

8 Anhang

8.1 Weitere Angaben zu den Einkristallröntgenstrukturanalysen, den quantenchemischen Berechnungen und den Pulverdiffraktogrammen von Kapitel 4.1

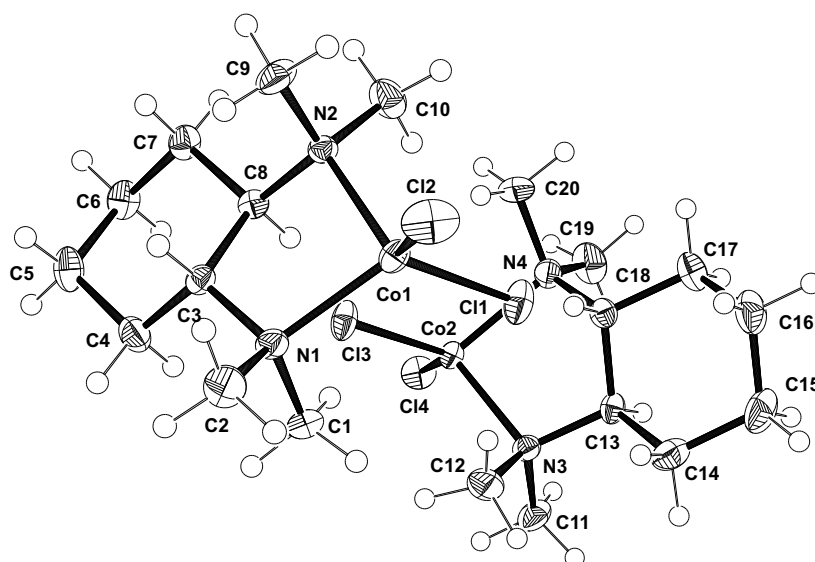


Abb. 8.1: (Molekülstruktur von $[\text{CoCl}_2\{(R,R)\text{-TMCDA}\}]$ (**161**) im Kristall (Ortep, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

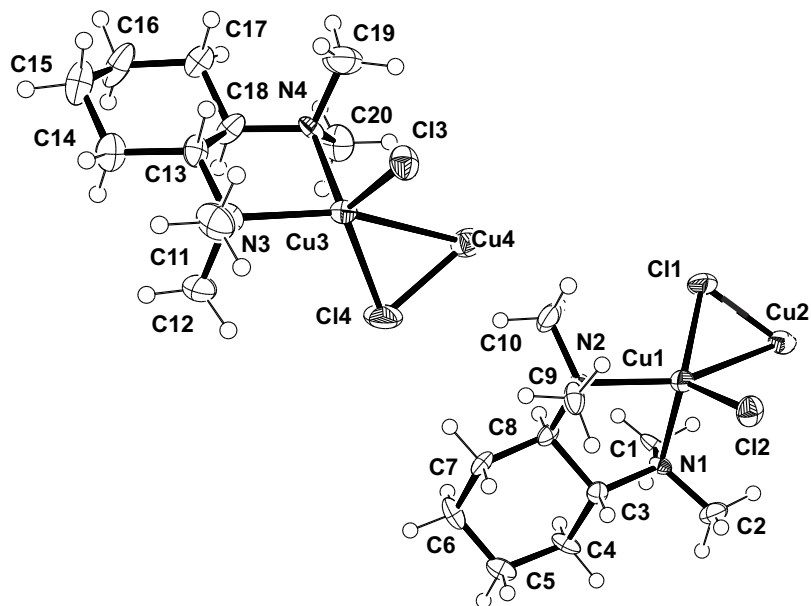


Abb. 8.2: Molekülstruktur von $[(R,R)\text{-TMCDACu}]_2(\mu\text{-CuCl}_2)_2$ (**166**) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

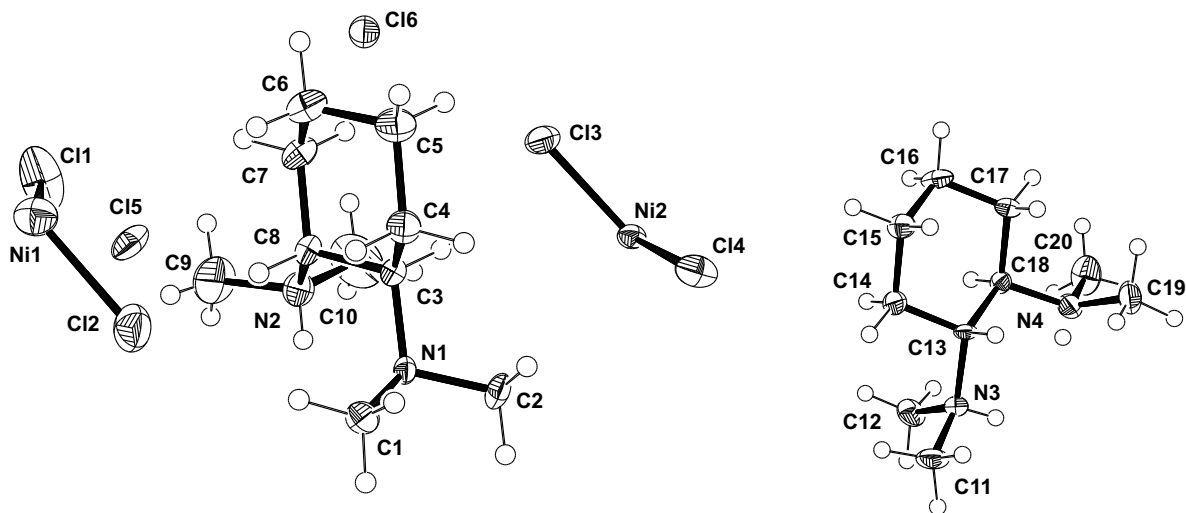


Abb. 8.3: Molekülstruktur von $[\text{H}_2(R,R)\text{-TMCDACu}]_2[\text{NiCl}_4]\text{Cl}_2$ (**169**) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

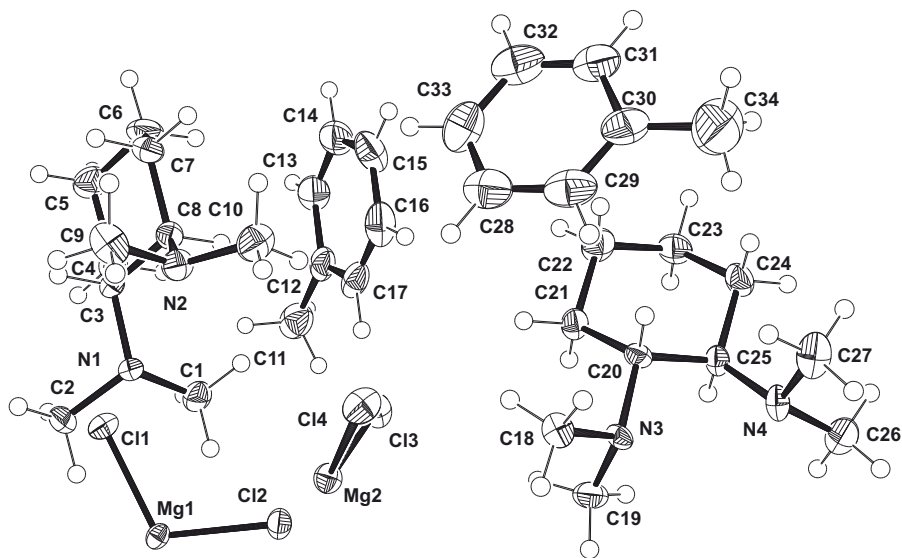


Abb. 8.4: Molekülstruktur von $[\{H(R,R)\text{-TMCDA}\}]_2[\text{MgCl}_4]$ (174) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

