3187(2)	185(8)
C(2)	577(17)	6904(18)	3284(6)	313(19)
C(3)	3540(13)	4039(11)	3506(1)	93(3)
C(4)	3957(13)	1759(15)	3513(1)	107(3)
C(5)	4003(10)	3001(12)	3194(1)	83(2)
C(6)	3101(11)	3474(11)	3052(1)	81(2)
C(7)	1792(10)	2345(12)	2950(1)	71(2)
C(8)	862(12)	2750(12)	2811(1)	83(2)
C(9)	-466(12)	1591(15)	2702(1)	90(3)
C(10)	-977(12)	-31(14)	2716(1)	92(3)
C(11)	-155(13)	-492(12)	2846(1)	94(3)
C(12)	1189(12)	674(14)	2954(1)	85(2)
C(13)	5945(15)	2990(20)	2727(1)	145(5)
C(14)	7230(20)	4600(20)	2754(2)	184(8)
C(15)	7690(30)	5177(19)	2556(2)	220(11)
C(16)	6617(15)	4230(20)	2421(2)	170(7)
C(17)	2820(20)	-2300(20)	2634(2)	190(8)
C(18)	3984(19)	-2730(20)	2595(3)	171(7)
C(19)	4825(19)	-1840(20)	2423(2)	157(6)

C(20)	4060(20)	-1090(30)	2348(3)	204(9)
C(21)	-2227(13)	-3769(15)	1790(2)	124(4)
C(22)	256(19)	-3946(15)	1815(2)	128(4)
C(23)	-399(18)	-2506(16)	2072(1)	122(4)
C(24)	-802(11)	-1228(15)	2116(1)	97(3)
C(25)	434(11)	444(13)	2107(1)	78(2)
C(26)	107(17)	1730(20)	2161(1)	105(3)
C(27)	1310(20)	3320(20)	2162(1)	119(4)
C(28)	2910(20)	3838(18)	2110(1)	129(5)
C(29)	3198(14)	2590(17)	2046(1)	101(3)
C(30)	2028(12)	1008(15)	2044(1)	88(3)
C(31)	-3710(20)	50(40)	1841(2)	236(13)
C(32)	-4960(40)	-220(60)	1575(4)	321(19)
K(1)	0	1626(3)	3333	68(1)
K(2)	2186(2)	1239(3)	2491(1)	84(1)
K(3)	5(3)	0	1667	81(1)
N(1)	3267(7)	2588(8)	3394(1)	68(2)
N(2)	-572(10)	-3000(10)	1860(1)	96(2)
O(1)	0	4453(11)	3333	159(6)
O(2)	5401(8)	2905(13)	2537(1)	145(4)
O(3)	2928(12)	-1179(13)	2494(1)	141(3)
O(4)	-2453(15)	703(19)	1658(3)	110(6)

Tab. 8.70 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von $[\mathbf{206} \cdot (\text{THF})_{1.5}]_{\infty}$.

Atom	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
C(1)	300(20)	209(19)	112(10)	32(11)	67(13)	173(18)
C(2)	107(15)	68(9)	710(60)	93(19)	10(30)	1(9)
C(3)	116(7)	86(6)	60(5)	-4(4)	17(5)	39(6)
C(4)	114(7)	174(10)	63(5)	24(6)	-2(5)	95(7)
C(5)	70(5)	108(6)	47(4)	11(4)	5(4)	28(5)
C(6)	84(6)	86(6)	57(4)	-3(4)	-2(4)	31(5)
C(7)	71(5)	110(7)	36(3)	2(4)	10(3)	47(5)
C(8)	105(7)	86(6)	48(4)	-4(4)	4(4)	41(5)
C(9)	107(7)	136(10)	37(4)	-12(5)	-1(4)	69(7)
C(10)	88(6)	107(8)	67(5)	-21(5)	15(5)	38(6)
C(11)	114(8)	97(6)	58(5)	-15(4)	22(5)	43(6)
C(12)	119(7)	116(8)	27(3)	4(4)	-2(4)	64(6)
C(13)	119(8)	214(14)	55(5)	36(7)	-13(5)	50(10)
C(14)	167(13)	187(14)	86(8)	3(9)	-20(9)	3(13)
C(15)	260(20)	141(12)	69(7)	2(7)	6(10)	-38(13)
C(16)	105(8)	200(14)	96(8)	59(9)	-5(7)	-5(10)
C(17)	211(17)	250(20)	146(13)	113(14)	74(13)	147(16)
C(18)	149(12)	195(15)	205(17)	103(13)	79(12)	114(12)
C(19)	131(10)	167(13)	181(15)	-20(12)	53(11)	82(10)
C(20)	229(18)	350(30)	166(14)	87(16)	91(14)	240(20)
C(21)	101(8)	126(9)	82(6)	-34(6)	8(6)	9(7)
C(22)	220(14)	119(8)	64(5)	10(6)	21(7)	99(10)
C(23)	157(10)	126(9)	56(5)	1(6)	8(6)	52(8)
C(24)	65(5)	142(9)	62(5)	2(6)	22(4)	36(7)
C(25)	91(6)	135(8)	29(3)	-18(4)	-8(3)	72(7)
C(26)	120(9)	192(13)	43(4)	13(7)	3(5)	107(10)
C(27)	196(15)	150(12)	39(5)	-1(6)	-21(7)	107(12)
C(28)	169(13)	118(9)	43(5)	2(6)	-23(7)	30(9)
C(29)	111(8)	125(9)	48(5)	-3(5)	-5(5)	44(8)
C(30)	97(7)	136(9)	43(4)	-13(5)	4(4)	68(7)
C(31)	164(14)	530(40)	79(8)	7(15)	22(9)	220(20)
C(32)	240(30)	660(60)	180(30)	-110(30)	-60(20)	310(30)
K(1)	68(1)	78(1)	56(1)	3(1)	6(1)	34(1)
K(2)	82(1)	129(2)	39(1)	1(1)	5(1)	53(1)
K(3)	87(1)	128(2)	42(1)	-5(1)	-2(1)	64(1)
N(1)	68(4)	90(4)	42(3)	20(3)	14(3)	38(4)
N(2)	93(6)	93(5)	82(5)	10(4)	18(4)	31(5)
O(1)	225(16)	107(6)	185(15)	20(6)	39(12)	113(8)
O(2)	85(4)	217(9)	53(3)	29(5)	2(3)	16(5)
O(3)	189(8)	212(8)	95(5)	42(6)	49(6)	156(7)
O(4)	83(8)	184(18)	73(7)	19(13)	9(8)	75(9)

8.2.8.2 Kristallstruktur von $[206 \cdot (\text{THF})_2]_{\infty}$

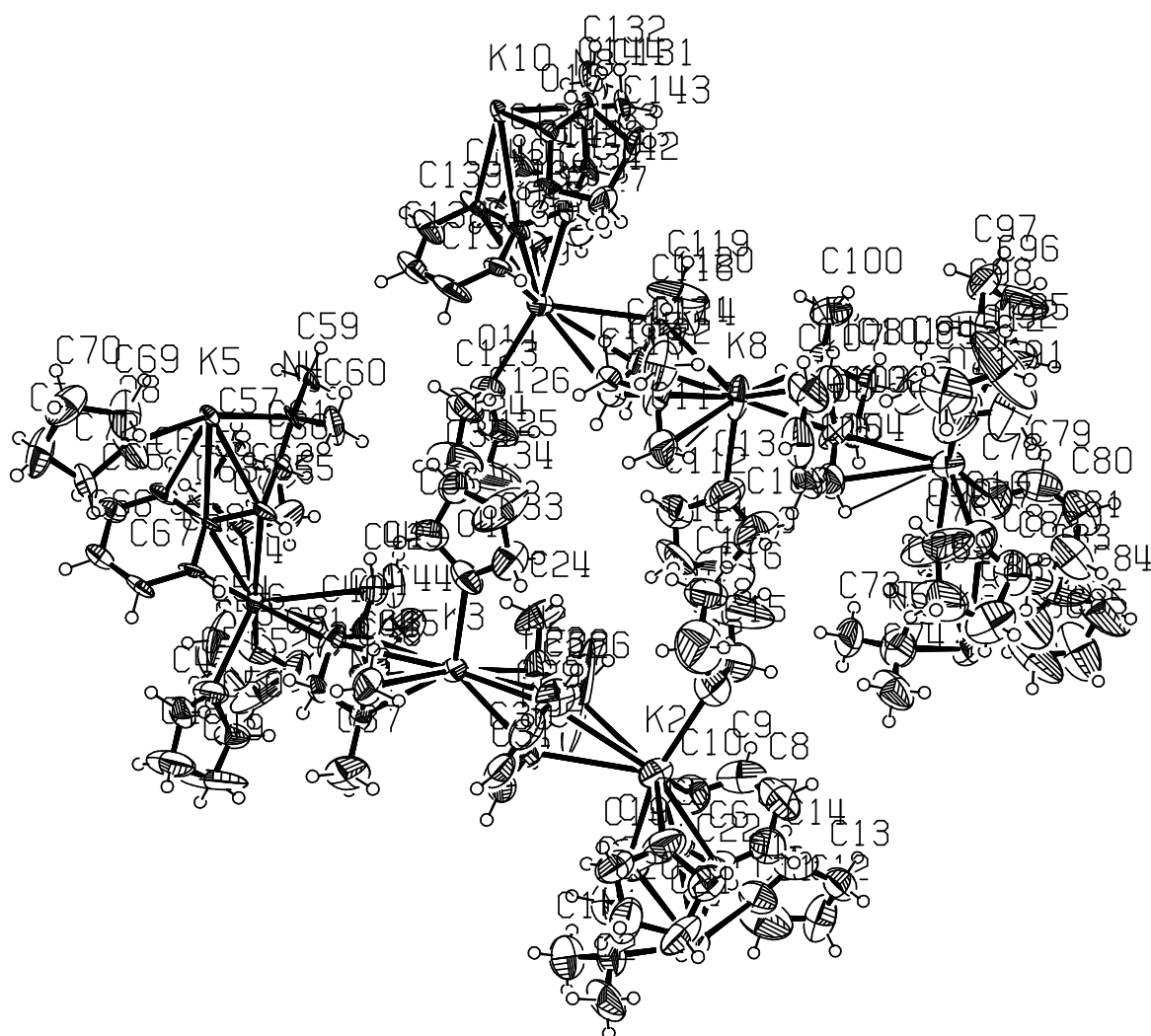


Abb. 8.36 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung $[206 \cdot (\text{THF})_2]_{\infty}$ im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.71 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von $[206 \cdot (\text{THF})_2]_{\infty}$.

Atom	x	y	z	U(eq)
C(1)	11226(6)	8530(12)	620(3)	104(4)
C(2)	10691(6)	10609(11)	413(3)	111(4)
C(3)	10042(5)	9186(10)	808(3)	89(3)
C(4)	9698(7)	7937(13)	838(3)	110(4)
C(5)	9071(6)	7668(9)	676(2)	73(3)
C(6)	8676(6)	8445(12)	440(3)	92(3)
C(7)	8007(6)	8143(14)	317(3)	101(4)
C(8)	7673(7)	7012(17)	416(4)	125(5)
C(9)	8035(9)	6208(12)	630(4)	110(5)
C(10)	8720(7)	6423(13)	783(3)	101(4)
C(11)	9610(8)	4646(16)	-467(5)	157(7)
C(12)	9098(8)	4202(14)	-768(4)	127(5)
C(13)	8445(5)	4520(11)	-620(3)	86(3)
C(14)	8615(7)	4960(13)	-244(3)	114(4)
C(15)	6821(7)	6904(13)	1372(3)	118(5)
C(16)	6438(12)	6499(19)	1649(6)	295(19)
C(17)	6383(7)	7248(15)	1898(3)	123(5)

C(18)	6674(8)	8602(18)	1763(5)	161(7)
C(19)	8900(7)	11954(15)	1252(3)	130(5)
C(20)	9104(8)	12781(13)	992(3)	143(6)
C(21)	8740(7)	12547(12)	653(3)	105(4)
C(22)	8153(6)	11761(10)	746(2)	84(3)
C(23)	9824(6)	4551(11)	1914(4)	115(4)
C(24)	8976(7)	4549(10)	2309(3)	110(4)
C(25)	8883(6)	6080(8)	1841(2)	91(4)
C(26)	8797(18)	7088(13)	1889(7)	430(30)
C(27)	8850(5)	8301(8)	2061(3)	88(3)
C(28)	8489(5)	9352(8)	2183(3)	78(3)
C(29)	8803(7)	10543(9)	2240(3)	83(3)
C(30)	9451(7)	10741(9)	2155(2)	75(3)
C(31)	9791(6)	9966(10)	1989(2)	80(3)
C(32)	9484(5)	8553(9)	1929(2)	75(3)
C(33)	8074(5)	7395(11)	2958(3)	85(3)
C(34)	7676(6)	7390(40)	3268(5)	430(30)
C(35)	8106(4)	6586(13)	3525(3)	99(4)
C(36)	8805(5)	6811(11)	3410(3)	89(3)
C(37)	11330(6)	9754(8)	2732(3)	96(3)
C(38)	10270(5)	9629(9)	3087(2)	78(3)
C(39)	11216(3)	8167(6)	3198(2)	43(2)
C(40)	10885(4)	7011(8)	3301(2)	62(2)
C(41)	10812(4)	5831(6)	3134(2)	55(2)
C(42)	10446(4)	4791(7)	3243(2)	59(2)
C(43)	10497(5)	3622(6)	3092(3)	77(3)
C(44)	10877(8)	3521(9)	2800(3)	112(5)
C(45)	11241(7)	4569(10)	2690(3)	111(5)
C(46)	11192(4)	5663(8)	2849(3)	76(3)
C(47)	13025(4)	7775(8)	3657(2)	67(2)
C(48)	13615(8)	8074(13)	3458(3)	140(6)
C(49)	13532(10)	7386(13)	3131(4)	199(10)
C(50)	13142(5)	6354(8)	3206(2)	66(2)
C(51)	12706(7)	2816(12)	3024(3)	107(4)
C(52)	13516(12)	2151(14)	3041(3)	175(10)
C(53)	13651(9)	1993(18)	3354(6)	180(9)
C(54)	13274(6)	2529(17)	3539(3)	143(7)
C(55)	11445(8)	1816(8)	3856(2)	115(5)
C(56)	11303(8)	867(10)	4055(2)	126(6)
C(57)	11479(5)	1304(8)	4457(2)	71(3)
C(58)	11963(3)	2410(7)	4412(2)	48(2)
C(59)	9386(4)	3214(7)	4575(2)	61(2)
C(60)	9106(4)	5205(9)	4314(2)	78(3)
C(61)	10300(4)	4484(7)	4321(2)	48(2)
C(62)	10601(4)	5770(9)	4240(2)	66(3)
C(63)	11223(3)	6161(6)	4451(2)	42(2)
C(64)	11503(3)	5672(7)	4762(2)	45(2)
C(65)	12090(3)	6218(7)	4947(2)	47(2)
C(66)	12430(3)	7229(8)	4813(2)	49(2)
C(67)	12146(3)	7814(7)	4511(2)	44(2)
C(68)	11562(4)	7321(6)	4328(2)	40(2)
C(69)	10163(5)	9308(12)	5513(3)	89(4)
C(70)	10601(6)	9608(13)	5825(3)	95(4)
C(71)	11369(6)	9475(14)	5709(3)	106(4)
C(72)	11297(4)	9123(9)	5349(2)	62(2)
C(73)	5952(6)	4021(18)	728(3)	129(6)
C(74)	5594(6)	6000(14)	421(3)	116(5)
C(75)	4721(7)	4854(18)	696(4)	158(8)
C(76)	4350(7)	3691(13)	738(3)	91(3)
C(77)	3833(8)	3132(15)	562(4)	112(5)
C(78)	3437(8)	2011(19)	678(3)	128(6)
C(79)	2860(7)	1608(13)	497(4)	96(4)
C(80)	2582(6)	2159(13)	203(4)	106(4)
C(81)	2913(6)	3287(12)	104(4)	105(4)
C(82)	3503(7)	3720(11)	231(4)	100(4)
C(83)	3846(8)	257(17)	-328(5)	158(7)
C(84)	3663(8)	-200(20)	-695(5)	214(12)
C(85)	4374(8)	-268(19)	-848(6)	174(9)
C(86)	4795(7)	367(15)	-599(5)	185(10)
C(87)	3061(6)	6961(10)	644(3)	95(4)
C(88)	3547(9)	8057(16)	577(4)	132(5)
C(89)	3823(11)	8280(20)	934(4)	226(13)
C(90)	3483(16)	7620(20)	1169(5)	291(19)