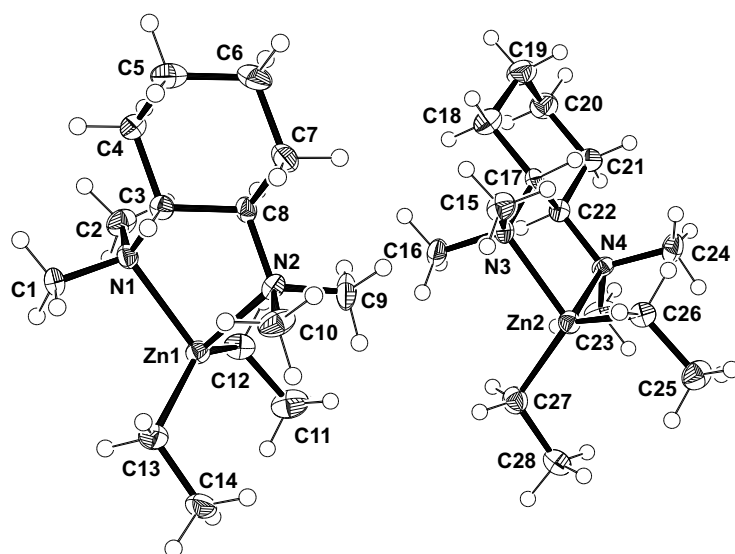


Abb. 8.5: Molekülstruktur von $[\text{ZnEt}_2\{(R,R)\text{-TMCDA}\}]$ (175) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

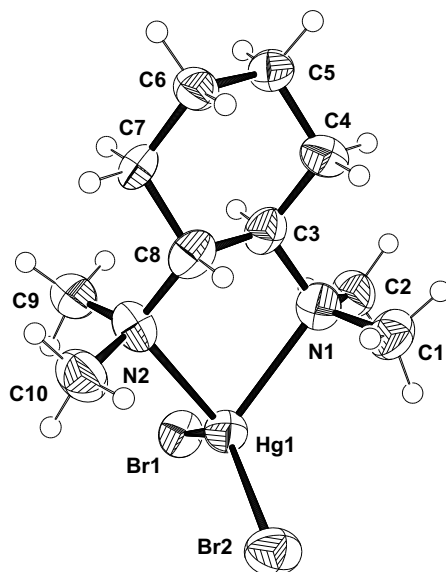


Abb. 8.6: Molekülstruktur von [HgBr₂{(R,R)-TMCDA}] (177) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

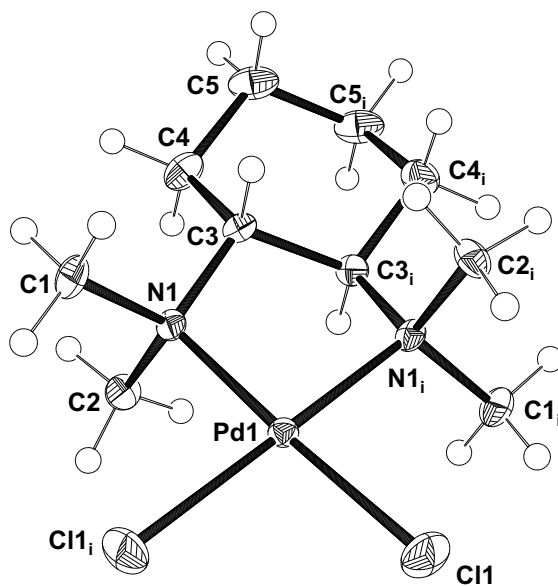


Abb. 8.7: Molekülstruktur von [PdCl₂{(R,R)-TMCDA}] (179) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

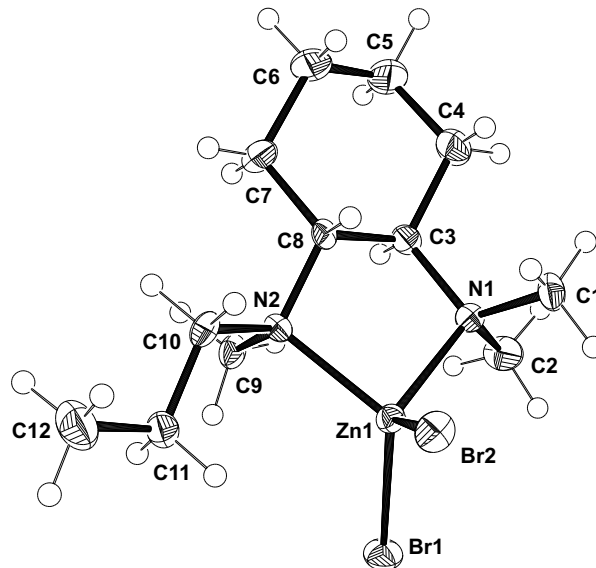


Abb. 8.8: Molekülstruktur von (S) - $[\text{ZnBr}_2\{(R,R)\text{-PrTMCD}\}]$ (**182**) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

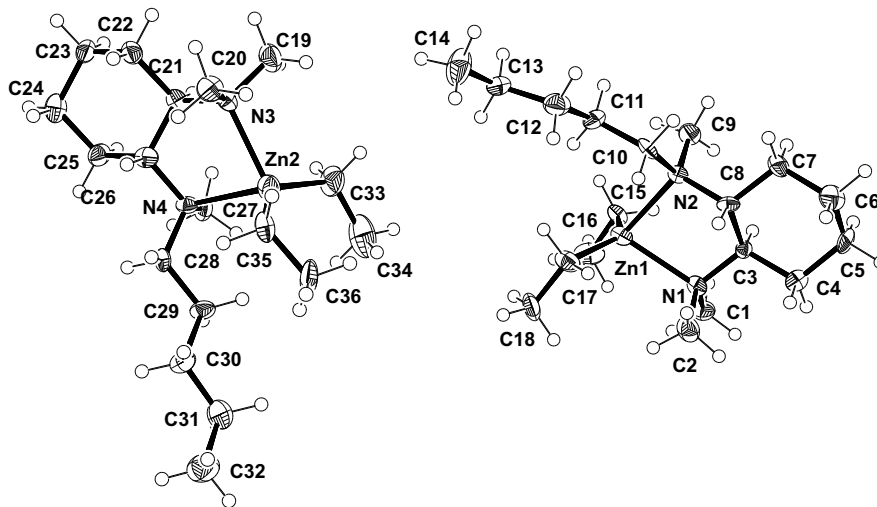


Abb. 8.9: Molekülstruktur von (S) - $[\text{ZnEt}_2\{(R,R)\text{-PTMCD}\}]$ (**183**) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

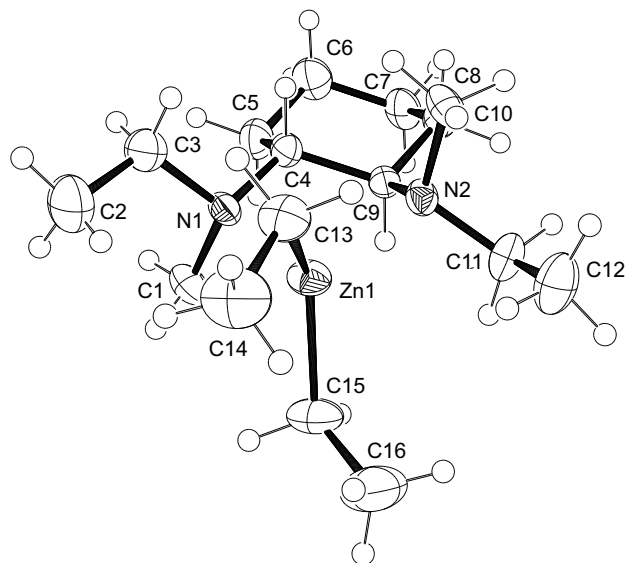


Abb. 8.10: Molekülstruktur von (S,S) - $[Zn\{(R,R)\text{-DEDMCDA}\}Et_2]$ (**184**) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