C(91)	1692(9)	6345(14)	1472(4)	154(7)
C(92)	1283(7)	7250(17)	1793(8)	245(15)
C(93)	1976(9)	7680(12)	1969(5)	124(6)
C(94)	2324(16)	6710(30)	2018(5)	241(16)
C(95)	1890(6)	1785(12)	1323(3)	103(4)
C(96)	1559(12)	1085(17)	1631(6)	235(14)
C(97)	1517(8)	1822(14)	1902(3)	123(5)
C(98)	1768(9)	3157(15)	1792(5)	153(7)
C(99)	4773(5)	-235(10)	1971(3)	86(3)
C(100)	3800(6)	-494(9)	2260(3)	88(3)
C(101)	3809(4)	1209(7)	1830(2)	60(2)
C(102)	4218(5)	2287(10)	1705(2)	75(3)
C(103)	4207(5)	3492(8)	1883(2)	67(2)
C(104)	4518(5)	4604(11)	1735(3)	93(4)
C(105)	4590(6)	5567(16)	1924(3)	121(6)
C(106)	4252(6)	5933(8)	2198(3)	94(4)
C(107)	3842(6)	5008(13)	2346(3)	113(5)
C(108)	3815(5)	3687(9)	2195(2)	78(3)
C(109)	6195(7)	2590(20)	1618(4)	173(9)
C(110)	6984(11)	2400(40)	1533(6)	350(20)
C(111)	7305(8)	2760(20)	1848(6)	217(13)
C(112)	6983(6)	2093(16)	2073(3)	113(4)
C(113)	5996(6)	4638(11)	2673(3)	99(4)
C(114)	5152(6)	4845(9)	3128(3)	95(4)
C(115)	6131(4)	3297(6)	3189(2)	48(2)
C(116)	6473(4)	2199(7)	3022(2)	53(2)
C(117)	6148(5)	982(9)	2989(2)	62(2)
C(118)	5498(5)	693(9)	3092(2)	73(2)
C(119)	5267(6)	-311(9)	3087(4)	129(6)
C(120)	5570(5)	-1407(8)	2900(4)	105(4)
C(121)	6228(7)	-1029(14)	2754(3)	124(5)
C(122)	6472(7)	107(17)	2810(3)	125(6)
C(123)	8111(5)	2468(11)	3656(3)	99(4)
C(124)	8691(8)	2883(13)	3434(4)	155(7)
C(125)	8716(9)	1923(15)	3150(4)	203(11)
C(126)	8367(5)	859(9)	3257(3)	87(3)
C(127)	6179(6)	-2713(11)	3775(3)	100(4)
C(128)	5913(8)	-3503(13)	4001(3)	154(7)
C(129)	6281(5)	-3250(10)	4360(3)	87(3)
C(130)	6848(5)	-2328(8)	4282(3)	71(2)
C(131)	3848(3)	777(7)	4413(2)	51(2)
C(132)	4267(5)	-1206(8)	4572(3)	77(3)
C(133)	4952(4)	150(9)	4215(2)	74(3)
C(134)	5302(3)	1373(7)	4154(2)	50(2)
C(135)	5947(3)	1730(8)	4318(2)	54(2)
C(136)	6325(4)	2823(7)	4256(2)	51(2)
C(137)	6967(4)	3099(10)	4368(3)	83(4)
C(138)	7339(4)	2258(9)	4608(3)	69(3)
C(139)	6989(3)	1234(8)	4697(2)	65(2)
C(140)	6332(3)	917(7)	4581(2)	52(2)
C(141)	4678(3)	4734(7)	4529(2)	49(2)
C(142)	4180(5)	5070(10)	4246(2)	76(3)
C(143)	3409(4)	4748(8)	4375(2)	62(2)
C(144)	3586(3)	4376(7)	4747(2)	43(2)
K(1)	10000	7407(3)	0	68(1)
K(2)	8329(1)	8733(2)	1278(1)	69(1)
K(3)	9827(1)	7130(2)	2608(1)	51(1)
K(4)	11811(1)	5116(2)	3746(1)	39(1)
K(5)	10000	6521(2)	5000	24(1)
K(6)	5000	2849(4)	0	89(1)
K(7)	3194(1)	4251(3)	1272(1)	84(1)
K(8)	5159(1)	2213(2)	2424(1)	78(1)
K(9)	6686(1)	585(2)	3736(1)	48(1)
K(10)	5000	1878(2)	5000	27(1)
N(1)	10537(5)	9249(10)	501(2)	93(3)
N(2)	9384(5)	5327(7)	2083(2)	81(3)
N(3)	10831(4)	8909(6)	2915(2)	52(2)
N(4)	9620(2)	4562(6)	4511(2)	37(1)
N(5)	5378(5)	4782(12)	517(2)	110(4)
N(6)	4227(4)	430(7)	2104(2)	68(2)
N(7)	5637(5)	3983(7)	2936(2)	77(3)
N(8)	4468(3)	72(6)	4501(2)	42(1)
O(1)	9297(4)	5359(6)	-230(2)	83(2)

O(2)	7024(4)	8129(10)	1444(2)	108(3)
O(3)	8372(5)	11221(8)	1078(2)	109(3)
O(4)	8743(3)	7191(8)	3047(2)	78(2)
O(5)	12879(3)	6459(7)	3546(2)	74(2)
O(6)	12733(3)	3415(6)	3380(2)	74(2)
O(7)	11794(3)	2851(5)	4037(2)	66(2)
O(8)	10616(3)	8537(7)	5313(2)	99(3)
O(9)	4448(6)	822(13)	-317(3)	181(6)
O(10)	3182(5)	6683(8)	958(2)	106(3)
O(11)	2326(6)	6212(16)	1662(2)	197(7)
O(12)	2098(4)	2850(9)	1462(2)	101(3)
O(13)	6240(5)	2267(13)	1950(2)	130(4)
O(14)	7997(3)	1139(7)	3557(2)	71(2)
O(15)	6643(3)	-1811(6)	3946(2)	66(2)
O(16)	4295(2)	3891(6)	4757(2)	60(2)

Tab. 8.72 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von $[\mathbf{206} \cdot (\text{THF})_2]_{\infty}$.

Atom	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
C(1)	97(8)	101(8)	114(9)	-19(7)	-11(7)	9(7)
C(2)	101(8)	104(9)	129(10)	-52(7)	9(7)	-55(7)
C(3)	88(7)	88(7)	90(7)	-27(6)	-5(6)	18(6)
C(4)	99(9)	125(10)	109(9)	-50(8)	31(7)	-2(8)
C(5)	95(7)	71(6)	53(5)	-14(4)	8(5)	-13(5)
C(6)	108(8)	106(8)	63(6)	-1(6)	11(6)	-13(7)
C(7)	82(8)	139(11)	84(7)	4(7)	9(6)	-4(8)
C(8)	83(8)	152(14)	143(12)	-57(11)	27(8)	-39(9)
C(9)	165(14)	69(7)	101(9)	-20(6)	58(9)	-24(8)
C(10)	102(8)	121(10)	82(7)	-37(7)	21(6)	1(8)
C(11)	152(13)	141(14)	186(16)	-58(12)	78(12)	-33(11)
C(12)	148(13)	124(11)	105(10)	4(8)	-45(9)	19(10)
C(13)	65(6)	94(7)	101(8)	2(6)	8(5)	-6(5)
C(14)	130(10)	106(9)	109(9)	9(7)	35(8)	-10(8)
C(15)	146(11)	133(11)	75(7)	-46(7)	15(7)	-48(9)
C(16)	400(30)	230(20)	290(20)	-210(20)	270(30)	-240(20)
C(17)	134(11)	151(12)	86(8)	-8(8)	29(7)	-77(10)
C(18)	112(11)	185(18)	185(16)	-1(14)	7(11)	50(12)
C(19)	164(12)	166(13)	59(6)	23(7)	-10(7)	-79(11)
C(20)	192(14)	112(10)	117(10)	46(8)	-82(10)	-73(10)
C(21)	136(10)	125(10)	54(6)	30(6)	0(6)	33(8)
C(22)	104(8)	84(7)	65(6)	0(5)	6(5)	3(6)
C(23)	86(8)	71(7)	185(13)	18(8)	-3(8)	-4(6)
C(24)	174(12)	78(7)	80(7)	42(6)	39(7)	73(8)
C(25)	152(9)	48(5)	66(5)	0(4)	-78(6)	10(5)
C(26)	780(60)	42(7)	430(30)	-21(13)	-540(40)	22(17)
C(27)	55(6)	51(5)	153(10)	25(6)	-35(6)	-2(4)
C(28)	83(6)	53(5)	98(7)	11(5)	6(5)	33(5)
C(29)	123(9)	58(6)	65(6)	11(4)	-18(6)	28(6)
C(30)	119(9)	57(5)	45(5)	10(4)	-17(5)	-13(6)
C(31)	97(7)	97(8)	45(5)	-8(5)	-8(5)	-54(6)
C(32)	94(7)	85(6)	46(4)	25(4)	5(4)	32(6)
C(33)	87(7)	95(7)	74(6)	-1(5)	4(5)	34(6)
C(34)	48(7)	1100(90)	163(15)	310(30)	32(9)	100(20)
C(35)	53(5)	152(11)	91(7)	58(7)	0(5)	16(6)
C(36)	91(7)	102(8)	77(6)	-5(6)	20(5)	-28(6)
C(37)	145(10)	34(4)	110(8)	15(5)	17(7)	-20(5)
C(38)	75(6)	72(6)	84(6)	29(5)	-24(5)	18(5)
C(39)	42(4)	26(3)	58(4)	-5(3)	-9(3)	-14(3)
C(40)	84(6)	58(5)	42(4)	5(3)	-15(4)	25(4)
C(41)	82(6)	23(3)	55(4)	11(3)	-47(4)	1(3)
C(42)	59(5)	55(5)	62(5)	-11(4)	-3(4)	12(4)
C(43)	101(7)	3(3)	120(8)	14(4)	-67(6)	-2(3)
C(44)	212(15)	28(5)	98(8)	3(5)	11(9)	26(6)
C(45)	158(11)	66(7)	115(9)	44(6)	67(8)	70(7)
C(46)	46(4)	58(5)	124(8)	61(6)	13(5)	7(4)
C(47)	63(5)	72(5)	65(5)	-17(4)	-2(4)	-27(4)
C(48)	189(14)	137(11)	101(9)	-45(8)	78(9)	-114(11)
C(49)	330(20)	127(11)	162(12)	-85(10)	197(15)	-155(14)
C(50)	81(6)	57(5)	62(5)	-14(4)	32(4)	-16(4)

C(51)	147(11)	90(8)	80(7)	-1(6)	-37(7)	-20(8)
C(52)	390(30)	85(9)	56(7)	-9(7)	49(12)	33(13)
C(53)	134(13)	143(15)	270(30)	-97(17)	58(16)	28(11)
C(54)	99(9)	235(18)	89(8)	-43(10)	-43(7)	88(11)
C(55)	242(14)	46(5)	54(5)	-14(4)	-8(7)	-68(7)
C(56)	236(15)	81(7)	59(6)	4(5)	6(7)	-108(9)
C(57)	120(7)	49(5)	46(4)	7(3)	9(4)	-36(5)
C(58)	32(3)	62(4)	48(4)	6(3)	3(3)	7(3)
C(59)	48(4)	61(5)	74(5)	6(4)	-9(4)	-44(4)
C(60)	57(5)	79(6)	94(7)	9(5)	-44(5)	-20(4)
C(61)	40(4)	40(4)	65(5)	-2(3)	13(3)	-10(3)
C(62)	54(5)	86(6)	61(5)	-36(5)	33(4)	-55(5)
C(63)	31(3)	28(3)	69(5)	-19(3)	34(3)	-22(3)
C(64)	17(3)	49(4)	69(5)	8(4)	15(3)	0(3)
C(65)	29(3)	50(4)	63(5)	4(4)	10(3)	3(3)
C(66)	27(3)	50(4)	71(5)	0(4)	10(3)	-8(3)
C(67)	28(3)	46(4)	61(5)	-33(4)	28(3)	-23(3)
C(68)	41(4)	38(4)	43(4)	-3(3)	20(3)	-27(3)
C(69)	53(5)	120(9)	92(7)	-60(6)	-7(5)	49(6)
C(70)	111(9)	118(10)	55(6)	-3(6)	13(6)	51(8)
C(71)	106(9)	134(11)	72(7)	-5(7)	-51(6)	39(8)
C(72)	37(4)	66(5)	82(6)	-17(5)	-17(4)	-10(4)
C(73)	92(9)	241(19)	54(6)	-8(9)	-14(6)	-30(10)
C(74)	76(7)	166(13)	109(9)	-67(9)	33(7)	-37(8)
C(75)	131(11)	213(17)	135(11)	-129(12)	74(9)	-92(12)
C(76)	110(9)	109(9)	54(6)	20(6)	3(6)	2(8)
C(77)	108(10)	148(12)	85(9)	-68(9)	58(8)	-50(9)
C(78)	115(11)	197(17)	73(8)	-58(10)	27(7)	-11(12)
C(79)	101(9)	76(8)	116(10)	-6(8)	42(8)	-3(7)
C(80)	75(7)	79(8)	164(13)	-21(9)	-2(8)	11(7)
C(81)	74(8)	64(7)	178(13)	-30(8)	12(8)	13(6)
C(82)	124(11)	64(7)	117(10)	-35(7)	57(9)	-12(7)
C(83)	160(14)	141(14)	183(16)	-47(12)	116(13)	-7(11)
C(84)	109(12)	290(30)	250(20)	-170(20)	89(13)	-21(14)
C(85)	125(13)	158(17)	240(20)	-107(16)	-8(13)	3(12)
C(86)	100(10)	151(14)	310(20)	-164(16)	77(12)	-54(9)
C(87)	116(9)	53(6)	112(9)	-29(6)	-16(7)	-10(6)
C(88)	171(16)	120(12)	106(11)	4(9)	23(10)	9(11)
C(89)	250(20)	330(30)	108(12)	-69(16)	37(13)	-200(20)
C(90)	520(40)	260(30)	93(11)	-1(13)	40(18)	-300(30)
C(91)	246(19)	89(9)	122(11)	-30(8)	-48(11)	74(11)
C(92)	64(8)	91(11)	580(50)	-60(20)	1(16)	15(8)
C(93)	160(14)	60(7)	154(14)	-42(8)	25(11)	-19(8)
C(94)	440(40)	180(20)	98(12)	20(15)	-66(19)	-150(30)
C(95)	122(9)	101(9)	87(7)	-7(6)	11(7)	-19(7)
C(96)	300(30)	160(16)	260(20)	-128(16)	210(20)	-153(17)
C(97)	150(11)	155(13)	60(6)	33(7)	-28(7)	-70(10)
C(98)	180(15)	109(11)	182(15)	-21(11)	125(13)	-53(11)
C(99)	91(7)	80(7)	88(7)	-29(5)	9(5)	-8(5)
C(100)	116(8)	64(6)	87(7)	13(5)	31(6)	-2(6)
C(101)	77(5)	51(4)	48(4)	-5(3)	-31(4)	4(4)
C(102)	78(6)	87(7)	60(5)	3(5)	-9(4)	-21(5)
C(103)	111(7)	53(5)	35(4)	5(3)	5(4)	21(5)
C(104)	74(6)	96(8)	106(8)	53(7)	-36(6)	-26(6)
C(105)	76(7)	213(16)	74(7)	-32(9)	-2(6)	-80(9)
C(106)	111(8)	32(4)	133(10)	-18(5)	-49(7)	-9(5)
C(107)	92(8)	149(11)	100(8)	-88(8)	30(6)	-45(8)
C(108)	89(7)	69(6)	74(6)	-27(5)	-11(5)	-15(5)
C(109)	99(10)	300(20)	125(11)	84(14)	25(8)	93(13)
C(110)	148(18)	740(80)	180(20)	-30(30)	128(17)	0(30)
C(111)	97(11)	270(20)	280(20)	150(20)	-56(13)	-118(14)
C(112)	78(7)	164(13)	98(8)	4(9)	13(6)	-24(8)
C(113)	135(10)	90(8)	70(6)	-12(6)	-19(6)	-48(7)
C(114)	119(9)	64(6)	97(7)	-21(5)	-33(6)	43(6)
C(115)	65(5)	28(3)	49(4)	1(3)	-8(3)	-34(3)
C(116)	45(4)	53(4)	60(4)	6(4)	7(3)	-2(3)
C(117)	72(6)	70(5)	41(4)	13(4)	-30(4)	-5(4)
C(118)	89(7)	66(6)	64(5)	-7(5)	12(5)	17(5)
C(119)	112(8)	42(5)	243(15)	92(7)	102(9)	38(5)
C(120)	67(6)	30(4)	213(13)	25(6)	-54(7)	-1(4)
C(121)	107(10)	151(12)	110(9)	-84(9)	-34(8)	54(9)
C(122)	114(10)	205(16)	55(6)	6(8)	-3(6)	-92(11)
C(123)	66(6)	117(9)	117(9)	-37(7)	22(6)	-42(6)

C(124)	193(15)	120(11)	161(13)	-81(10)	92(12)	-94(11)
C(125)	251(19)	154(14)	220(17)	-122(13)	189(16)	-129(14)
C(126)	88(7)	77(6)	98(7)	-40(6)	40(6)	-40(5)
C(127)	133(9)	99(8)	69(6)	-42(6)	15(6)	-68(7)
C(128)	209(14)	148(12)	100(8)	48(8)	-31(9)	-153(12)
C(129)	68(6)	73(6)	118(8)	8(6)	-7(5)	-41(5)
C(130)	69(6)	50(5)	96(7)	-4(4)	12(5)	-18(4)
C(131)	25(3)	70(5)	56(4)	-2(4)	-21(3)	-1(3)
C(132)	60(5)	47(5)	122(8)	4(5)	-26(5)	-16(4)
C(133)	46(4)	108(7)	68(5)	-55(5)	5(4)	-39(5)
C(134)	43(4)	66(5)	38(4)	-7(3)	-5(3)	-15(4)
C(135)	22(3)	83(6)	59(4)	-43(4)	20(3)	-15(3)
C(136)	47(4)	61(4)	45(4)	-12(3)	19(3)	-33(4)
C(137)	47(5)	108(8)	99(7)	-62(6)	55(5)	-41(5)
C(138)	31(4)	77(6)	102(7)	-42(5)	24(4)	-16(4)
C(139)	25(4)	70(5)	102(6)	-42(5)	16(4)	4(4)
C(140)	24(3)	48(4)	85(5)	-39(4)	26(3)	-10(3)
C(141)	37(4)	43(4)	68(5)	31(3)	6(3)	-15(3)
C(142)	87(6)	87(6)	53(5)	31(5)	-17(4)	-36(5)
C(143)	84(6)	70(5)	29(3)	2(3)	-30(4)	-9(4)
C(144)	22(3)	59(4)	45(4)	10(3)	-10(3)	16(3)
K(1)	87(2)	57(2)	61(2)	0	-1(1)	0
K(2)	77(1)	74(1)	55(1)	10(1)	12(1)	11(1)
K(3)	47(1)	65(1)	42(1)	10(1)	2(1)	-3(1)
K(4)	32(1)	42(1)	44(1)	11(1)	3(1)	-5(1)
K(5)	16(1)	20(1)	36(1)	0	0(1)	0
K(6)	87(2)	128(3)	51(2)	0	4(2)	0
K(7)	69(1)	121(2)	63(1)	16(1)	11(1)	-9(1)
K(8)	104(2)	43(1)	80(1)	-14(1)	-53(1)	9(1)
K(9)	47(1)	54(1)	45(1)	2(1)	8(1)	-9(1)
K(10)	17(1)	29(1)	36(1)	0	-4(1)	0
N(1)	84(6)	109(7)	83(6)	-25(6)	-17(5)	-9(6)
N(2)	89(6)	50(4)	102(6)	7(4)	-39(5)	12(4)
N(3)	74(4)	30(3)	49(4)	3(3)	-25(3)	-12(3)
N(4)	10(2)	58(4)	44(3)	-13(3)	-1(2)	-16(2)
N(5)	115(7)	154(10)	61(5)	-41(6)	8(5)	-33(7)
N(6)	79(5)	54(4)	69(5)	1(4)	-22(4)	-1(4)
N(7)	135(7)	37(4)	55(4)	-20(3)	-37(5)	-15(4)
N(8)	24(3)	39(3)	60(4)	-9(3)	-8(2)	-3(2)
O(1)	86(5)	57(4)	107(5)	-11(4)	19(4)	-13(3)
O(2)	77(5)	142(8)	103(6)	5(6)	2(4)	-8(5)
O(3)	168(8)	81(5)	77(5)	23(4)	6(5)	-22(5)
O(4)	33(3)	98(5)	102(5)	-3(4)	6(3)	-4(3)
O(5)	85(4)	76(4)	64(4)	-8(3)	30(3)	-37(4)
O(6)	66(4)	48(3)	111(5)	-12(3)	28(3)	8(3)
O(7)	112(5)	27(2)	58(3)	1(2)	5(3)	-43(3)
O(8)	35(3)	89(5)	175(7)	-100(5)	25(4)	-9(3)
O(9)	138(9)	210(13)	198(12)	-134(11)	37(8)	-24(8)
O(10)	140(7)	92(6)	86(5)	7(5)	6(5)	-9(5)
O(11)	162(9)	340(20)	86(6)	5(9)	27(6)	110(12)
O(12)	89(5)	136(7)	80(5)	-7(5)	24(4)	-37(5)
O(13)	113(7)	204(11)	75(5)	40(6)	20(5)	29(7)
O(14)	71(4)	76(4)	69(4)	-9(3)	25(3)	-20(3)
O(15)	93(4)	53(3)	52(3)	-8(3)	-1(3)	-41(3)
O(16)	25(2)	68(4)	86(4)	51(3)	7(2)	5(2)

8.2.8.3 Kristallstruktur von 220

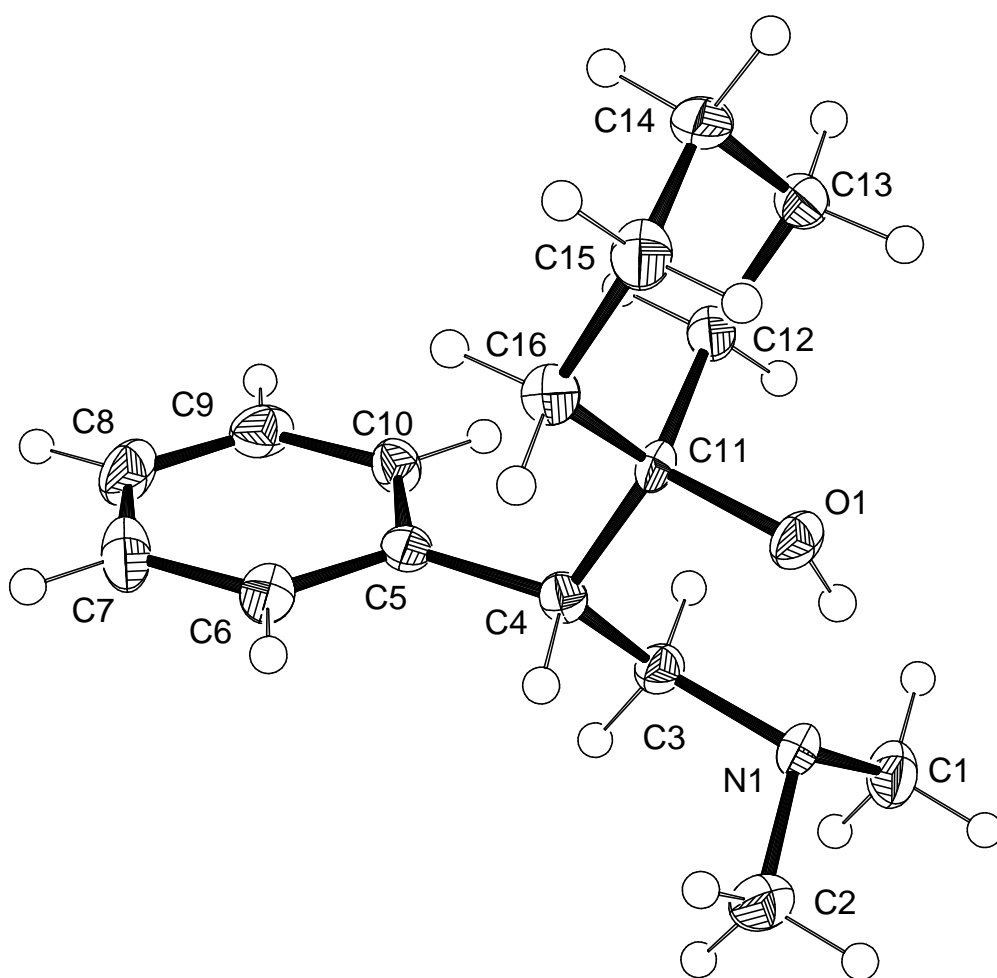


Abb. 8.37 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung **220** im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.73 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von **220**.

Atom	x	y	z	U(eq)
O(1)	4325(2)	652(1)	7583(2)	22(1)
N(1)	2434(2)	-350(1)	6426(2)	20(1)
C(4)	2762(3)	814(1)	5300(2)	18(1)
C(11)	4363(3)	973(1)	6111(2)	18(1)
C(14)	7500(3)	1672(1)	6405(3)	29(1)
C(3)	2518(3)	46(1)	5021(2)	21(1)
C(13)	7383(3)	912(1)	6105(3)	25(1)
C(10)	3169(3)	1020(1)	2453(3)	23(1)
C(9)	2841(3)	1376(1)	1150(3)	30(1)
C(16)	4501(2)	1736(1)	6408(3)	23(1)
C(12)	5850(3)	728(1)	5261(2)	22(1)
C(5)	2472(3)	1204(1)	3831(3)	21(1)
C(6)	1449(3)	1761(1)	3845(3)	24(1)
C(1)	2608(3)	-1078(1)	6055(3)	32(1)
C(7)	1123(3)	2122(1)	2529(3)	33(1)
C(15)	6035(3)	1923(1)	7239(2)	27(1)
C(2)	901(3)	-251(1)	7186(2)	33(1)
C(8)	1828(3)	1930(1)	1182(3)	35(1)

Tab. 8.74 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von **220**.

Atom	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
O(1)	28(1)	25(1)	14(1)	4(1)	-3(1)	-5(1)
N(1)	24(1)	18(1)	19(1)	6(1)	0(1)	0(1)
C(4)	19(2)	20(1)	16(1)	-1(1)	1(1)	3(1)
C(11)	21(2)	17(1)	16(1)	6(1)	-1(1)	1(1)
C(14)	22(2)	31(1)	34(1)	6(1)	-7(2)	-9(1)
C(3)	22(2)	23(1)	19(1)	3(1)	-2(1)	-3(1)
C(13)	21(2)	30(1)	24(1)	4(1)	0(2)	2(1)
C(10)	23(2)	27(1)	20(1)	1(1)	-2(1)	3(1)
C(9)	29(2)	41(1)	20(1)	5(1)	1(2)	-7(1)
C(16)	25(2)	21(1)	22(1)	-3(1)	0(1)	1(1)
C(12)	21(2)	23(1)	21(1)	3(1)	-1(1)	2(1)
C(5)	17(1)	21(1)	24(1)	1(1)	-4(1)	-4(1)
C(6)	28(2)	22(1)	23(1)	-1(1)	-4(1)	-2(1)
C(1)	37(2)	23(1)	36(2)	6(1)	-8(2)	0(1)
C(7)	38(2)	24(1)	38(2)	4(2)	-13(2)	5(1)
C(15)	33(2)	21(1)	29(2)	-2(1)	-9(1)	-3(1)
C(2)	30(2)	34(2)	33(2)	6(1)	8(2)	0(1)
C(8)	41(2)	37(2)	26(2)	14(2)	-10(2)	-8(1)

8.2.8.4 Kristallstruktur von **221**

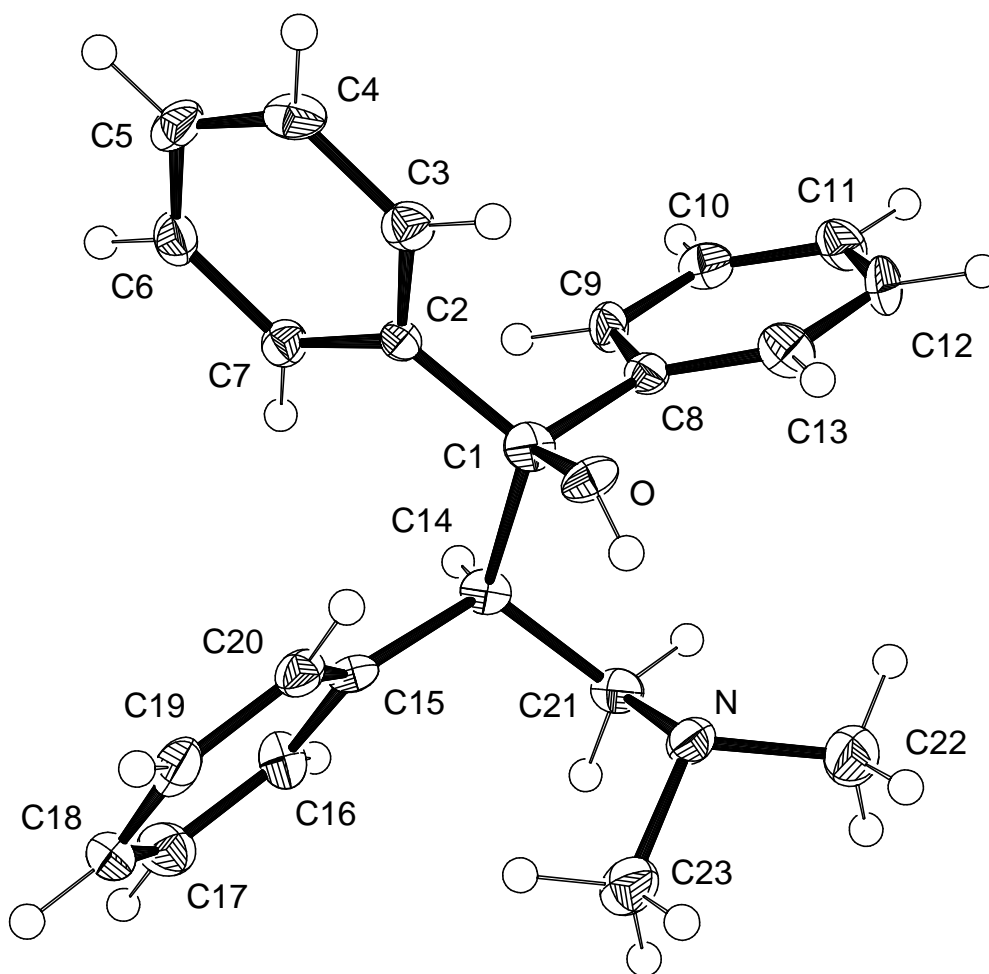


Abb. 8.38 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung **221** im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.75 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von **221**.

Atom	x	y	z	U(eq)
C(1)	3274(1)	778(1)	5489(4)	20(1)
C(2)	3121(1)	327(1)	5107(4)	17(1)
C(3)	2939(1)	136(1)	6862(4)	22(1)
C(4)	2776(1)	-258(1)	6535(4)	23(1)
C(5)	2794(1)	-470(1)	4470(4)	24(1)
C(6)	2972(1)	-281(1)	2725(4)	24(1)
C(7)	3136(1)	116(1)	3032(4)	20(1)
C(8)	3000(1)	1129(1)	5103(4)	17(1)
C(9)	2833(1)	1148(1)	3030(4)	21(1)
C(10)	2585(1)	1459(1)	2679(4)	24(1)
C(11)	2497(1)	1749(1)	4379(4)	26(1)
C(12)	2657(1)	1723(1)	6404(4)	28(1)
C(13)	2906(1)	1411(1)	6787(5)	25(1)
C(14)	3577(1)	881(1)	3888(4)	16(1)
C(15)	3854(1)	535(1)	3777(4)	21(1)
C(16)	4049(1)	524(1)	1844(4)	23(1)
C(17)	4323(1)	246(1)	1628(4)	30(1)
C(18)	4403(1)	-33(1)	3387(4)	26(1)
C(19)	4207(1)	-33(1)	5312(4)	26(1)
C(20)	3933(1)	245(1)	5505(4)	21(1)
C(21)	3720(1)	1342(1)	4339(4)	21(1)
C(22)	3789(1)	1850(1)	7457(4)	34(1)
C(23)	4207(1)	1293(1)	6849(4)	30(1)
N	3846(1)	1399(1)	6685(3)	22(1)
O	3386(1)	794(1)	7791(3)	21(1)

Tab. 8.76 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von **221**.