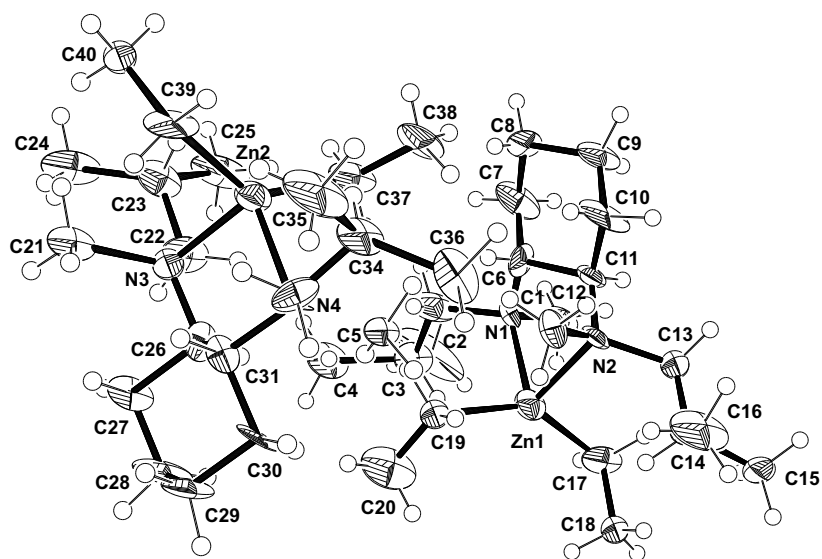


Abb. 8.11: Molekülstruktur von (S,S) - $[Zn\{(R,R)\text{-DiBDMCDA}\}Et_2]$ (**185**) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

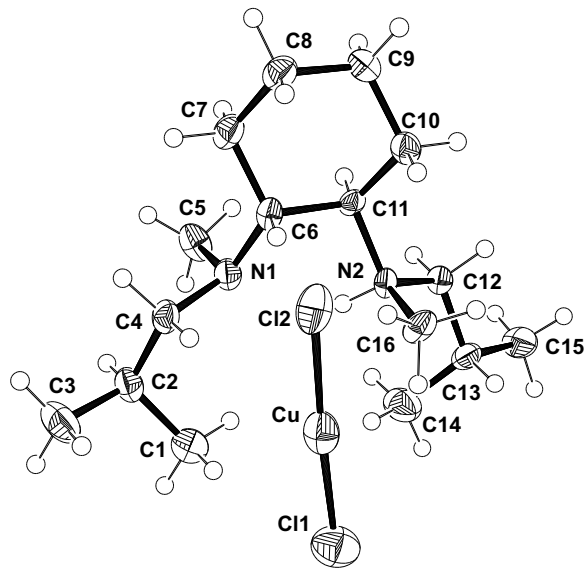


Abb. 8.12: Molekülstruktur von (R,R) -[H{(R,R)-DiBDMCDA}][CuCl₂] (**186**) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

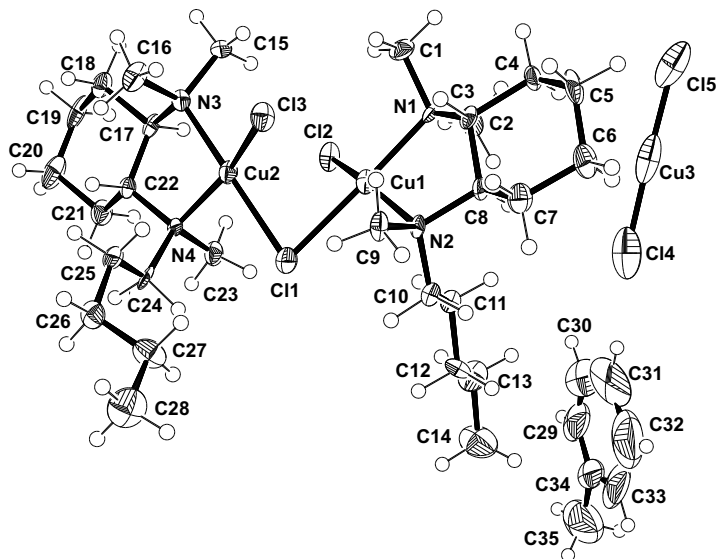


Abb. 8.13: Molekülstruktur von (S,S) -[({(R,R)-PTMCDA}CuCl)₂(μ -Cl)][CuCl₂] (**188**) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

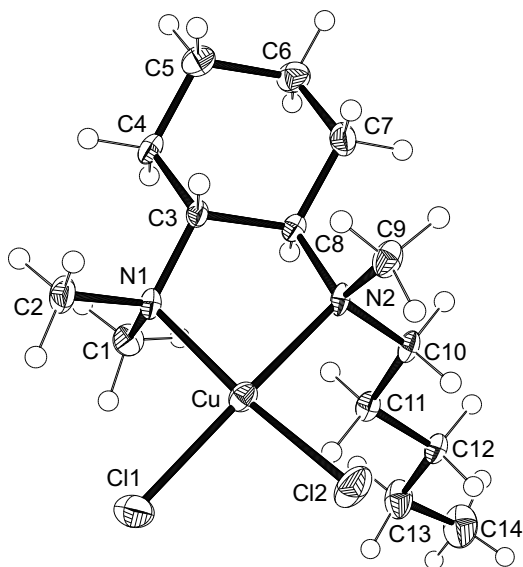


Abb. 8.14: Molekülstruktur von (S) - $[\text{CuCl}_2\{(R,R)\text{-PTMCDA}\}]$ (**187**) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

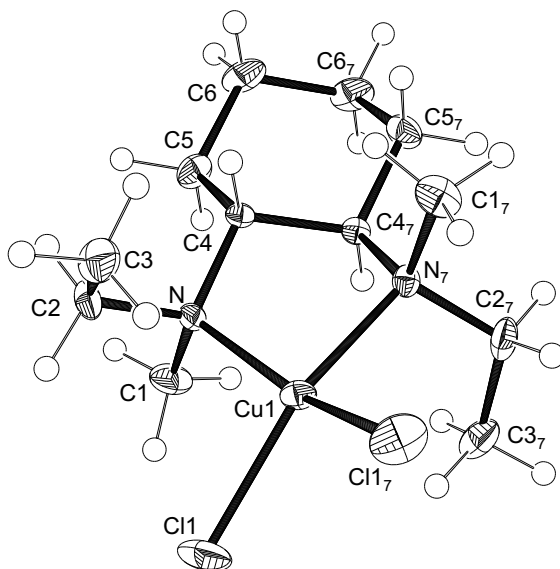


Abb. 8.15: Molekülstruktur von (S,S) - $[\text{CuCl}_2\{(R,R)\text{-DEDMCDA}\}]$ (**189**) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

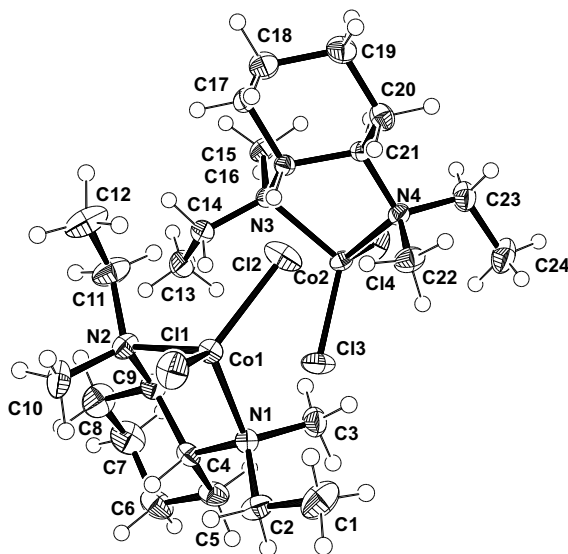


Abb. 8.16: Molekülstruktur von (S,S) - $[\text{CoCl}_2\{(R,R)\text{-DEDMCDA}\}]$ (**190**) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