Atom	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
C(1)	23(2)	29(2)	7(2)	-3(2)	3(1)	-3(2)
C(2)	12(2)	15(2)	24(2)	-1(2)	-1(1)	2(1)
C(3)	19(2)	22(2)	25(2)	2(2)	-2(1)	1(1)
C(4)	19(2)	23(2)	28(2)	15(2)	3(2)	-1(2)
C(5)	22(2)	14(2)	37(2)	5(2)	-8(2)	-2(2)
C(6)	21(2)	22(2)	28(2)	-7(2)	-5(1)	5(2)
C(7)	21(2)	17(2)	20(2)	2(2)	1(1)	0(1)
C(8)	16(2)	15(2)	19(2)	3(2)	2(1)	0(1)
C(9)	22(2)	22(2)	18(2)	-8(2)	-2(1)	2(1)
C(10)	22(2)	25(2)	26(2)	5(2)	-3(2)	-2(2)
C(11)	20(2)	25(2)	34(2)	1(2)	-1(2)	9(2)
C(12)	33(2)	25(2)	25(2)	-13(2)	7(2)	2(2)
C(13)	23(2)	29(2)	24(2)	3(2)	-4(1)	5(2)
C(14)	18(2)	23(2)	6(2)	5(1)	-2(1)	0(1)
C(15)	14(2)	22(2)	28(2)	-4(2)	-2(1)	-5(1)
C(16)	29(2)	22(2)	17(2)	3(1)	3(1)	5(1)
C(17)	26(2)	36(2)	28(2)	-5(2)	7(2)	-2(2)
C(18)	18(2)	23(2)	38(2)	-6(2)	0(1)	2(2)
C(19)	30(2)	16(2)	30(2)	-2(2)	-6(2)	-2(2)
C(20)	23(2)	20(2)	19(2)	-2(2)	5(1)	-6(1)
C(21)	18(2)	19(2)	26(2)	7(2)	-1(1)	1(1)
C(22)	30(2)	32(2)	41(2)	-10(2)	-6(2)	2(2)
C(23)	29(2)	19(2)	43(2)	3(2)	-9(2)	0(2)
N	19(1)	19(1)	27(1)	-2(1)	-4(1)	-2(1)
O	20(1)	24(1)	18(1)	0(1)	-7(1)	-7(1)

8.2.8.5 Kristallstruktur von 234

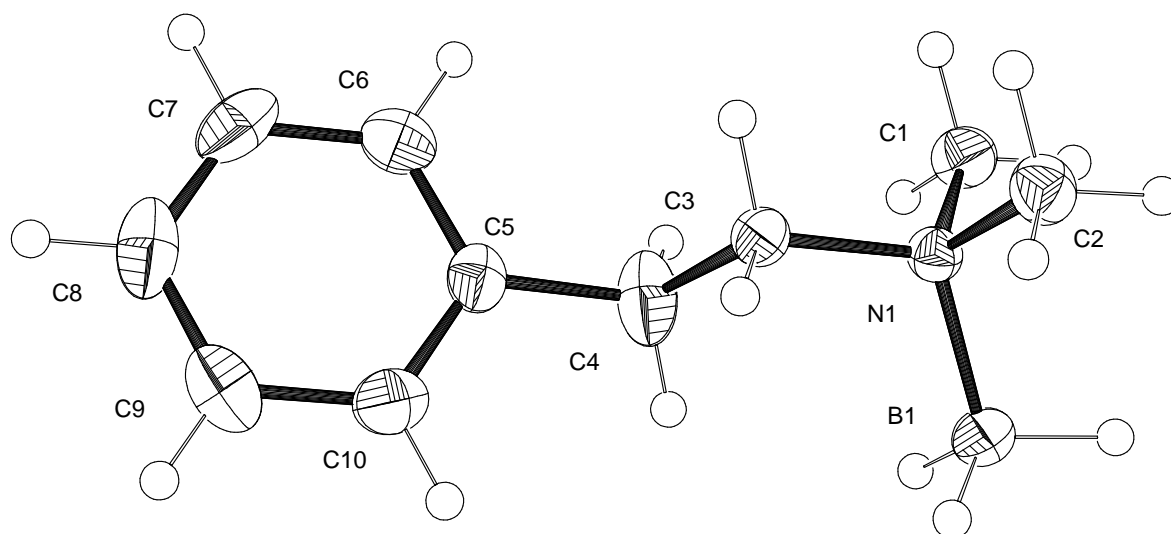


Abb. 8.39 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung **234** im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.77 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von **234**.

Atom	x	y	z	U(eq)
C(8)	8203(2)	9836(3)	2618(1)	45(1)
B(1)	2136(3)	4065(3)	4284(1)	31(1)
C(7)	7969(2)	11074(2)	3111(1)	43(1)
C(2)	443(2)	7729(2)	4119(1)	31(1)
C(9)	7410(2)	7763(3)	2531(1)	44(1)
C(6)	6958(2)	10201(2)	3527(1)	36(1)
C(4)	5153(2)	7033(3)	3918(1)	45(1)
C(1)	2699(2)	7727(2)	4872(1)	31(1)
C(10)	6406(2)	6892(2)	2946(1)	36(1)
C(3)	3325(2)	7809(2)	3845(1)	25(1)
N(1)	2182(2)	6850(2)	4281(1)	23(1)
C(5)	6188(2)	8069(2)	3454(1)	30(1)

Tab. 8.78 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von **234**.

Atom	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
C(8)	28(1)	63(1)	43(1)	24(1)	6(1)	4(1)
B(1)	36(1)	23(1)	35(1)	2(1)	7(1)	-1(1)
C(7)	33(1)	30(1)	63(1)	15(1)	-9(1)	-4(1)
C(2)	26(1)	32(1)	36(1)	3(1)	3(1)	3(1)
C(9)	37(1)	60(1)	35(1)	-5(1)	5(1)	9(1)
C(6)	35(1)	36(1)	35(1)	-3(1)	-3(1)	7(1)
C(4)	31(1)	62(1)	45(1)	23(1)	9(1)	9(1)
C(1)	39(1)	31(1)	24(1)	-1(1)	2(1)	-2(1)
C(10)	30(1)	31(1)	48(1)	-3(1)	-1(1)	1(1)
C(3)	29(1)	23(1)	24(1)	4(1)	3(1)	1(1)
N(1)	24(1)	22(1)	21(1)	1(1)	3(1)	1(1)
C(5)	21(1)	32(1)	35(1)	8(1)	2(1)	6(1)

8.2.8.6 Kristallstruktur von 236

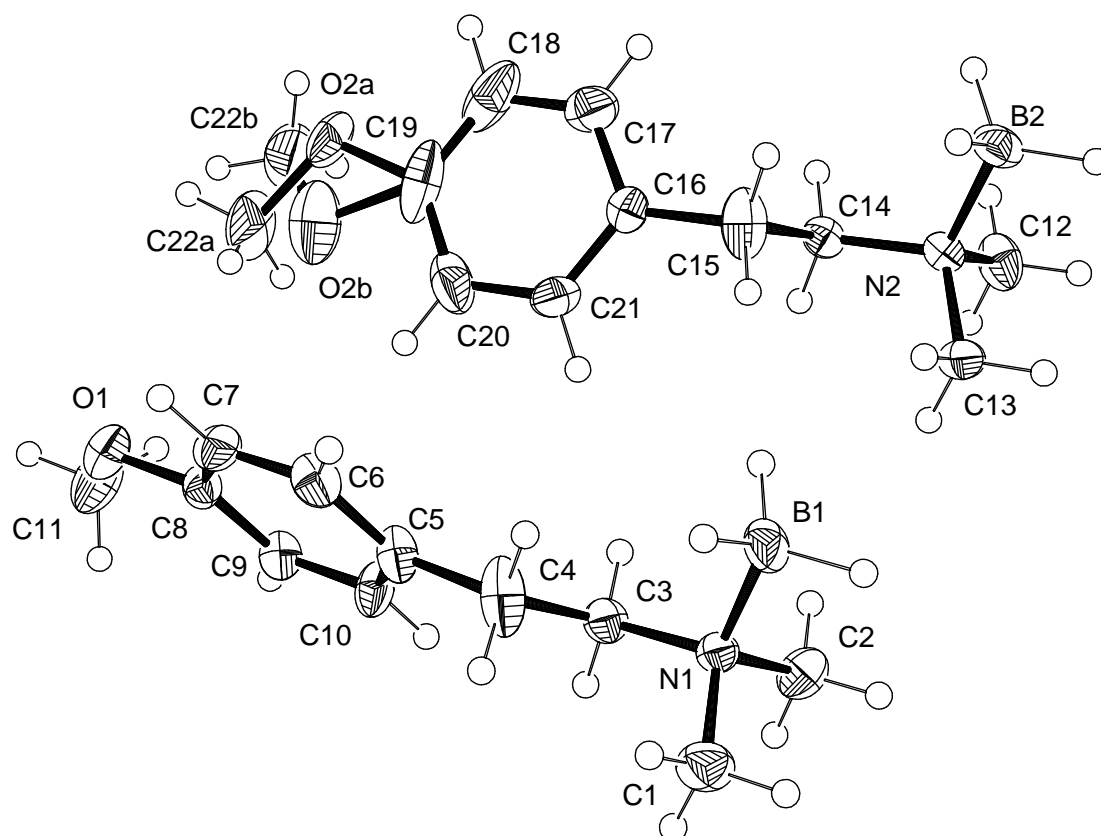


Abb. 8.40 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung **236** im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.79 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von **236**.

Atom	x	y	z	U(eq)
B(1)	2815(1)	5432(4)	6072(1)	37(1)
B(2)	1006(1)	10702(4)	4991(1)	34(1)
C(1)	3418(1)	1907(3)	6208(1)	41(1)
C(2)	2672(1)	1989(3)	5599(1)	37(1)
C(3)	2456(1)	1519(3)	6261(1)	30(1)
C(4)	2567(1)	1990(3)	6717(1)	50(1)
C(5)	2142(1)	997(3)	6930(1)	33(1)
C(6)	2051(1)	2089(3)	7283(1)	34(1)
C(7)	1703(1)	1176(3)	7507(1)	32(1)
C(8)	1428(1)	-821(3)	7381(1)	28(1)
C(9)	1503(1)	-1927(3)	7029(1)	29(1)
C(10)	1862(1)	-1012(3)	6810(1)	34(1)
C(11)	768(1)	-3534(3)	7489(1)	52(1)
C(12)	693(1)	7223(3)	4542(1)	40(1)
C(13)	1581(1)	7093(3)	5021(1)	34(1)
C(14)	738(1)	6847(3)	5272(1)	26(1)
C(15)	991(1)	7378(3)	5725(1)	46(1)
C(16)	685(1)	6183(3)	6003(1)	26(1)
C(17)	213(1)	7090(3)	6076(1)	45(1)
C(18)	-73(1)	6020(5)	6324(1)	67(1)
C(19)	102(1)	4002(5)	6510(1)	55(1)
C(20)	570(1)	3034(3)	6444(1)	53(1)
C(21)	858(1)	4145(3)	6190(1)	40(1)
C(22)	-115(3)	1256(8)	6971(2)	80(2)
C(23)	-551(2)	2036(17)	6756(2)	66(2)
N(1)	2843(1)	2697(2)	6042(1)	25(1)
N(2)	1008(1)	7952(2)	4963(1)	24(1)

O(1)	1095(1)	-1593(2)	7627(1)	37(1)
O(2)	-257(1)	3491(5)	6756(1)	43(1)
O(3)	-28(2)	1971(14)	6778(2)	68(2)

Tab. 8.80 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von **236**.

Atom	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
B(1)	56(2)	22(1)	36(2)	3(1)	17(1)	-1(1)
B(2)	33(1)	22(1)	47(2)	2(1)	9(1)	2(1)
C(1)	29(1)	43(1)	51(1)	7(1)	10(1)	4(1)
C(2)	37(1)	40(1)	35(1)	-10(1)	12(1)	-4(1)
C(3)	32(1)	24(1)	35(1)	2(1)	10(1)	-1(1)
C(4)	65(1)	53(1)	30(1)	4(1)	6(1)	-28(1)
C(5)	43(1)	29(1)	26(1)	1(1)	7(1)	-8(1)
C(6)	42(1)	25(1)	30(1)	-3(1)	1(1)	-5(1)
C(7)	38(1)	31(1)	24(1)	-8(1)	6(1)	2(1)
C(8)	26(1)	34(1)	22(1)	4(1)	4(1)	2(1)
C(9)	33(1)	27(1)	26(1)	-4(1)	5(1)	-7(1)
C(10)	48(1)	35(1)	22(1)	-6(1)	13(1)	-9(1)
C(11)	48(1)	64(2)	52(1)	-7(1)	28(1)	-20(1)
C(12)	53(1)	38(1)	25(1)	0(1)	2(1)	-7(1)
C(13)	32(1)	29(1)	45(1)	5(1)	17(1)	7(1)
C(14)	25(1)	21(1)	30(1)	-1(1)	6(1)	-4(1)
C(15)	48(1)	55(2)	32(1)	3(1)	4(1)	-22(1)
C(16)	24(1)	31(1)	22(1)	-4(1)	2(1)	-3(1)
C(17)	47(1)	58(1)	28(1)	-2(1)	2(1)	22(1)
C(18)	29(1)	140(3)	31(1)	-6(2)	6(1)	15(2)
C(19)	52(2)	88(2)	26(1)	-11(1)	13(1)	-41(2)
C(20)	100(2)	26(1)	32(1)	3(1)	16(1)	-3(1)
C(21)	43(1)	44(1)	36(1)	-1(1)	14(1)	16(1)
C(22)	128(6)	47(3)	90(4)	21(3)	76(4)	-10(3)
C(23)	85(5)	69(5)	49(4)	1(4)	24(4)	8(6)
N(1)	24(1)	23(1)	31(1)	2(1)	11(1)	2(1)
N(2)	25(1)	21(1)	25(1)	2(1)	3(1)	0(1)
O(1)	34(1)	48(1)	32(1)	-7(1)	13(1)	-8(1)
O(2)	45(2)	44(2)	50(2)	-5(2)	33(1)	-14(2)
O(3)	71(4)	86(5)	46(3)	2(3)	13(3)	-31(4)

8.2.9 Kristallstrukturen Kapitel 4.10

8.2.9.1 Kristallstruktur von $[227 \cdot (\text{THF})_2]_{\infty}$

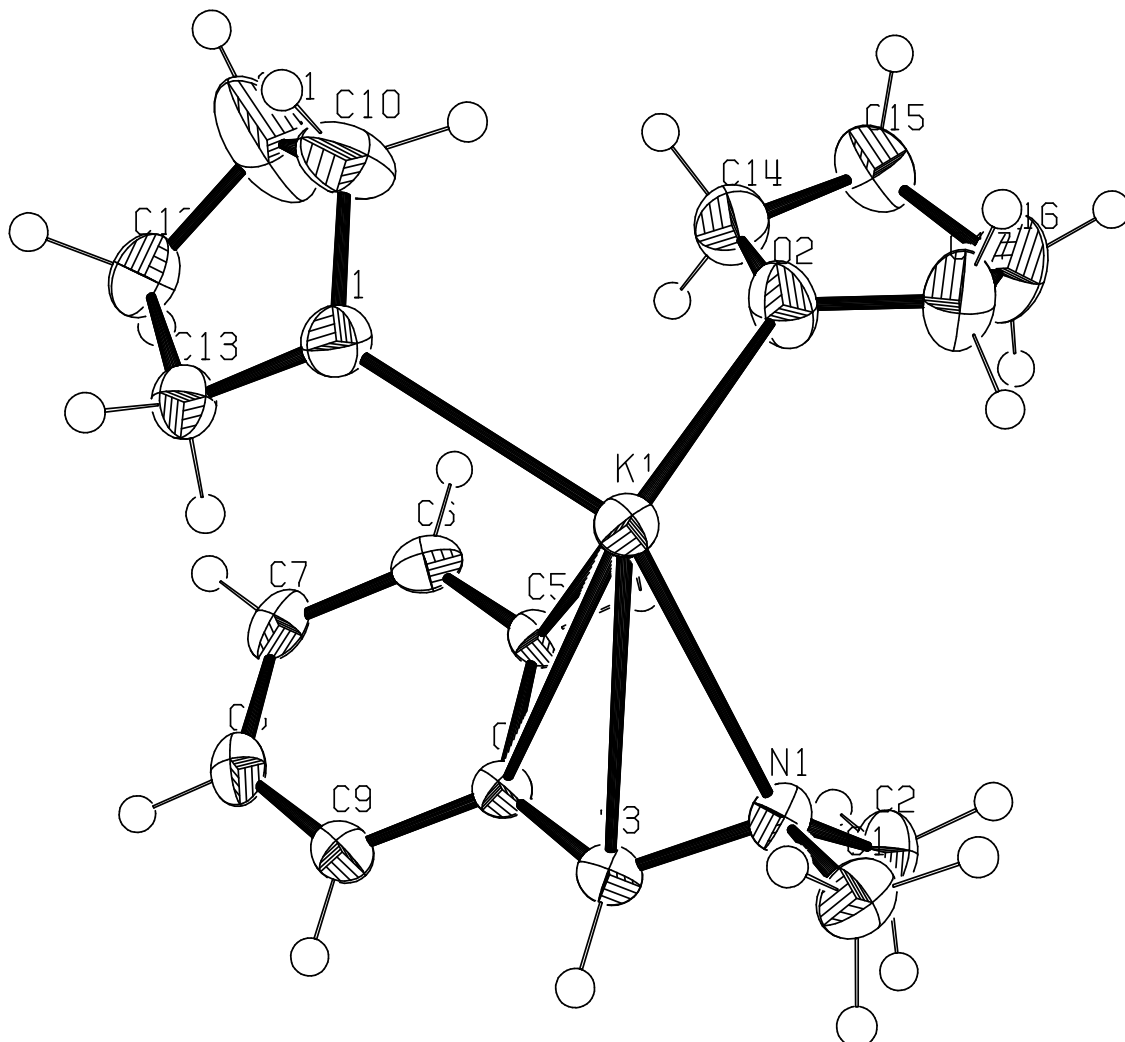


Abb. 8.41 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung $[227 \cdot (\text{THF})_2]_{\infty}$ im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.81 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von $[227 \cdot (\text{THF})_2]_{\infty}$.