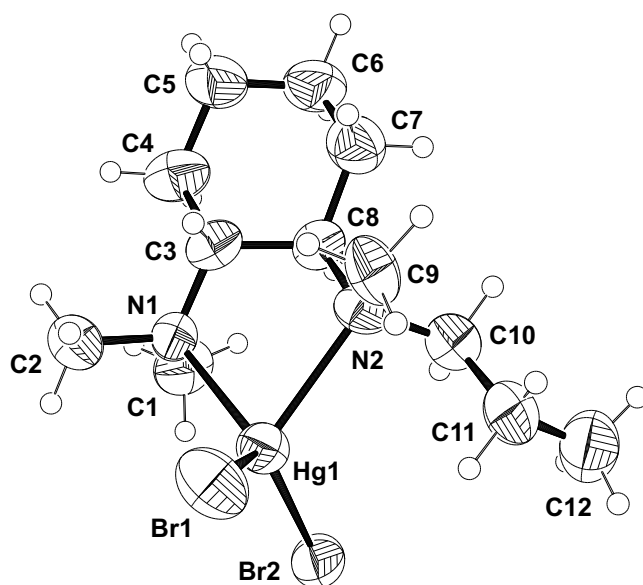


Abb. 8.17: Molekülstruktur von (S) - $[\text{HgBr}_2\{(R,R)\text{-PrTMCDA}\}]$ (**192**) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

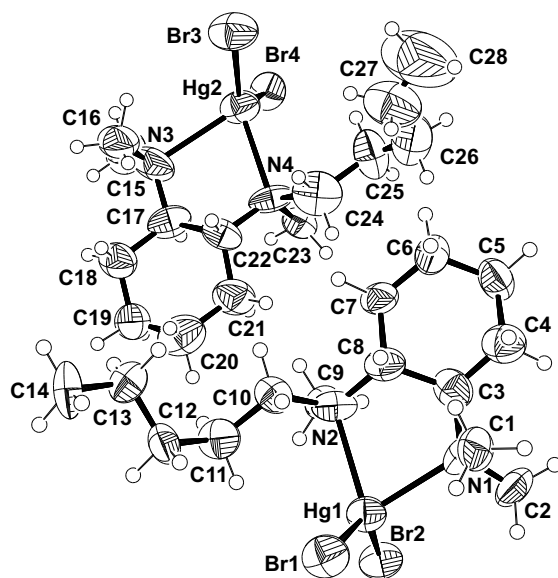


Abb. 8.18: Molekülstruktur von (S) -[HgBr₂{(R,R)-PTMCDA}] (**194**) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

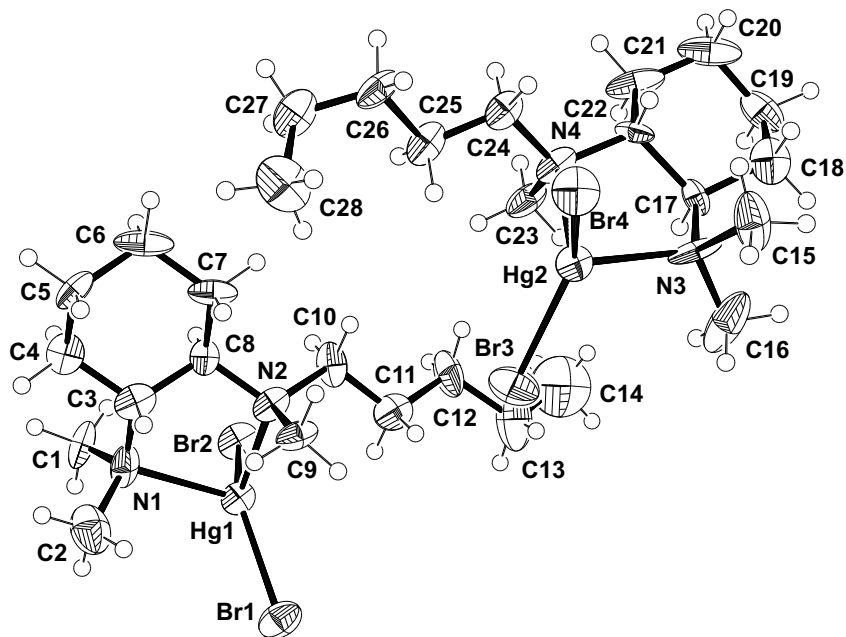


Abb. 8.19: Molekülstruktur von (S)-[HgBr₂{(R,R)-PTMCDA}] (194) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

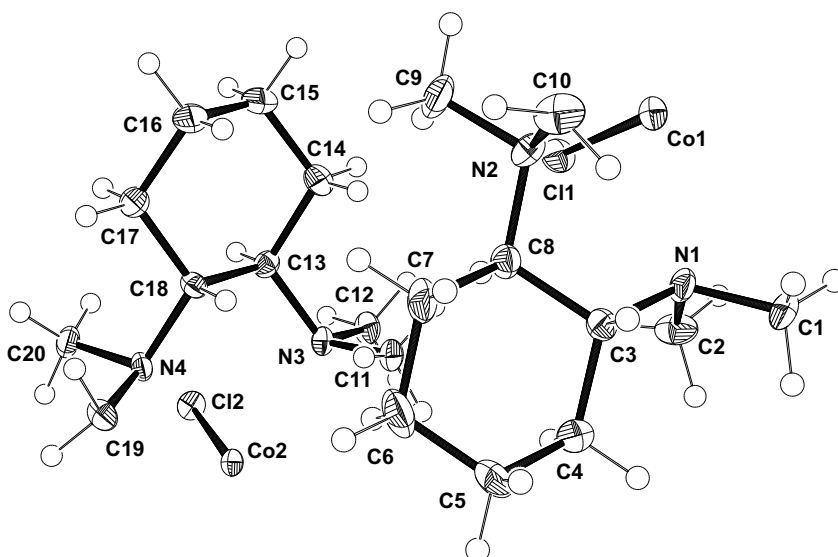


Abb. 8.20: Molekülstruktur von (R,R/S,S)-[Co{Bis-(R,R)-TMCDA}Cl₂] (195) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

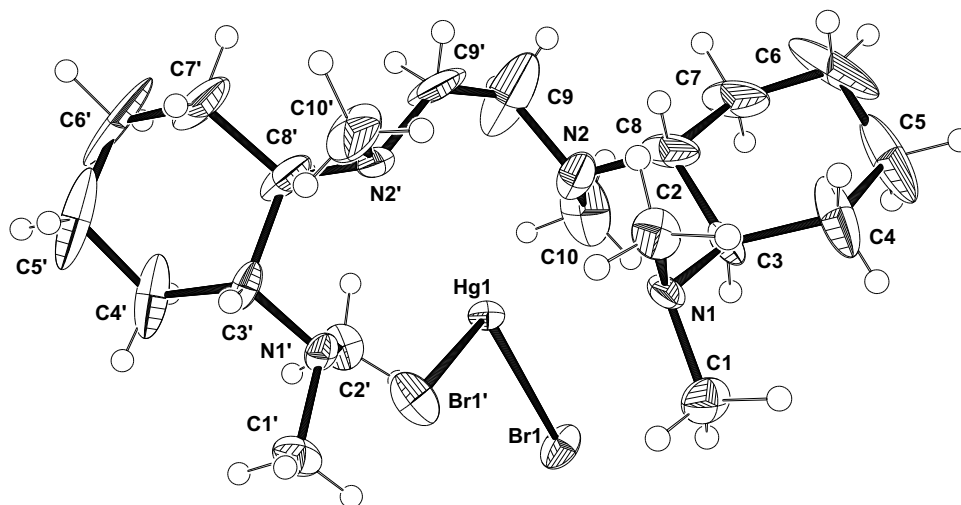


Abb. 8.21: Molekülstruktur von (S,S) -[Hg{Bis-(*R,R*)-TMCDA}Br₂] (**196**) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

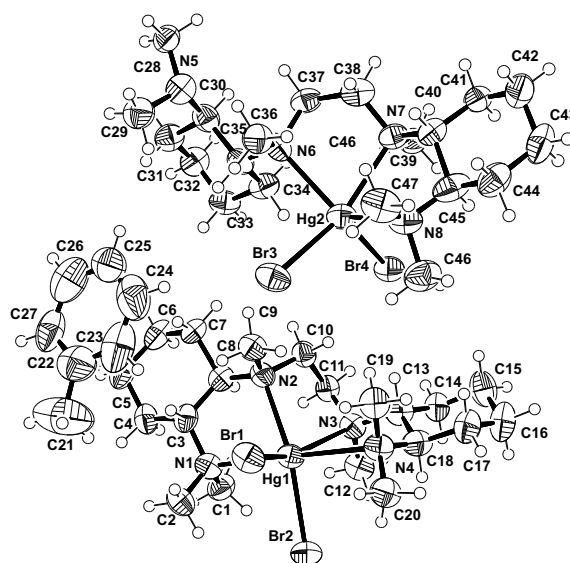


Abb. 8.22: Molekülstruktur von (S,S) -[Hg{Bis-(*R,R*)-TMCDA}Br₂] (**196**) und (S,S) -[Hg{Bis-(*R,R*)-TMCDA- κ^3N,N',N' }Br₂] (**197**) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

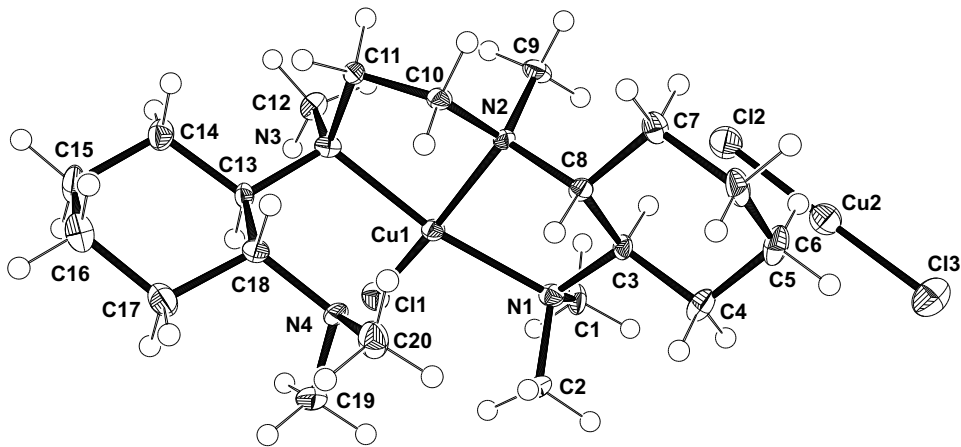


Abb. 8.23: Molekülstruktur von (R,S) -[Cu{Bis-(R,R)-TMCD A}Cl][CuCl₂] (**198**) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

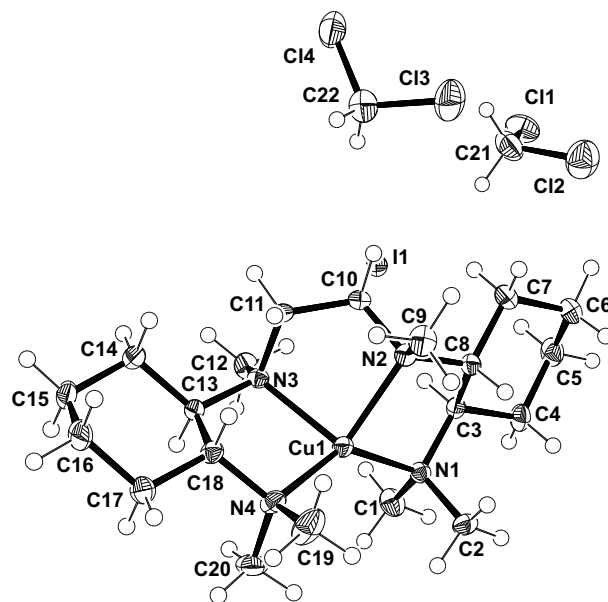


Abb. 8.24: Molekülstruktur von (R,R) -[Cu{Bis-(R,R)-TMCD A}]I (**199**) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

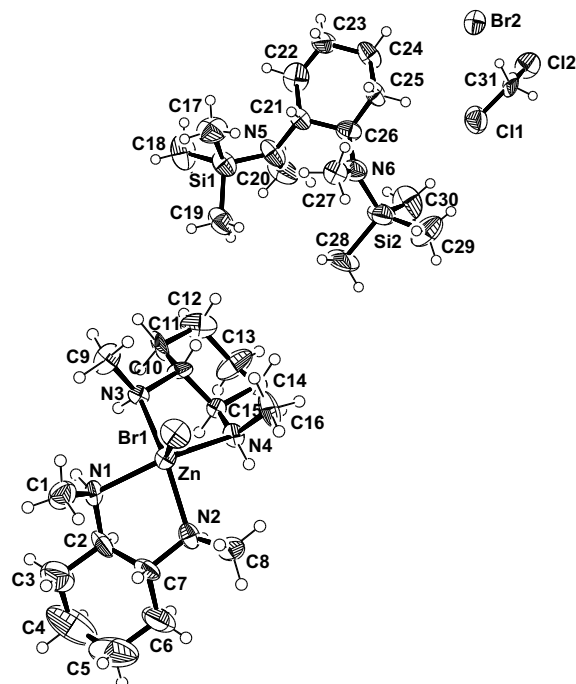


Abb. 8.25: Molekülstruktur von *(R,R)*-DISILAZAN (**201**) und *(R,S,R',S')*-[ZnBr₂{*(R,R)*-DMCDA₂}Br (**204**) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

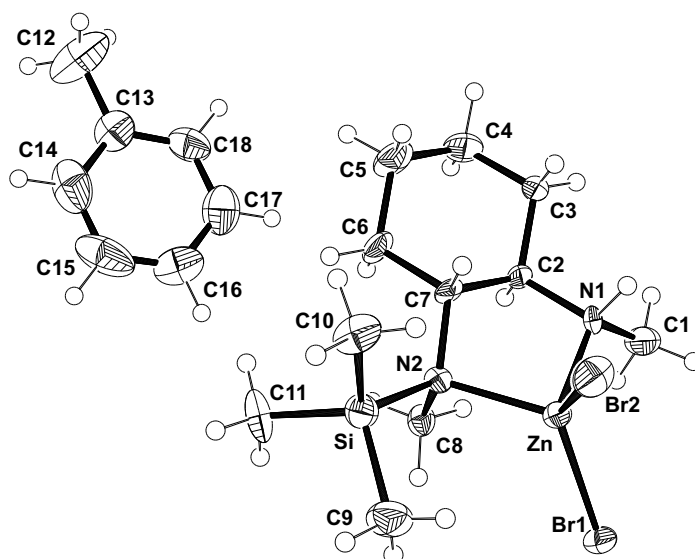


Abb. 8.26: Molekülstruktur von *(R_N, S_{N'})*-[ZnBr₂{*(R,R)*-MONOSILAZAN}] (**205**) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