Atom	x	y	z	U(eq)
C(1)	-1473(2)	988(1)	11179(2)	36(1)
C(2)	-1948(2)	856(1)	8990(2)	37(1)
C(3)	-2264(2)	2035(1)	9923(2)	25(1)
C(4)	-2046(2)	2592(1)	9142(1)	21(1)
C(5)	-909(2)	2594(1)	8401(1)	23(1)
C(6)	-691(2)	3191(1)	7699(2)	28(1)
C(7)	-1581(2)	3820(1)	7626(2)	31(1)
C(8)	-2728(2)	3829(1)	8300(2)	29(1)
C(9)	-2969(2)	3247(1)	9012(2)	26(1)
C(10)	3673(2)	3731(1)	10696(2)	50(1)
C(11)	3419(4)	4169(2)	9551(3)	94(1)
C(12)	1996(2)	4590(1)	9516(2)	37(1)
C(13)	1267(2)	4227(1)	10468(2)	31(1)

C(14)	3172(3)	2106(1)	8214(2)	47(1)
C(15)	3794(3)	1516(1)	7536(2)	46(1)
C(16)	3251(4)	832(1)	8049(2)	58(1)
C(17)	3200(3)	1044(1)	9338(2)	48(1)
K(1)	1180(1)	2248(1)	10999(1)	24(1)
N(1)	-1406(2)	1358(1)	10025(1)	26(1)
O(1)	2198(1)	3604(1)	10924(1)	32(1)
O(2)	2836(2)	1797(1)	9306(1)	41(1)

Tab. 8.82 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von $[\mathbf{227} \cdot (\text{THF})_2]_{\infty}$.

Atom	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
C(1)	39(1)	38(1)	28(1)	9(1)	1(1)	-4(1)
C(2)	46(1)	30(1)	32(1)	-3(1)	2(1)	1(1)
C(3)	24(1)	30(1)	22(1)	-1(1)	4(1)	1(1)
C(4)	19(1)	26(1)	16(1)	-5(1)	-2(1)	-1(1)
C(5)	20(1)	27(1)	18(1)	-1(1)	-1(1)	3(1)
C(6)	24(1)	37(1)	19(1)	-1(1)	0(1)	-7(1)
C(7)	36(1)	25(1)	24(1)	3(1)	-6(1)	-7(1)
C(8)	30(1)	25(1)	27(1)	-7(1)	-8(1)	2(1)
C(9)	23(1)	31(1)	24(1)	-5(1)	1(1)	1(1)
C(10)	37(1)	65(2)	52(1)	16(1)	20(1)	11(1)
C(11)	116(3)	78(2)	117(3)	56(2)	91(2)	51(2)
C(12)	50(1)	31(1)	29(1)	3(1)	6(1)	-4(1)
C(13)	34(1)	27(1)	29(1)	1(1)	3(1)	2(1)
C(14)	55(1)	41(1)	53(1)	8(1)	29(1)	2(1)
C(15)	54(1)	54(1)	32(1)	4(1)	16(1)	12(1)
C(16)	94(2)	43(1)	40(1)	-11(1)	23(1)	-5(1)
C(17)	76(2)	36(1)	38(1)	2(1)	24(1)	3(1)
K(1)	23(1)	26(1)	20(1)	2(1)	1(1)	0(1)
N(1)	30(1)	25(1)	21(1)	1(1)	2(1)	-2(1)
O(1)	32(1)	30(1)	32(1)	8(1)	5(1)	1(1)
O(2)	55(1)	36(1)	37(1)	0(1)	23(1)	10(1)

8.2.9.2 Kristallstruktur von [228·(THF)₃]

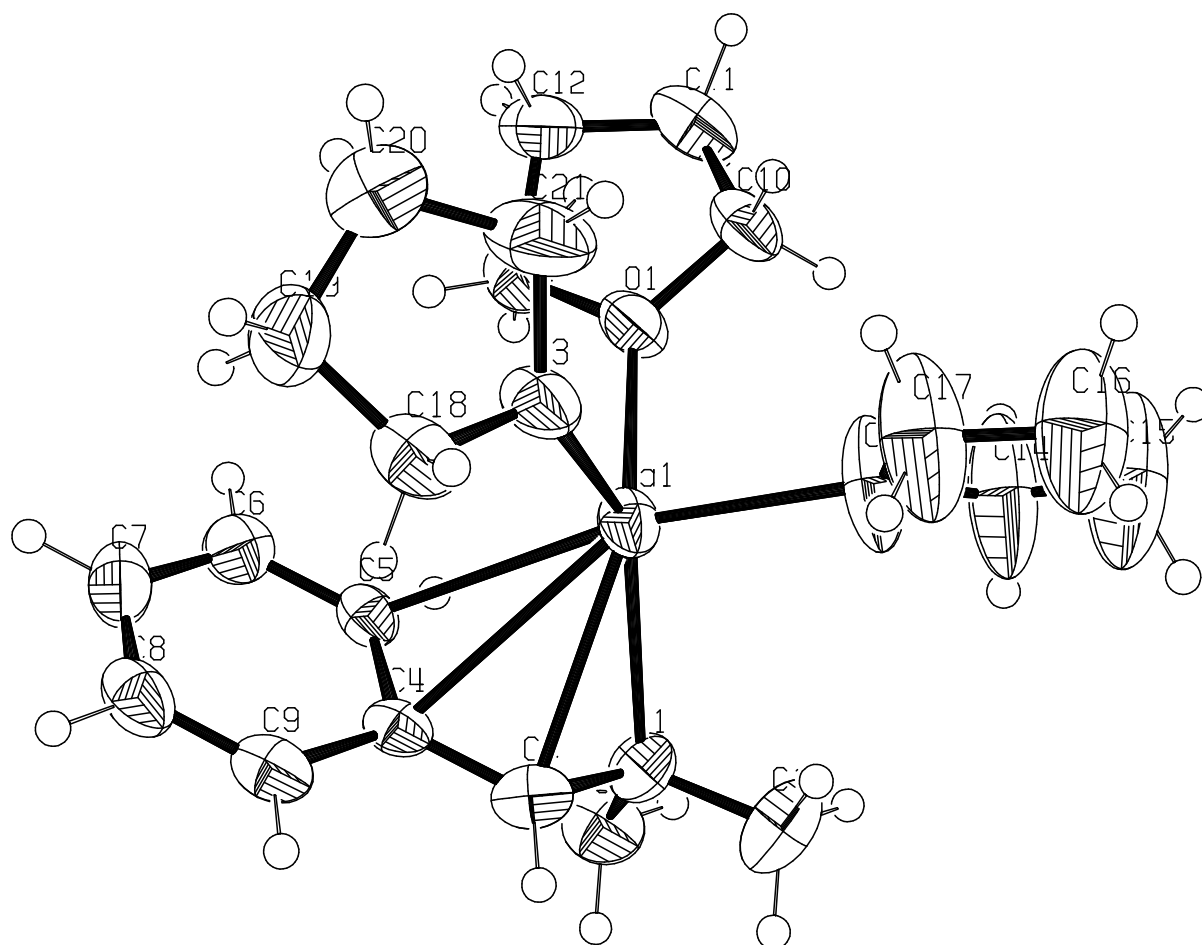


Abb. 8.42 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung [228·(THF)₃] im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.83 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{Å}^2 \cdot 10^3$) von [228·(THF)₃].

Atom	x	y	z	U(eq)
C(1)	8308(3)	5730(4)	-907(2)	71(1)
C(2)	9409(2)	7009(3)	-18(2)	56(1)
C(3)	7565(2)	6885(3)	46(1)	42(1)
C(4)	7462(2)	7110(2)	753(1)	33(1)
C(5)	8108(2)	6466(3)	1331(1)	36(1)
C(6)	7942(2)	6675(3)	2021(1)	46(1)
C(7)	7139(2)	7558(3)	2205(2)	54(1)
C(8)	6505(2)	8233(3)	1656(2)	50(1)
C(9)	6650(2)	8038(3)	967(2)	44(1)
C(10)	8775(2)	815(2)	1036(2)	51(1)
C(11)	9386(3)	199(3)	1688(2)	65(1)
C(12)	9087(3)	1191(3)	2265(2)	61(1)
C(13)	9000(3)	2666(3)	1897(2)	62(1)
C(14)	8051(3)	1633(6)	-897(2)	115(2)
C(15)	7507(3)	814(6)	-1407(2)	132(2)
C(16)	6425(3)	739(6)	-1245(2)	116(2)
C(17)	6358(3)	1659(5)	-683(2)	112(2)
C(18)	5251(2)	4548(3)	934(2)	55(1)
C(19)	5118(3)	4310(3)	1690(2)	78(1)
C(20)	5461(4)	2731(4)	1827(2)	104(2)
C(21)	5822(3)	2202(3)	1176(2)	78(1)
N(1)	8463(2)	6109(2)	-160(1)	42(1)

Na(1)	7606(1)	4045(1)	434(1)	39(1)
O(1)	8601(2)	2367(2)	1181(1)	49(1)
O(2)	7347(2)	2289(3)	-465(1)	80(1)
O(3)	6007(1)	3494(2)	779(1)	52(1)

Tab. 8.84 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von [228·(THF)₃].

Atom	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
C(1)	71(2)	102(3)	41(2)	2(2)	15(2)	-1(2)
C(2)	40(2)	55(2)	76(2)	6(2)	23(2)	-7(1)
C(3)	30(1)	46(2)	49(2)	12(1)	3(1)	-1(1)
C(4)	26(1)	27(1)	48(2)	4(1)	7(1)	-7(1)
C(5)	32(1)	30(1)	46(2)	-3(1)	7(1)	-2(1)
C(6)	46(2)	45(1)	45(2)	-2(1)	2(1)	-7(1)
C(7)	57(2)	51(2)	57(2)	-17(1)	22(2)	-9(2)
C(8)	43(2)	36(1)	75(2)	-6(1)	24(2)	-2(1)
C(9)	31(1)	35(1)	66(2)	7(1)	10(1)	0(1)
C(10)	47(2)	32(1)	76(2)	-10(1)	18(2)	-7(1)
C(11)	61(2)	37(1)	94(2)	1(2)	3(2)	5(2)
C(12)	64(2)	50(2)	70(2)	16(1)	19(2)	4(2)
C(13)	90(3)	42(2)	55(2)	-2(1)	10(2)	9(2)
C(14)	57(2)	164(4)	129(4)	-102(3)	32(2)	-19(3)
C(15)	72(3)	212(5)	119(4)	-101(4)	39(3)	-40(3)
C(16)	68(3)	168(4)	115(3)	-75(3)	16(2)	-37(3)
C(17)	48(2)	149(4)	142(4)	-92(3)	20(2)	-29(2)
C(18)	42(2)	43(2)	84(2)	0(1)	20(2)	-2(1)
C(19)	90(3)	71(2)	81(2)	-14(2)	45(2)	-8(2)
C(20)	165(5)	79(2)	73(3)	7(2)	37(3)	-7(3)
C(21)	71(2)	51(2)	119(3)	21(2)	43(2)	1(2)
N(1)	37(1)	52(1)	39(1)	2(1)	11(1)	-2(1)
Na(1)	37(1)	36(1)	45(1)	-7(1)	12(1)	-6(1)
O(1)	58(1)	30(1)	60(1)	-2(1)	11(1)	1(1)
O(2)	45(1)	101(2)	94(2)	-68(1)	12(1)	-12(1)
O(3)	51(1)	35(1)	75(1)	1(1)	32(1)	-5(1)

8.2.10 Kristallstrukturen Kapitel 4.12

8.2.10.1 Kristallstruktur von 237

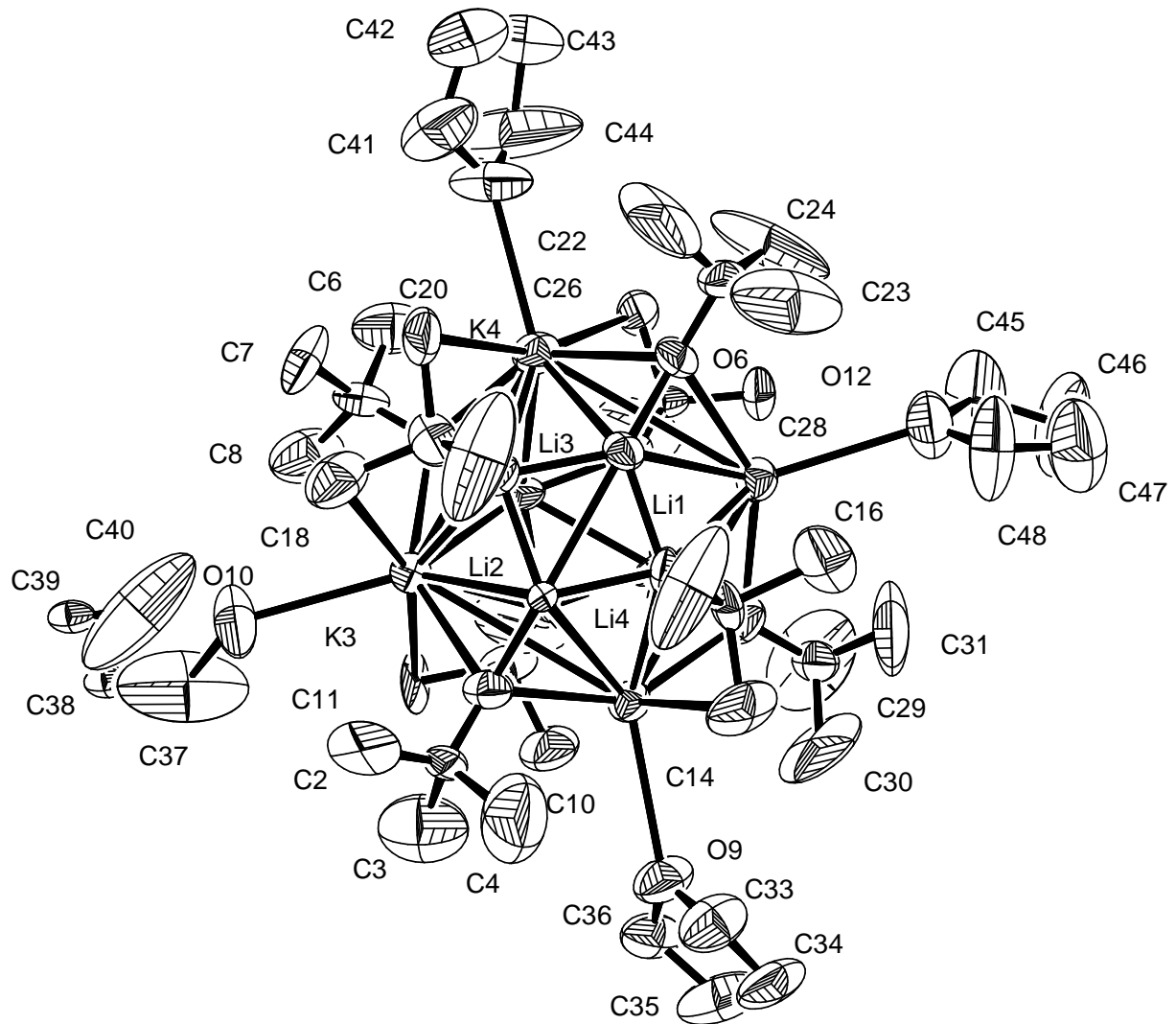


Abb. 8.43 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung **237** im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.85 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von **237**.

Atom	x	y	z	U(eq)
K(1)	41(1)	28(1)	39(1)	0
K(2)	44(1)	48(1)	50(1)	-11(1)
K(3)	54(1)	27(1)	105(2)	0
Li(1)	40(5)	34(5)	43(6)	-4(4)
Li(2)	49(6)	39(6)	61(7)	-16(5)
O(1)	44(2)	35(2)	41(2)	-8(2)
O(2)	51(2)	36(2)	40(2)	3(2)
O(3)	38(2)	28(2)	60(3)	1(2)
O(4)	63(3)	49(3)	85(4)	-37(3)
O(5)	85(5)	32(3)	69(5)	0
O(6)	73(4)	146(6)	55(3)	-18(4)
O(7)	203(15)	31(5)	400(20)	0
C(1)	44(4)	40(4)	43(4)	-5(3)
C(2)	55(5)	68(6)	160(10)	-32(6)

C(3)	131(8)	87(7)	77(7)	-5(5)
C(4)	95(7)	166(11)	158(10)	-120(9)
C(5)	53(4)	53(4)	45(4)	5(3)
C(6)	137(8)	159(10)	49(5)	13(6)
C(7)	178(10)	54(5)	105(7)	-3(5)
C(8)	99(7)	146(10)	176(11)	-81(9)
C(9)	41(4)	37(3)	71(5)	-1(3)
C(10)	69(5)	37(4)	124(8)	1(5)
C(11)	57(5)	100(7)	111(7)	-23(6)
C(12)	50(4)	60(5)	70(5)	-9(4)
C(13)	73(5)	78(6)	104(8)	-64(6)
C(14)	126(10)	300(20)	219(16)	-164(15)
C(15)	300(30)	390(30)	159(17)	-197(19)
C(16)	450(40)	164(15)	450(40)	-240(20)
C(17)	210(11)	48(5)	137(9)	-2(5)
C(18)	350(20)	42(5)	293(19)	-30(8)
C(19)	140(11)	320(20)	54(7)	-16(9)
C(20)	198(18)	410(30)	133(15)	73(15)
C(21)	130(11)	430(30)	71(9)	39(13)
C(22)	112(8)	212(14)	78(8)	-23(8)
C(23)	196(15)	40(6)	490(40)	-2(12)
C(24)	233(19)	54(6)	213(19)	13(9)

Tab. 8.86 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von 237.

Atom	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
K(1)	41(1)	28(1)	39(1)	0	19(1)	0
K(2)	44(1)	48(1)	50(1)	-11(1)	23(1)	-5(1)
K(3)	54(1)	27(1)	105(2)	0	34(1)	0
Li(1)	40(5)	34(5)	43(6)	-4(4)	20(5)	3(4)
Li(2)	49(6)	39(6)	61(7)	-16(5)	26(6)	-3(5)
O(1)	44(2)	35(2)	41(2)	-8(2)	20(2)	-3(2)
O(2)	51(2)	36(2)	40(2)	3(2)	26(2)	3(2)
O(3)	38(2)	28(2)	60(3)	1(2)	20(2)	-5(2)
O(4)	63(3)	49(3)	85(4)	-37(3)	37(3)	-4(2)
O(5)	85(5)	32(3)	69(5)	0	48(4)	0
O(6)	73(4)	146(6)	55(3)	-18(4)	31(3)	-24(4)
O(7)	203(15)	31(5)	400(20)	0	146(16)	0
C(1)	44(4)	40(4)	43(4)	-5(3)	18(3)	0(3)
C(2)	55(5)	68(6)	160(10)	-32(6)	7(6)	-6(4)
C(3)	131(8)	87(7)	77(7)	-5(5)	30(6)	-53(6)
C(4)	95(7)	166(11)	158(10)	-120(9)	75(8)	-55(7)
C(5)	53(4)	53(4)	45(4)	5(3)	27(3)	2(3)
C(6)	137(8)	159(10)	49(5)	13(6)	54(6)	64(8)
C(7)	178(10)	54(5)	105(7)	-3(5)	108(8)	20(6)
C(8)	99(7)	146(10)	176(11)	-81(9)	107(8)	-37(7)
C(9)	41(4)	37(3)	71(5)	-1(3)	23(3)	-9(3)
C(10)	69(5)	37(4)	124(8)	1(5)	21(5)	-25(4)
C(11)	57(5)	100(7)	111(7)	-23(6)	45(5)	-32(4)
C(12)	50(4)	60(5)	70(5)	-9(4)	16(4)	-17(4)
C(13)	73(5)	78(6)	104(8)	-64(6)	33(5)	-9(5)
C(14)	126(10)	300(20)	219(16)	-164(15)	44(10)	73(12)
C(15)	300(30)	390(30)	159(17)	-197(19)	4(17)	160(20)
C(16)	450(40)	164(15)	450(40)	-240(20)	370(30)	-210(20)
C(17)	210(11)	48(5)	137(9)	-2(5)	140(9)	4(6)
C(18)	350(20)	42(5)	293(19)	-30(8)	284(18)	-33(9)
C(19)	140(11)	320(20)	54(7)	-16(9)	46(8)	-109(12)
C(20)	198(18)	410(30)	133(15)	73(15)	60(14)	-104(18)
C(21)	130(11)	430(30)	71(9)	39(13)	22(8)	-96(14)
C(22)	112(8)	212(14)	78(8)	-23(8)	47(7)	-63(9)
C(23)	196(15)	40(6)	490(40)	-2(12)	140(20)	-14(8)
C(24)	233(19)	54(6)	213(19)	13(9)	42(14)	7(8)

8.2.10.2 Kristallstruktur von 238

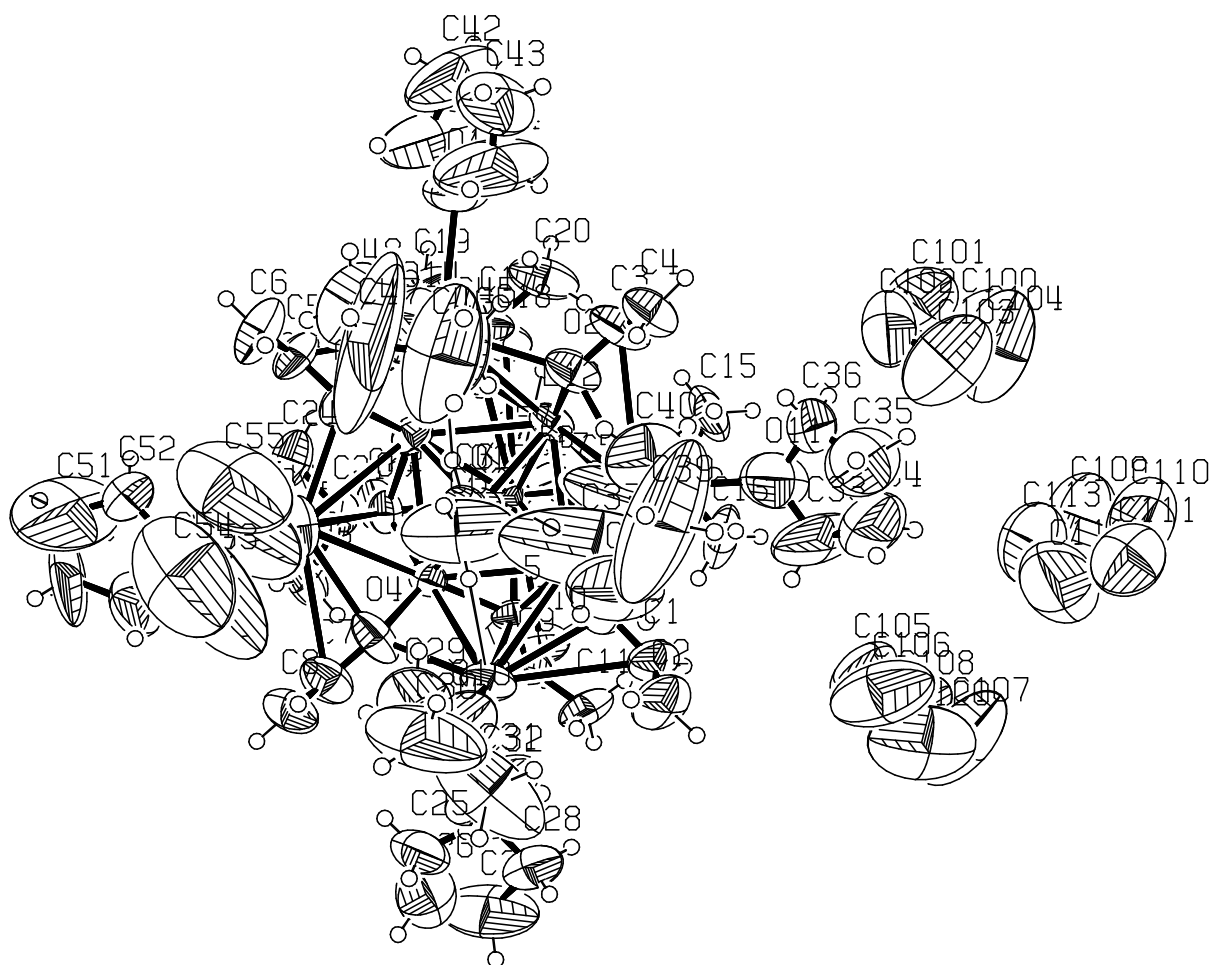


Abb. 8.44 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung **238** im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.87 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von **238**.

Atom	x	y	z	U(eq)
C(54)	-1790(30)	3230(30)	8080(30)	340(18)
C(55)	-130(30)	-3760(20)	7660(30)	430(20)
C(35)	4530(19)	2110(30)	1950(30)	730(50)
C(34)	3740(20)	2756(18)	1982(18)	315(13)
C(1)	-116(8)	2690(8)	5453(7)	111(3)
C(2)	-522(10)	2670(10)	4851(8)	149(5)
C(3)	4718(10)	-423(9)	5264(10)	130(4)
C(4)	5246(9)	-714(8)	4291(8)	128(4)
C(5)	1891(9)	-2772(8)	9392(8)	115(3)
C(6)	2130(11)	-3677(9)	9126(9)	155(4)
C(7)	-2860(12)	242(8)	9526(9)	123(4)
C(8)	-3429(9)	-218(10)	9397(10)	153(4)
C(9)	-1658(7)	3018(7)	8912(7)	81(3)
C(10)	-1453(8)	3574(6)	9597(7)	112(3)
C(11)	-1805(9)	3759(7)	8049(8)	128(4)
C(12)	-2867(8)	2823(8)	9630(8)	131(4)
C(13)	2467(9)	2597(8)	6660(7)	94(3)
C(14)	2296(10)	3186(7)	7571(8)	129(4)
C(15)	3771(9)	2234(9)	6027(8)	148(4)
C(16)	1936(11)	3350(8)	6013(9)	146(4)
C(17)	3456(8)	-290(8)	8802(8)	97(3)
C(18)	3200(8)	573(7)	9505(7)	112(3)

C(19)	3608(10)	-1278(7)	9398(10)	160(5)
C(20)	4651(8)	-378(9)	7858(8)	162(5)
C(21)	-703(8)	133(6)	11092(6)	80(3)
C(22)	-497(8)	920(6)	11508(6)	94(3)
C(23)	-2046(8)	316(8)	11588(7)	121(3)
C(24)	-172(10)	-887(7)	11431(7)	114(3)
C(25)	-4713(12)	2154(13)	8241(14)	160(6)
C(26)	-5580(30)	2910(20)	8883(18)	247(14)
C(27)	-5377(18)	3702(18)	8330(20)	268(14)
C(28)	-4247(14)	3423(13)	7328(12)	165(5)
C(29)	-1835(17)	-554(19)	5908(14)	217(10)
C(30)	-1984(18)	-668(16)	5030(30)	290(19)
C(31)	-2395(19)	440(30)	4672(12)	291(15)
C(32)	-2650(20)	981(13)	5451(19)	309(13)
C(33)	2957(17)	2630(20)	2995(16)	460(30)
C(36)	4712(12)	1575(11)	2635(12)	171(5)
C(37)	1700(40)	-330(50)	3630(40)	800(70)
C(40)	3376(14)	-752(14)	2775(13)	199(6)
C(41)	6230(19)	-3745(17)	7005(14)	331(16)
C(42)	7345(19)	-4320(15)	6138(14)	307(15)
C(43)	7269(16)	-3858(18)	5336(12)	239(8)
C(44)	6290(20)	-3320(20)	5680(20)	500(30)
C(45)	3740(19)	-2879(13)	4975(14)	245(10)
C(46)	3380(30)	-3440(20)	4600(20)	393(18)
C(48)	3522(18)	-4229(16)	6075(14)	227(8)
C(49)	-3175(13)	-2154(12)	11748(12)	199(6)
C(50)	-3211(18)	-2956(14)	12538(12)	271(12)
C(51)	-2250(30)	-3470(50)	12490(40)	1180(110)
C(52)	-1566(17)	-3194(17)	11680(20)	284(14)
C(57)	908(13)	2733(9)	11429(10)	174(6)
C(58)	627(14)	3680(11)	11932(10)	185(6)
C(59)	927(15)	4323(10)	11144(12)	183(6)
C(60)	684(12)	4055(9)	10293(10)	157(4)
C(62)	658(15)	-668(14)	6576(14)	250(10)
C(61)	935(8)	-439(7)	7089(7)	72(2)
C(100)	6931(19)	4344(11)	3528(16)	210(9)
C(101)	7110(20)	3520(30)	3910(20)	291(13)
C(102)	6390(20)	3070(20)	3800(30)	329(16)
C(103)	6310(20)	3600(20)	2900(20)	257(10)
C(104)	7040(30)	4200(20)	2670(20)	322(16)
C(105)	940(20)	5600(20)	4310(20)	229(10)
C(106)	880(20)	5340(20)	3560(40)	282(16)
C(107)	590(30)	6940(20)	3310(30)	321(17)
C(108)	590(18)	6673(17)	4320(20)	232(9)
C(109)	4820(40)	6150(20)	1600(30)	296(17)
C(110)	5390(30)	6330(20)	540(30)	283(12)
C(111)	4880(20)	5939(13)	-4(15)	206(7)
C(112)	4000(20)	5610(20)	870(30)	293(12)
C(113)	4290(30)	5570(30)	1760(19)	273(11)
C(120)	470(30)	6040(40)	3113(19)	278(17)
K(1)	-1611(2)	1324(2)	7227(2)	104(1)
K(2)	2462(2)	871(2)	5056(2)	118(1)
K(3)	3413(2)	-1973(2)	7191(2)	128(1)
K(4)	-673(2)	-1482(2)	9360(2)	115(1)
K(5)	878(1)	1673(1)	9167(1)	65(1)
Li(1)	493(11)	1797(9)	7227(10)	85(4)
Li(2)	2606(10)	432(10)	7201(9)	76(4)
Li(3)	1280(11)	-618(9)	9051(9)	76(4)
Li(4)	-791(10)	741(8)	9050(8)	66(3)
O(1)	247(5)	1926(4)	6014(4)	99(2)
O(2)	3684(6)	-389(5)	5975(5)	119(2)
O(3)	1521(5)	-1980(5)	8948(5)	108(2)
O(4)	-1882(6)	307(5)	8945(5)	113(2)
O(5)	-823(4)	2130(4)	8535(4)	78(1)
O(6)	1978(4)	1808(4)	6996(3)	82(2)
O(7)	2609(4)	-144(4)	8494(4)	81(1)
O(8)	-198(4)	159(3)	9995(4)	73(1)
O(9)	-3760(6)	2479(6)	7534(6)	124(2)
O(10)	-1948(11)	322(8)	6001(9)	185(5)
O(11)	3590(10)	1875(11)	3361(7)	230(5)
O(12)	2522(10)	-198(13)	3627(10)	311(9)
O(13)	5643(6)	-3128(7)	6672(8)	168(3)
O(14)	3542(9)	-3255(8)	5888(9)	169(4)

O(15)	-1952(8)	-2381(7)	11092(7)	164(3)
O(16)	-654(14)	-2918(14)	8239(16)	395(12)
O(17)	863(7)	3007(5)	10468(6)	123(2)
O(18)	889(4)	176(4)	7661(4)	78(2)
C(53)	-1340(50)	-3270(40)	8530(40)	620(50)
C(38)	1360(20)	-70(30)	3320(30)	339(19)
C(47)	3420(60)	-4290(30)	5190(50)	1240(80)
C(39)	2310(40)	-760(20)	2520(20)	360(20)

Tab. 8.88 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von **238**.