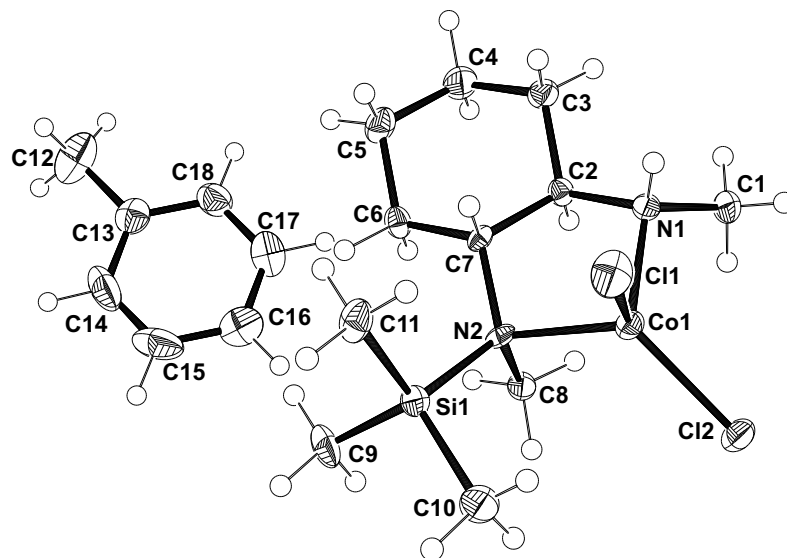


Abb. 8.27: Molekülstruktur von $(R_N,S_{N'})$ -[CoCl₂{(R,R)-MONOSILAZAN}] (206) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

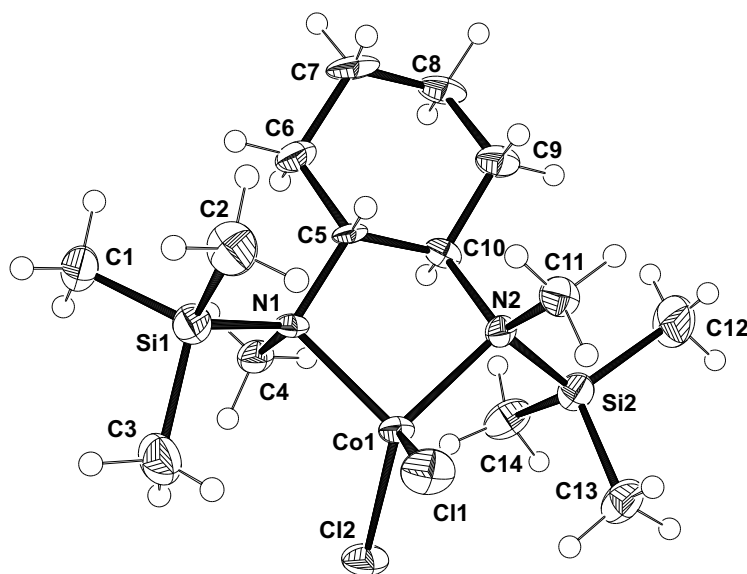


Abb. 8.28: Molekülstruktur von (R,R) -[Co{(R,R)-DISILAZAN}Cl₂] (207) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Tabelle 8.1: Energien der möglichen Kationen von $\{[H(R,R)\text{-TMCDA}]\}_2[\text{MgCl}_4]$ (**174**) berechnet mit M052X/6-31+G(d)^[113-117].

	ohne Nullpunktskorrektur	mit Nullpunktskorrektur
Mg-1	-504.129170753	-503.790300
Mg-2	-504.119836095	-503.780066
Mg-3	-504.112619768	-503.774345
Mg-4	-504.119835830	-503.780062

Tabelle 8.2: Energien der möglichen Kationen von $(R,R)\text{-}[H\{(R,R)\text{-DiBDMCDA}\}][\text{CuCl}_2]$ (**186**) berechnet mit M052X/6-31+G(d)^[113-117].

	ohne Nullpunktskorrektur	mit Nullpunktskorrektur
(R,R-Cu-1)	-739.987514358	-739.475531
(R,R-Cu-2)	-739.978219388	-739.465940
(R,R-Cu-3)	-739.972723256	-739.462078
(R,S-Cu-1)	-739.986726249	-739.474223
(R,S-Cu-2)	-739.973245117	-739.462110
(R,S-Cu-3)	-739.972736253	-739.459885
(S,R-Cu-1)	-739.982860695	-739.471476
(S,R-Cu-2)	-739.967409912	-739.456372
(S,R-Cu-3)	-739.978467534	-739.465950
(S,S-Cu-1)	-739.987666290	-739.476040
(S,S-Cu-2)	-739.967994937	-739.456688
(S,S-Cu-3)	-739.968224542	-739.455748

Tabelle 8.3: Energien der möglichen Isomere der Zinkkomplexe berechnet mit BP86/def-TZVP/COSMO/Dispersion^[130,135,142,146–148,154].

	ohne Ladungskorrektur	mit Ladungskorrektur
(S)-(S)-[ZnBr ₂ {(R,R)-ETMCDA}] (124)	-7472.14497337390	-7472.1458488733
(R)-(S)-[ZnBr ₂ {(R,R)-ETMCDA}] (124)	-7472.14194964800	-7472.1427931081
(S)-(S)-[ZnCl ₂ {(R,R)-PTMCDA}] (125)	-3361.76255862407	-3361.7624836836
(R)-(S)-[ZnCl ₂ {(R,R)-PTMCDA}] (125)	-3361.76007169426	-3361.7599983704
(S)-(S)-[ZnBr ₂ {(R,R)-PrTMCDA}] (182)	-7511.47623759175	-7511.4770228467
(R)-(S)-[ZnBr ₂ {(R,R)-PrTMCDA}] (182)	-7511.47354514163	-7511.4743413293
(S,S-(S,S)-[ZnBr ₂ {(R,R)-DEDMCDA}] (127)	-7511.47966692254	-7511.4804489861
(R,S-(S,S)-[ZnBr ₂ {(R,R)-DEDMCDA}] (127)	-7511.47665730850	-7511.4774232005
(R,R-(S,S)-[ZnBr ₂ {(R,R)-DEDMCDA}] (127)	-7511.47373513846	-7511.4745453477
(S,S-(S,S)-[ZnCl ₂ {(R,R)-DEDMCDA}] (126)	-3283.10490985303	-3283.1048746962
(R,S-(S,S)-[ZnCl ₂ {(R,R)-DEDMCDA}] (126)	-3283.10186275755	-3283.1018230994
(R,R-(S,S)-[ZnCl ₂ {(R,R)-DEDMCDA}] (126)	-3283.09912843455	-3283.0991228960

Universitaet Dortmund, Anorganische Chemie, Prof. Dr. H.-L.Keller

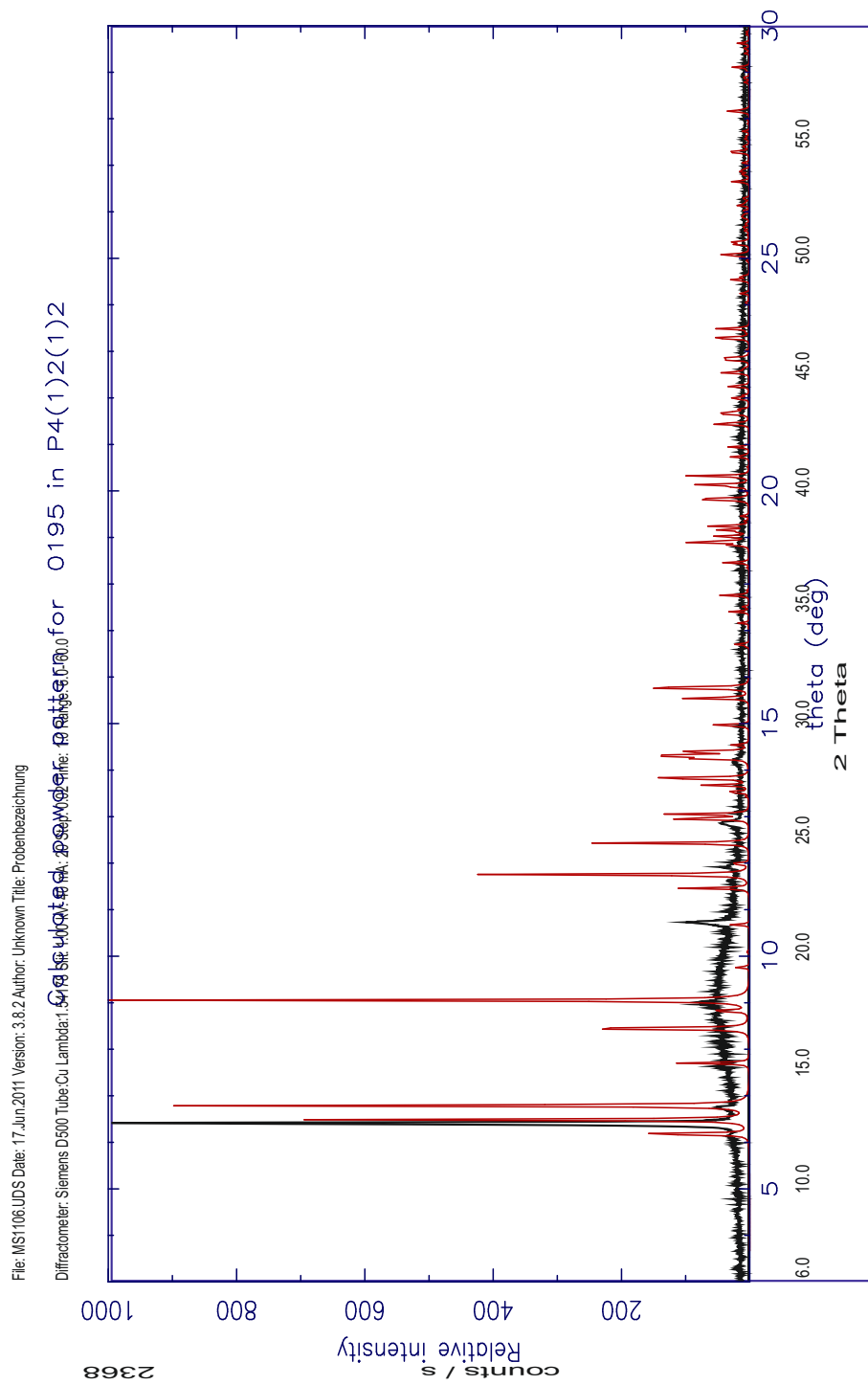


Abb. 8.29: Pulverdiffraktogramm von (S,S) - $[\text{CuCl}_2\{(R,R)\text{-DEDMCDA}\}]$ (**189**).

Universitaet Dortmund, Anorganische Chemie, Prof. Dr. H.-L.Keller

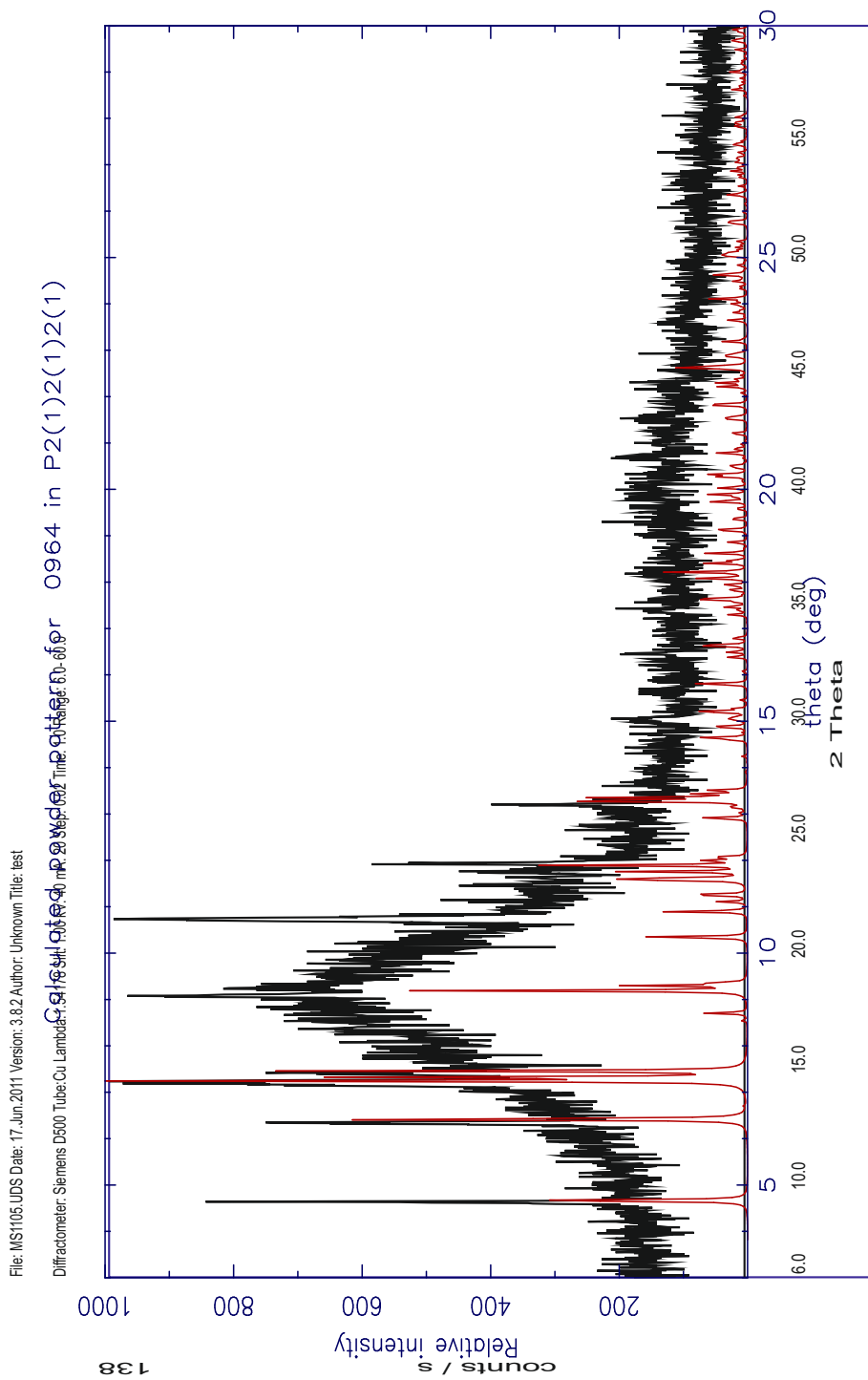


Abb. 8.30: Pulverdiffraktogramm von (S)-[CoCl₂{(R,R)-ETMCDA}] (191).

Universitaet Dortmund, Anorganische Chemie, Prof. Dr. H.-L.Keller

File: MS1110.UDS Date: 13.Jul.2011 Version: 3.8.2 Author: Unknown Title: Probenbezeichnung

Diffractometer: Siemens D500 Tube:Cu Lambda:1.54178 Slit: 1.00 kV: 40 mA: 20 Step: 0.02 Time: 1.0 Range: 6.0- 60.0