Atom	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
C(54)	210(30)	520(50)	380(30)	-130(30)	-110(20)	-190(30)
C(55)	380(40)	250(20)	540(50)	-270(30)	-110(30)	10(20)
C(35)	170(20)	750(70)	530(50)	460(50)	40(20)	210(30)
C(34)	240(20)	380(30)	260(20)	230(20)	-140(20)	-80(20)
C(1)	102(7)	149(9)	71(7)	13(7)	-49(6)	-17(7)
C(2)	198(12)	198(12)	105(8)	65(8)	-117(9)	-82(9)
C(3)	72(8)	193(11)	118(9)	-45(8)	-37(7)	-20(7)
C(4)	93(7)	183(10)	100(8)	-38(7)	-19(6)	-49(7)
C(5)	141(9)	60(7)	127(9)	0(7)	-66(7)	0(6)
C(6)	241(14)	78(8)	162(10)	23(7)	-120(10)	-33(8)
C(7)	140(11)	170(10)	113(9)	-7(7)	-89(9)	-59(9)
C(8)	88(8)	230(13)	154(10)	0(9)	-69(8)	-42(8)
C(9)	44(6)	112(8)	86(7)	-15(6)	-32(5)	-10(6)
C(10)	103(7)	98(7)	132(8)	-52(6)	-60(6)	7(6)
C(11)	118(8)	80(6)	162(10)	-1(7)	-79(8)	24(6)
C(12)	74(7)	150(9)	128(8)	-63(7)	-21(6)	5(6)
C(13)	91(8)	118(8)	76(6)	26(6)	-28(6)	-62(7)
C(14)	197(11)	131(8)	115(8)	15(7)	-93(8)	-87(8)
C(15)	104(9)	206(12)	136(9)	46(8)	-46(8)	-83(8)
C(16)	209(12)	127(9)	151(9)	70(8)	-111(10)	-95(9)
C(17)	50(6)	127(8)	121(8)	-31(7)	-49(6)	-5(5)
C(18)	104(7)	123(8)	126(7)	-31(7)	-59(6)	-29(6)
C(19)	241(12)	83(7)	253(13)	20(8)	-219(11)	-12(7)
C(20)	85(8)	244(13)	159(10)	-111(9)	-74(8)	28(8)
C(21)	120(8)	74(6)	62(6)	2(5)	-46(6)	-41(5)
C(22)	127(8)	112(7)	59(5)	-6(5)	-39(5)	-57(6)
C(23)	104(8)	180(9)	76(6)	-8(6)	-19(5)	-69(7)
C(24)	186(10)	93(7)	80(6)	21(5)	-66(7)	-63(7)
C(25)	80(10)	223(17)	174(15)	17(12)	-47(10)	-63(11)
C(26)	280(30)	380(40)	150(16)	60(20)	-119(19)	-180(30)
C(27)	118(16)	270(20)	370(40)	-200(30)	-100(19)	74(16)
C(28)	145(13)	174(14)	200(15)	72(12)	-109(13)	-62(11)
C(29)	217(18)	330(30)	168(14)	-59(18)	-128(13)	-70(20)
C(30)	160(16)	230(20)	480(60)	-140(30)	-140(20)	6(16)
C(31)	290(20)	490(50)	148(12)	-100(20)	-122(14)	-90(30)
C(32)	500(30)	229(16)	380(30)	-34(18)	-410(30)	11(18)
C(33)	198(18)	660(50)	219(18)	320(30)	-45(14)	20(20)
C(36)	103(11)	175(11)	183(12)	77(10)	-51(11)	-36(9)
C(37)	430(50)	1430(150)	660(70)	-520(80)	-440(60)	100(70)
C(40)	164(14)	254(17)	144(11)	-45(11)	-66(11)	-5(12)
C(41)	280(20)	340(30)	179(16)	-53(17)	-129(17)	200(20)
C(42)	330(30)	240(19)	93(11)	25(12)	-18(14)	100(18)
C(43)	175(17)	320(20)	121(14)	-6(16)	-32(13)	1(16)
C(44)	210(20)	560(50)	240(30)	30(30)	55(19)	230(30)
C(45)	440(30)	239(17)	109(11)	64(13)	-104(14)	-216(18)
C(46)	580(60)	440(40)	370(30)	10(30)	-340(40)	-210(40)
C(48)	280(20)	210(20)	180(17)	-7(16)	-126(15)	-34(17)
C(49)	118(12)	209(14)	161(12)	-37(12)	23(10)	-32(10)
C(50)	330(20)	171(13)	132(12)	-5(11)	80(14)	-135(15)
C(51)	230(30)	1600(180)	600(80)	470(90)	190(40)	280(60)
C(52)	157(17)	270(20)	400(30)	130(30)	-160(20)	-26(16)
C(57)	347(18)	128(9)	189(11)	30(9)	-208(13)	-119(11)
C(58)	303(18)	165(13)	132(11)	-23(10)	-128(12)	-67(12)
C(59)	319(18)	126(10)	190(13)	-19(10)	-171(14)	-73(11)
C(60)	231(13)	106(10)	167(11)	-21(7)	-103(10)	-59(8)
C(62)	259(19)	249(17)	320(20)	-130(16)	-222(19)	25(14)
C(61)	71(5)	94(7)	75(6)	9(6)	-46(5)	-35(5)
C(100)	390(30)	118(11)	228(16)	-16(10)	-243(18)	-41(13)
C(101)	230(20)	390(40)	290(30)	120(20)	-190(20)	-90(20)

C(102)	230(20)	420(40)	360(30)	220(30)	-160(20)	-180(20)
C(103)	340(30)	270(20)	260(20)	-10(18)	-210(20)	-80(20)
C(104)	570(40)	340(30)	300(30)	120(20)	-300(30)	-330(30)
C(105)	320(20)	200(20)	310(20)	97(19)	-270(20)	-110(20)
C(106)	290(30)	210(30)	440(50)	-70(30)	-250(30)	-36(19)
C(107)	440(40)	200(20)	440(50)	50(20)	-310(40)	-70(20)
C(108)	350(20)	121(14)	320(20)	-33(14)	-270(20)	-1(12)
C(109)	470(50)	220(20)	200(30)	10(20)	-120(40)	-150(30)
C(110)	380(40)	220(20)	290(30)	40(20)	-170(30)	-150(20)
C(111)	250(20)	151(13)	169(17)	-34(12)	-71(17)	-19(12)
C(112)	250(20)	430(40)	230(20)	0(20)	-140(20)	-90(20)
C(113)	330(30)	350(40)	145(15)	40(20)	-101(17)	-140(20)
C(120)	280(30)	410(60)	177(17)	-20(30)	-133(18)	-90(30)
K(1)	81(1)	139(2)	108(2)	-24(1)	-58(1)	-17(1)
K(2)	100(2)	178(2)	70(1)	-23(1)	-31(1)	-35(2)
K(3)	112(2)	118(2)	140(2)	-56(2)	-57(2)	7(1)
K(4)	148(2)	113(2)	101(2)	-4(1)	-46(2)	-73(2)
K(5)	64(1)	69(1)	67(1)	-1(1)	-33(1)	-19(1)
Li(1)	97(10)	77(9)	89(9)	9(7)	-63(8)	-8(8)
Li(2)	74(9)	94(10)	79(9)	20(8)	-42(7)	-45(8)
Li(3)	94(10)	76(9)	74(9)	1(7)	-48(8)	-28(8)
Li(4)	64(8)	74(9)	55(7)	-15(6)	-25(6)	-11(7)
O(1)	126(5)	111(4)	69(3)	10(3)	-59(4)	-26(4)
O(2)	63(4)	175(6)	103(4)	-48(4)	-22(4)	-17(4)
O(3)	151(5)	61(4)	123(5)	10(3)	-80(4)	-20(4)
O(4)	71(4)	155(6)	120(5)	-27(4)	-24(4)	-58(4)
O(5)	60(3)	81(3)	77(3)	-24(3)	-31(3)	9(3)
O(6)	86(4)	111(4)	63(3)	22(3)	-31(3)	-58(3)
O(7)	71(3)	94(4)	93(4)	-9(3)	-57(3)	-7(3)
O(8)	89(4)	80(3)	54(3)	-1(3)	-31(3)	-30(3)
O(9)	87(5)	122(6)	153(6)	-2(5)	-59(5)	-8(5)
O(10)	276(11)	165(8)	199(9)	-32(7)	-172(9)	-56(8)
O(11)	125(8)	365(16)	106(6)	66(8)	-30(7)	-27(9)
O(12)	132(8)	550(20)	248(12)	-274(15)	-92(9)	30(10)
O(13)	84(6)	195(8)	135(7)	-3(6)	-21(6)	26(5)
O(14)	242(10)	100(6)	140(8)	-17(6)	-69(7)	-38(7)
O(15)	116(7)	172(7)	147(6)	52(6)	-19(6)	-61(6)
O(16)	246(15)	394(19)	600(30)	-310(20)	-116(16)	-140(14)
O(17)	199(7)	90(5)	132(5)	-5(4)	-108(5)	-53(4)
O(18)	90(4)	78(4)	85(4)	-16(3)	-51(3)	-23(3)
C(53)	590(80)	710(70)	640(60)	-470(50)	-50(50)	-400(60)
C(38)	160(20)	490(50)	320(30)	-90(30)	-90(20)	-40(20)
C(47)	1770(180)	720(70)	1670(170)	1020(100)	-1000(150)	-1000(110)
C(39)	760(70)	270(40)	340(30)	50(30)	-470(50)	-200(40)

8.2.10.3 Kristallstruktur von 240

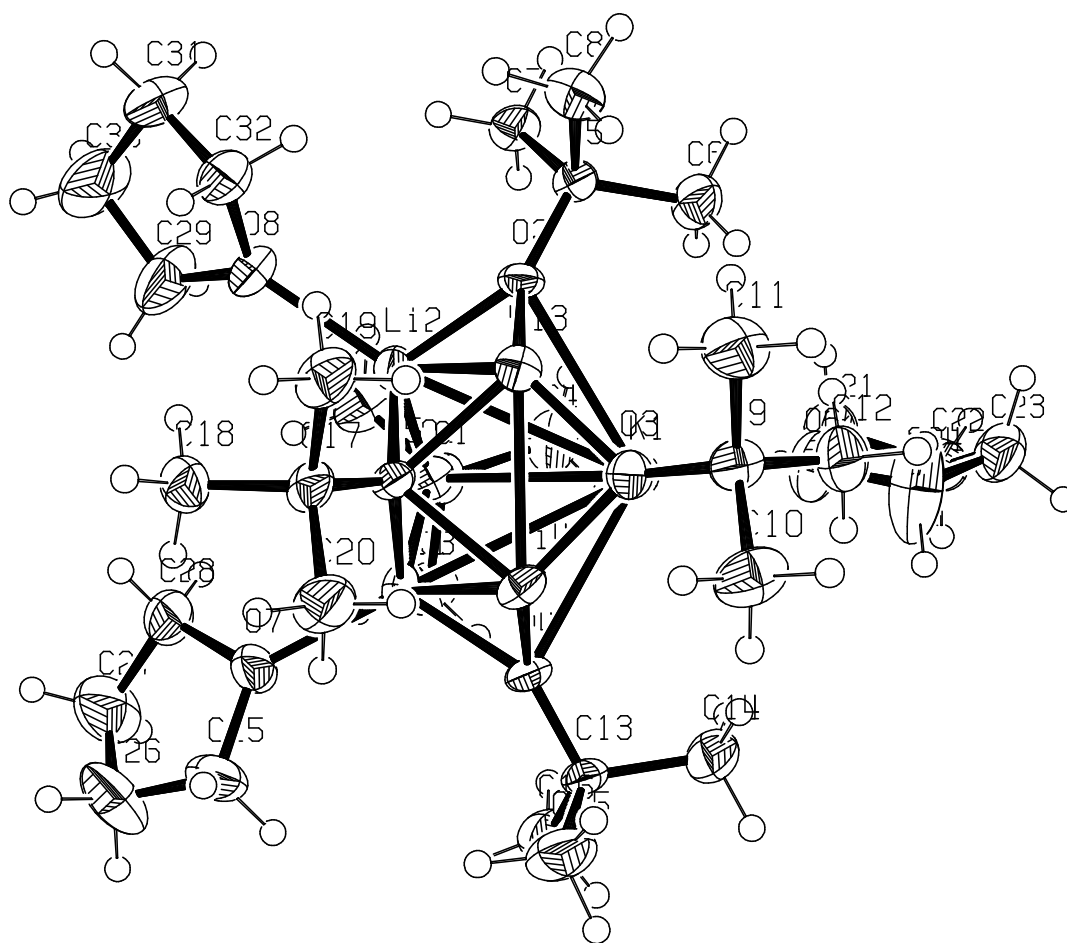


Abb. 8.45 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung **240** im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.89 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von **240**.

Atom	x	y	z	U(eq)
Li(2)	8698(6)	8862(7)	9690(5)	30(2)
K(1)	8720(1)	6330(1)	8920(1)	28(1)
O(1)	8547(2)	7397(3)	10099(2)	30(1)
O(5)	9812(2)	8548(3)	9987(2)	24(1)
O(3)	9913(2)	7370(3)	8734(2)	31(1)
O(2)	8470(2)	8819(3)	8637(2)	27(1)
O(7)	9921(2)	7501(4)	11700(2)	43(1)
O(8)	8454(2)	10516(3)	10016(2)	37(1)
O(6)	7754(3)	4583(4)	8089(2)	54(1)
C(5)	7895(3)	9097(4)	7974(3)	26(1)
C(19)	10355(4)	10290(5)	9698(3)	45(2)
C(12)	9536(4)	6059(6)	7670(3)	52(2)
C(26)	10562(5)	7464(9)	12985(4)	73(3)
C(4)	7464(4)	6213(6)	9461(3)	51(2)
C(17)	10383(4)	9376(5)	10292(3)	33(2)
C(22)	6903(4)	3086(5)	7487(3)	46(2)
C(11)	10025(4)	8119(6)	7644(3)	51(2)
C(9)	10070(3)	7024(5)	8135(3)	34(2)
C(7)	7260(3)	9585(5)	8127(3)	34(1)
C(3)	8207(4)	5929(6)	10792(3)	46(2)
C(28)	9546(4)	8255(6)	12024(3)	50(2)
C(2)	7510(4)	7832(6)	10339(4)	47(2)
C(18)	10327(4)	10064(6)	10947(3)	44(2)

C(10)	10837(4)	6518(6)	8432(4)	51(2)
C(8)	8116(4)	10070(6)	7555(3)	43(2)
C(6)	7635(4)	7990(5)	7473(3)	44(2)
C(27)	9828(5)	7862(8)	12805(4)	75(3)
C(31)	8020(5)	12483(6)	9773(4)	63(2)
C(32)	8525(4)	11621(5)	9675(4)	50(2)
C(21)	7016(4)	4248(6)	7916(4)	51(2)
C(20)	11117(4)	8731(6)	10586(4)	49(2)
C(23)	7359(4)	3290(5)	7064(4)	52(2)
C(30)	8062(6)	12128(7)	10513(5)	85(3)
C(25)	10571(4)	7097(7)	12282(3)	57(2)
C(24)	7981(5)	3965(9)	7605(5)	95(4)
C(29)	8240(5)	10845(6)	10590(4)	72(3)
Li(3)	9439(5)	8663(7)	8891(4)	27(2)
Li(4)	10249(6)	7112(7)	9743(5)	28(2)
Li(1)	9559(6)	7173(8)	10582(5)	35(2)
C(1)	7958(3)	6863(5)	10169(3)	31(1)
O(4)	9970(2)	5923(3)	10216(2)	28(1)
C(13)	10272(3)	4779(4)	10361(3)	28(1)
C(16)	10074(4)	4139(5)	10935(3)	50(2)
C(14)	9990(4)	4029(5)	9650(3)	49(2)
C(15)	11083(4)	4866(7)	10649(4)	58(2)

Tab. 8.90 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von **240**.

Atom	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
Li(2)	39(7)	26(4)	27(4)	-1(4)	15(4)	1(5)
K(1)	27(1)	26(1)	31(1)	-3(1)	13(1)	-3(1)
O(1)	27(3)	30(2)	38(2)	3(2)	19(2)	1(2)
O(5)	23(3)	19(2)	30(2)	1(2)	9(2)	1(2)
O(3)	33(3)	34(2)	29(2)	0(2)	17(2)	3(2)
O(2)	24(3)	28(2)	25(2)	6(2)	7(2)	8(2)
O(7)	41(3)	54(2)	29(2)	-7(2)	9(2)	15(3)
O(8)	45(3)	23(2)	49(2)	-3(2)	25(2)	2(2)
O(6)	45(3)	52(3)	66(3)	-25(2)	26(3)	-20(3)
C(5)	16(4)	24(2)	32(3)	-2(2)	3(3)	-4(3)
C(19)	46(5)	28(3)	60(4)	-2(3)	22(4)	-9(4)
C(12)	66(6)	56(4)	41(3)	-6(3)	29(4)	5(4)
C(26)	45(6)	117(8)	41(3)	-7(4)	2(4)	-10(6)
C(4)	53(6)	52(4)	56(4)	-9(3)	29(4)	-11(4)
C(17)	30(5)	21(2)	43(3)	-5(3)	10(3)	-7(4)
C(22)	47(5)	39(3)	47(3)	1(3)	14(3)	-12(4)
C(11)	61(6)	56(4)	48(4)	12(3)	35(4)	6(4)
C(9)	36(4)	38(3)	38(3)	6(3)	25(3)	6(4)
C(7)	18(4)	38(3)	42(3)	0(3)	9(3)	6(3)
C(3)	48(5)	46(3)	58(4)	7(3)	35(4)	1(4)
C(28)	46(5)	55(4)	47(3)	-12(3)	18(4)	14(4)
C(2)	49(5)	43(3)	65(4)	6(3)	39(4)	6(4)
C(18)	34(5)	45(3)	43(3)	-11(3)	6(3)	0(4)
C(10)	51(5)	50(4)	68(4)	15(3)	42(4)	15(4)
C(8)	37(5)	48(3)	39(3)	7(3)	12(3)	-1(4)
C(6)	36(5)	37(3)	49(3)	-10(3)	8(3)	-3(4)
C(27)	80(8)	104(6)	46(4)	-1(4)	32(4)	19(6)
C(31)	71(7)	38(3)	69(4)	6(4)	18(4)	18(5)
C(32)	61(6)	30(3)	53(4)	1(3)	17(4)	-5(4)
C(21)	46(6)	53(4)	55(4)	-7(3)	21(4)	-6(4)
C(20)	29(5)	43(3)	65(4)	-6(3)	9(4)	2(4)
C(23)	65(6)	35(3)	59(4)	-6(3)	29(4)	-4(4)
C(30)	114(8)	69(5)	93(6)	-1(5)	64(6)	42(6)
C(25)	49(6)	77(5)	36(3)	5(3)	7(3)	30(5)
C(24)	65(7)	116(7)	134(8)	-86(7)	71(7)	-66(6)
C(29)	130(8)	41(3)	75(5)	0(3)	73(6)	9(5)
Li(3)	29(7)	28(4)	28(4)	2(4)	16(4)	-3(5)
Li(4)	20(6)	20(4)	42(4)	-1(4)	12(4)	0(5)
Li(1)	45(7)	35(5)	33(4)	-10(4)	22(5)	-3(6)
C(1)	27(4)	34(3)	38(3)	-7(3)	20(3)	-6(3)
O(4)	29(3)	21(2)	33(2)	5(2)	12(2)	9(2)
C(13)	31(4)	22(2)	31(2)	6(2)	13(3)	8(3)
C(16)	66(6)	39(3)	49(3)	12(3)	28(4)	10(4)
C(14)	70(6)	27(3)	47(3)	2(3)	22(4)	3(4)
C(15)	42(6)	51(4)	76(5)	5(4)	19(4)	17(5)

8.2.10.4 Kristallstruktur von 241

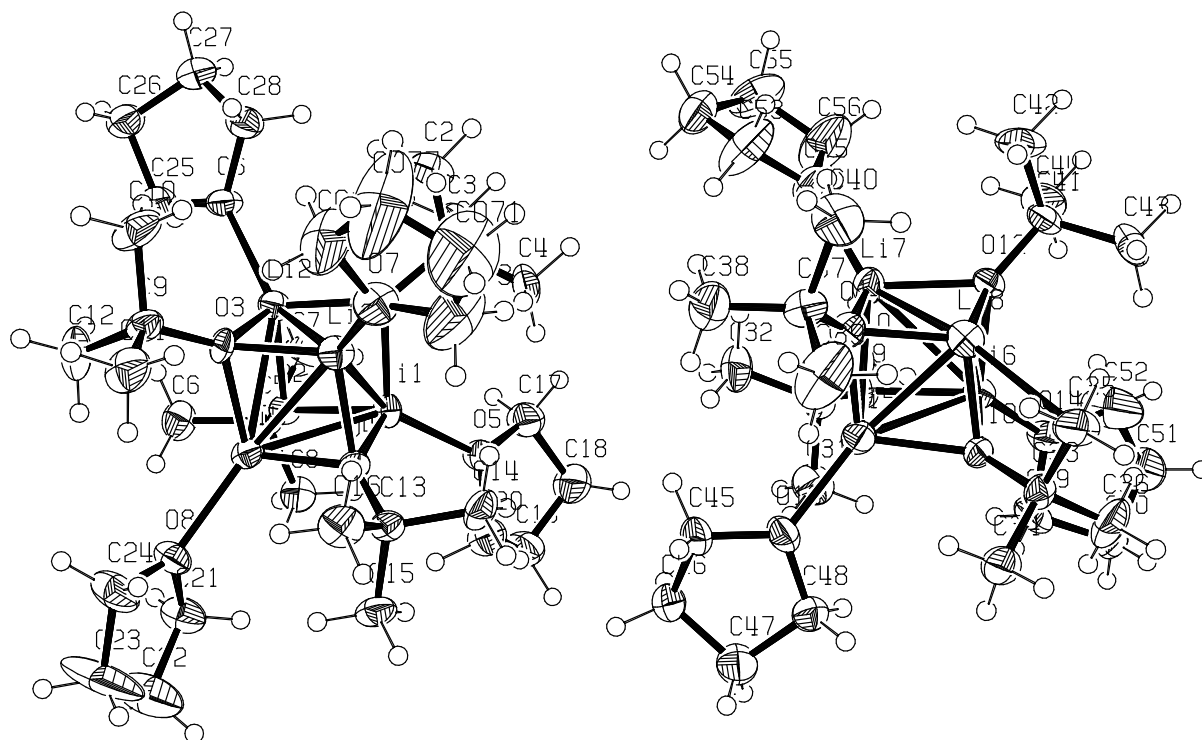


Abb. 8.46 Thermische Auslenkungsellipsoide (50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit) der Molekülstruktur von Verbindung **241** im Kristall (ORTEP-Darstellung der asymmetrischen Einheit) mit Angabe des Nummerierungsschemas.

Tab. 8.91 Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von **241**.

Atom	x	y	z	U(eq)
C(1)	5931(2)	8651(2)	1864(1)	30(1)
C(2)	6102(2)	7895(1)	1946(1)	44(1)
C(3)	5417(2)	8736(2)	1294(1)	40(1)
C(4)	5464(2)	8901(2)	2409(1)	44(1)
C(5)	7369(2)	10452(1)	615(1)	29(1)
C(6)	8147(2)	10417(2)	245(1)	42(1)
C(7)	6677(2)	10152(2)	235(1)	45(1)
C(8)	7159(2)	11185(1)	734(1)	37(1)
C(9)	9132(2)	8709(2)	1633(1)	33(1)
C(10)	9003(2)	7970(2)	1462(1)	55(1)
C(11)	9654(2)	8741(2)	2201(1)	53(1)
C(12)	9606(2)	9054(2)	1113(1)	58(1)
C(13)	7650(2)	10268(1)	3045(1)	28(1)
C(14)	6869(2)	10168(2)	3394(1)	39(1)
C(15)	7838(2)	11023(1)	3015(1)	38(1)
C(16)	8347(2)	9921(2)	3375(1)	45(1)
C(17)	4979(2)	10613(2)	1624(1)	45(1)
C(18)	4582(2)	11280(2)	1787(2)	53(1)
C(19)	5271(2)	11734(2)	1834(2)	53(1)
C(20)	5903(2)	11299(2)	2117(1)	46(1)
C(21)	9109(2)	11387(2)	1646(1)	45(1)
C(22)	9735(2)	11813(2)	1957(2)	89(1)
C(23)	10306(2)	11358(2)	2179(2)	121(2)
C(24)	10019(2)	10670(2)	2099(2)	57(1)
C(25)	7865(2)	8561(1)	-164(1)	48(1)
C(26)	7959(2)	7877(1)	-462(1)	47(1)
C(27)	7228(2)	7517(2)	-251(1)	54(1)
C(28)	7123(2)	7780(1)	391(1)	43(1)

C(29)	2634(2)	10346(2)	3174(1)	35(1)
C(30)	1835(2)	10269(2)	2844(1)	50(1)
C(31)	2803(2)	11087(1)	3255(1)	51(1)
C(32)	3311(2)	10032(2)	2796(1)	48(1)
C(33)	2431(2)	10138(1)	5664(1)	29(1)
C(34)	3182(2)	10468(2)	5925(1)	41(1)
C(35)	2348(2)	9455(1)	5970(1)	50(1)
C(36)	1697(2)	10556(2)	5804(1)	55(1)
C(37)	4084(2)	8585(2)	4559(1)	37(1)
C(38)	4747(2)	8598(2)	4083(1)	59(1)
C(39)	4455(2)	8829(2)	5156(1)	78(1)
C(40)	3777(2)	7873(2)	4644(2)	65(1)
C(41)	979(2)	8577(2)	4374(1)	34(1)
C(42)	1258(2)	7858(2)	4335(1)	54(1)
C(43)	535(2)	8689(2)	4966(1)	58(1)
C(44)	415(2)	8730(2)	3855(1)	50(1)
C(45)	5019(2)	10573(2)	4111(1)	45(1)
C(46)	5166(2)	11275(2)	3870(1)	40(1)
C(47)	4821(2)	11702(2)	4370(1)	49(1)
C(48)	4163(2)	11287(2)	4625(1)	41(1)
C(49)	1035(2)	11349(2)	4350(2)	51(1)
C(50)	311(2)	11653(2)	4666(1)	47(1)
C(51)	-362(2)	11228(2)	4443(2)	57(1)
C(52)	25(2)	10558(2)	4374(2)	97(2)
C(53)	3175(2)	7994(2)	2866(2)	79(1)
C(54)	3156(2)	7901(2)	2200(2)	61(1)
C(55)	2298(2)	7965(2)	2060(1)	66(1)
C(56)	1936(2)	8306(2)	2587(2)	93(2)
C(066)	8014(2)	7711(2)	3028(2)	85(1)
C(071)	7200(4)	7675(2)	3885(2)	149(2)
C(073)	7158(3)	8298(2)	3626(2)	96(2)
C(077)	7736(4)	7293(2)	3506(3)	195(3)
Li(1)	6739(3)	9984(2)	1832(2)	27(1)
Li(2)	7476(3)	9099(2)	1180(2)	29(1)
Li(3)	7577(3)	9038(2)	2336(2)	32(1)
Li(4)	8290(3)	10020(2)	1771(2)	28(1)
Li(5)	3341(3)	9975(3)	4412(2)	34(1)
Li(6)	1763(3)	9992(2)	4344(2)	26(1)
Li(7)	2575(3)	9043(2)	3780(2)	35(1)
Li(8)	2510(3)	9098(2)	4879(2)	32(1)
O(1)	6650(1)	9001(1)	1801(1)	27(1)
O(2)	7466(1)	10089(1)	1153(1)	25(1)
O(3)	8400(1)	9027(1)	1719(1)	26(1)
O(4)	7571(1)	10008(1)	2461(1)	25(1)
O(5)	5759(1)	10636(1)	1904(1)	35(1)
O(6)	7444(1)	8448(1)	389(1)	35(1)
O(7)	7580(1)	8317(1)	3066(1)	44(1)
O(8)	9242(1)	10712(1)	1825(1)	36(1)
O(9)	2599(1)	10020(1)	3738(1)	27(1)
O(10)	2513(1)	10046(1)	5039(1)	26(1)
O(11)	3438(1)	8996(1)	4395(1)	31(1)
O(12)	1654(1)	9006(1)	4348(1)	29(1)
O(13)	4277(1)	10609(1)	4426(1)	41(1)
O(14)	854(1)	10648(1)	4323(1)	40(1)
O(15)	2536(1)	8418(1)	3025(1)	42(1)

Tab. 8.92 Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) von **241**.

Atom	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
C(1)	27(2)	35(2)	27(2)	-1(2)	2(2)	-11(2)
C(2)	53(2)	38(2)	40(2)	2(2)	-6(2)	-16(2)
C(3)	35(2)	46(2)	40(2)	-1(2)	-2(2)	-8(2)
C(4)	29(2)	56(2)	46(2)	1(2)	13(2)	-7(2)
C(5)	31(2)	31(2)	25(2)	2(2)	-4(2)	1(2)
C(6)	46(2)	49(2)	30(2)	5(2)	9(2)	1(2)
C(7)	44(2)	53(2)	36(2)	1(2)	-10(2)	4(2)
C(8)	41(2)	33(2)	36(2)	9(2)	0(2)	4(2)
C(9)	34(2)	33(2)	31(2)	-10(2)	-7(2)	4(2)
C(10)	53(2)	45(3)	66(2)	-21(2)	-23(2)	26(2)
C(11)	45(2)	51(2)	63(2)	-6(2)	-12(2)	16(2)
C(12)	40(2)	84(3)	52(2)	0(2)	22(2)	3(2)

C(13)	29(2)	31(2)	23(2)	-3(1)	-7(2)	0(2)
C(14)	41(2)	52(2)	25(2)	-10(2)	5(2)	6(2)
C(15)	43(2)	34(2)	37(2)	-13(2)	-9(2)	0(2)
C(16)	49(2)	56(3)	29(2)	-3(2)	-14(2)	-1(2)
C(17)	36(2)	40(2)	59(2)	-7(2)	-6(2)	2(2)
C(18)	38(2)	49(3)	72(3)	-9(2)	-2(2)	11(2)
C(19)	53(2)	35(2)	71(3)	-1(2)	-4(2)	3(2)
C(20)	39(2)	48(2)	52(2)	-8(2)	-9(2)	7(2)
C(21)	44(2)	38(2)	53(2)	6(2)	-17(2)	-3(2)
C(22)	77(3)	47(3)	142(4)	14(3)	-53(3)	-10(3)
C(23)	90(3)	32(3)	241(6)	23(4)	-94(4)	-25(3)
C(24)	35(2)	42(3)	92(3)	8(2)	-24(2)	-5(2)
C(25)	62(2)	39(2)	41(2)	-4(2)	18(2)	-13(2)
C(26)	59(2)	36(2)	46(2)	-7(2)	16(2)	-5(2)
C(27)	56(2)	39(2)	67(2)	-18(2)	12(2)	-5(2)
C(28)	53(2)	34(2)	43(2)	-3(2)	12(2)	-11(2)
C(29)	40(2)	37(2)	28(2)	9(2)	0(2)	2(2)
C(30)	39(2)	75(3)	35(2)	19(2)	-9(2)	1(2)
C(31)	61(3)	42(2)	49(2)	13(2)	1(2)	-1(2)
C(32)	46(2)	58(3)	42(2)	13(2)	14(2)	7(2)
C(33)	32(2)	38(2)	18(2)	-1(2)	0(2)	-1(2)
C(34)	52(2)	44(2)	28(2)	-1(2)	1(2)	-7(2)
C(35)	84(3)	43(2)	24(2)	0(2)	4(2)	-21(2)
C(36)	55(2)	80(3)	31(2)	-19(2)	5(2)	10(2)
C(37)	36(2)	34(2)	40(2)	0(2)	-14(2)	10(2)
C(38)	52(2)	59(3)	65(2)	-3(2)	12(2)	7(2)
C(39)	64(3)	114(4)	57(2)	-13(3)	-24(2)	42(3)
C(40)	56(2)	37(3)	102(3)	26(2)	4(2)	22(2)
C(41)	32(2)	29(2)	40(2)	2(2)	0(2)	-12(2)
C(42)	76(2)	26(2)	59(2)	-2(2)	-3(2)	-13(2)
C(43)	52(2)	63(3)	58(2)	-3(2)	21(2)	-29(2)
C(44)	37(2)	55(3)	57(2)	-8(2)	-16(2)	-10(2)
C(45)	24(2)	43(3)	69(2)	-10(2)	10(2)	-2(2)
C(46)	41(2)	41(2)	39(2)	0(2)	9(2)	-4(2)
C(47)	52(2)	31(2)	64(2)	6(2)	10(2)	2(2)
C(48)	36(2)	44(2)	43(2)	-11(2)	1(2)	-3(2)
C(49)	50(2)	38(2)	65(2)	7(2)	10(2)	-16(2)
C(50)	64(2)	28(2)	50(2)	-4(2)	27(2)	3(2)
C(51)	33(2)	53(3)	85(3)	-1(2)	-4(2)	13(2)
C(52)	24(2)	56(3)	212(5)	-31(3)	-15(3)	12(2)
C(53)	75(3)	100(4)	62(3)	-38(3)	-22(2)	45(3)
C(54)	57(3)	66(3)	59(3)	-21(2)	13(2)	3(2)
C(55)	100(3)	59(3)	39(2)	-14(2)	-22(2)	22(2)
C(56)	61(3)	139(4)	80(3)	-61(3)	-21(3)	19(3)
C(066)	92(3)	59(3)	103(3)	35(3)	35(3)	37(2)
C(071)	220(7)	102(5)	125(4)	68(4)	86(4)	22(4)
C(073)	159(4)	74(3)	54(3)	22(2)	44(3)	32(3)
C(077)	252(7)	111(4)	222(6)	127(4)	165(6)	125(5)
Li(1)	20(3)	35(4)	25(3)	4(3)	-3(2)	4(3)
Li(2)	34(3)	29(3)	23(2)	1(2)	1(3)	-6(3)
Li(3)	41(3)	30(3)	24(2)	5(2)	0(3)	-2(3)
Li(4)	25(3)	28(3)	31(3)	-6(3)	-6(2)	5(3)
Li(5)	27(3)	39(4)	35(3)	-8(3)	-3(3)	-1(3)
Li(6)	35(3)	17(3)	26(3)	12(3)	1(3)	5(2)
Li(7)	27(3)	45(3)	32(3)	-5(2)	-1(3)	1(3)
Li(8)	32(3)	33(3)	33(3)	7(2)	-6(3)	3(3)
O(1)	22(1)	27(1)	31(1)	-1(1)	4(1)	-5(1)
O(2)	30(1)	26(1)	19(1)	3(1)	-2(1)	-1(1)
O(3)	18(1)	31(1)	30(1)	-2(1)	2(1)	9(1)
O(4)	27(1)	29(1)	20(1)	-3(1)	-3(1)	0(1)
O(5)	28(1)	29(2)	48(1)	-4(1)	-6(1)	2(1)
O(6)	52(1)	25(1)	27(1)	-4(1)	8(1)	-10(1)
O(7)	57(1)	37(1)	38(1)	12(1)	1(1)	2(1)
O(8)	30(1)	29(2)	49(1)	5(1)	-5(1)	-5(1)
O(9)	28(1)	30(1)	22(1)	8(1)	2(1)	1(1)
O(10)	28(1)	30(1)	22(1)	-3(1)	2(1)	-2(1)
O(11)	28(1)	30(1)	35(1)	3(1)	-4(1)	9(1)
O(12)	28(1)	24(1)	35(1)	1(1)	2(1)	-5(1)
O(13)	26(1)	36(2)	62(2)	-2(1)	9(1)	-5(1)
O(14)	32(1)	28(1)	59(1)	-2(1)	-1(1)	-1(1)
O(15)	39(1)	53(1)	34(1)	-12(1)	-3(1)	7(2)