Calculated powder pattern for $P2_1(1)2(1)2(1)$

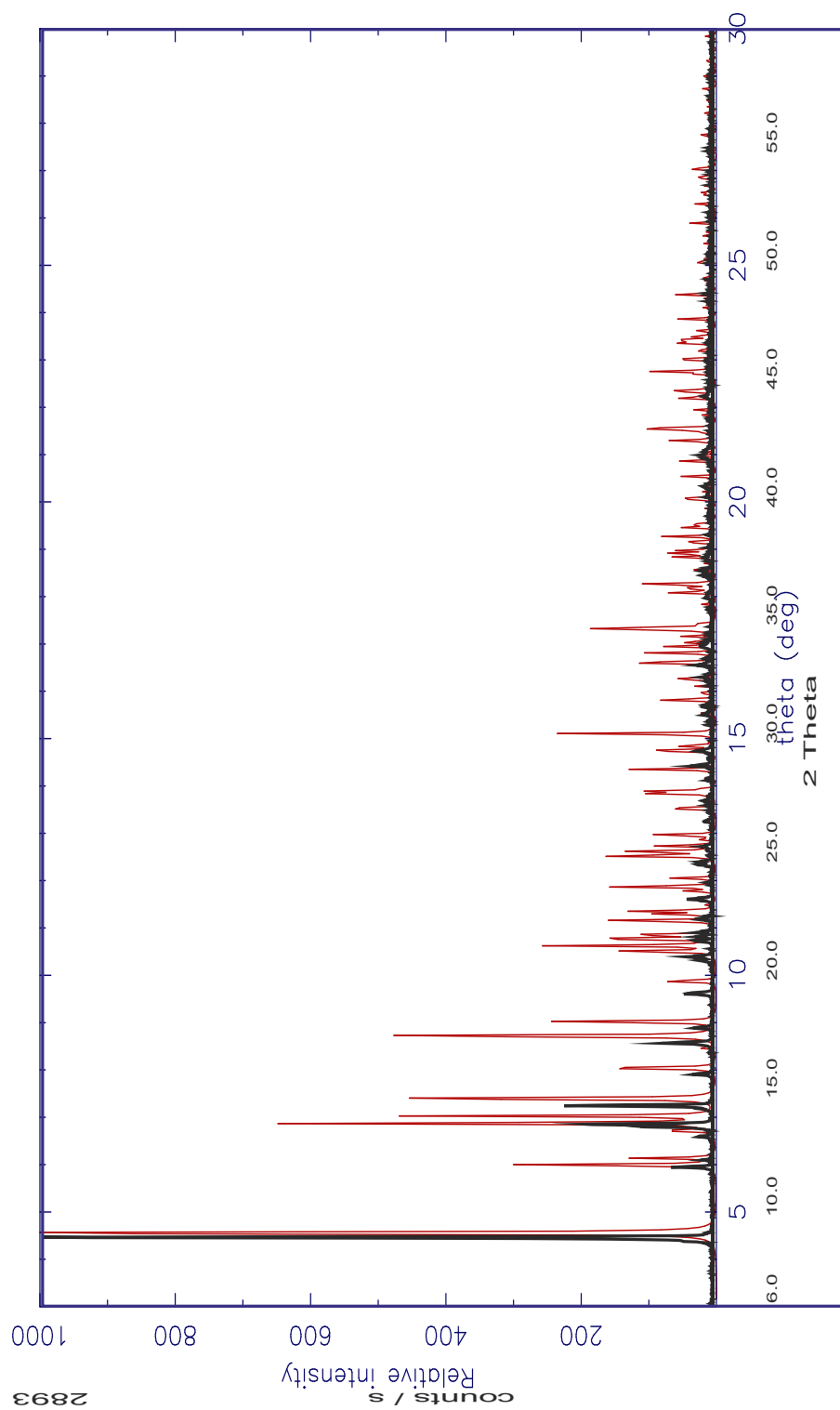


Abb. 8.31: Pulverdiffraktogramm von (S)-[HgBr₂{(R,R)-PrTMCD}] (192).

Universitaet Dortmund, Anorganische Chemie, Prof. Dr. H.-L.Keller

File: MS1104.UDS Date: 18.May.2011 Version: 3.8.2 Author: Unknown Title: PE2-304

Diffractometer: Siemens D5000 Calculated powder pattern for $\text{Co}_2\text{V}_2\text{O}_7$ via CSD : 20 Step: 0.02 Time: 1.0 Range: 6.0-60.0

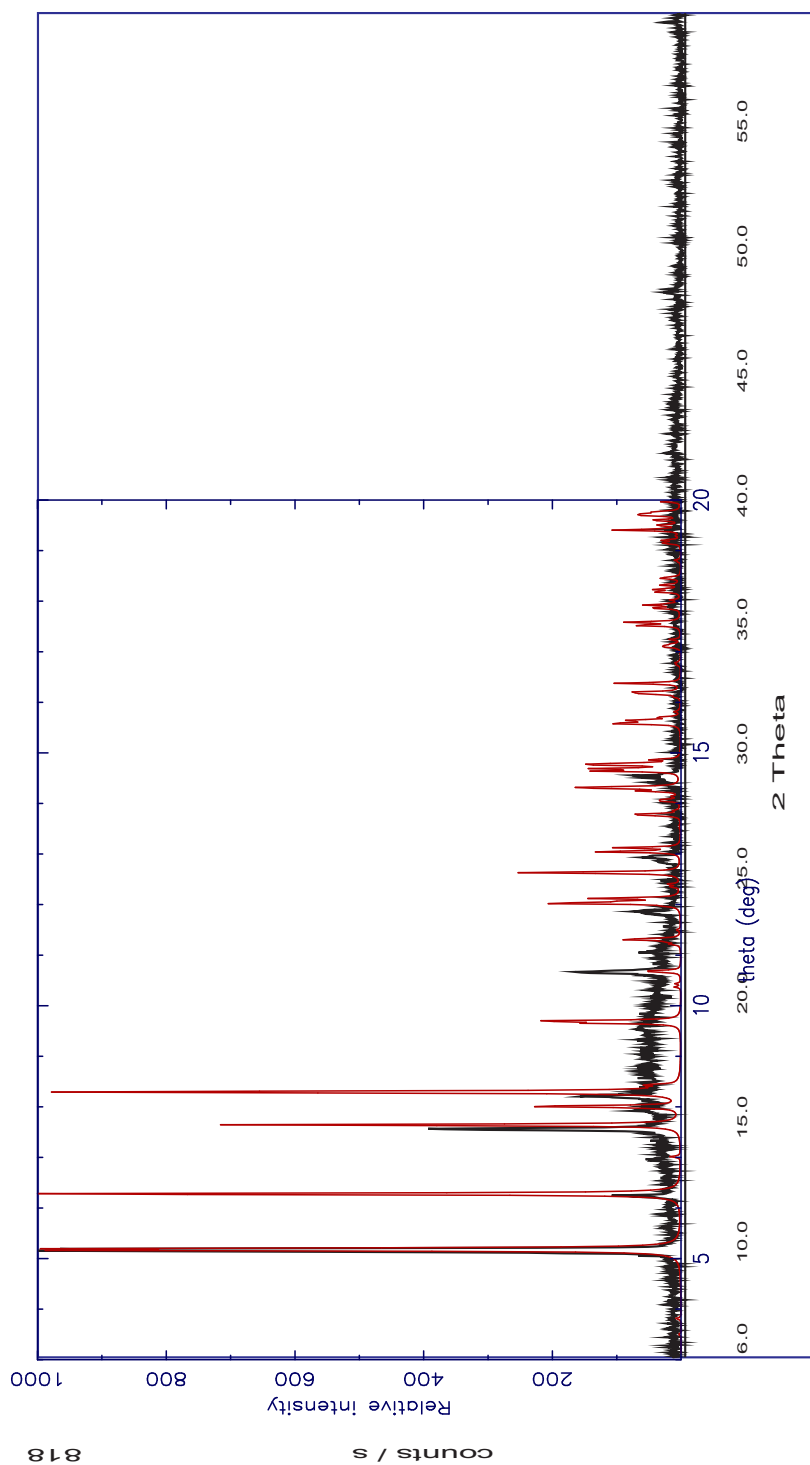


Abb. 8.32: Pulverdiffraktogramm von $(R,R/S,S)$ - $[\text{Co}\{\text{Bis-}(R,R)\text{-TMEDA}\}\text{Cl}_2]$ (195).

8.2 Weitere Angaben zu den Einkristallröntgenstrukturanalysen und den quantenchemischen Berechnungen von Kapitel 4.2

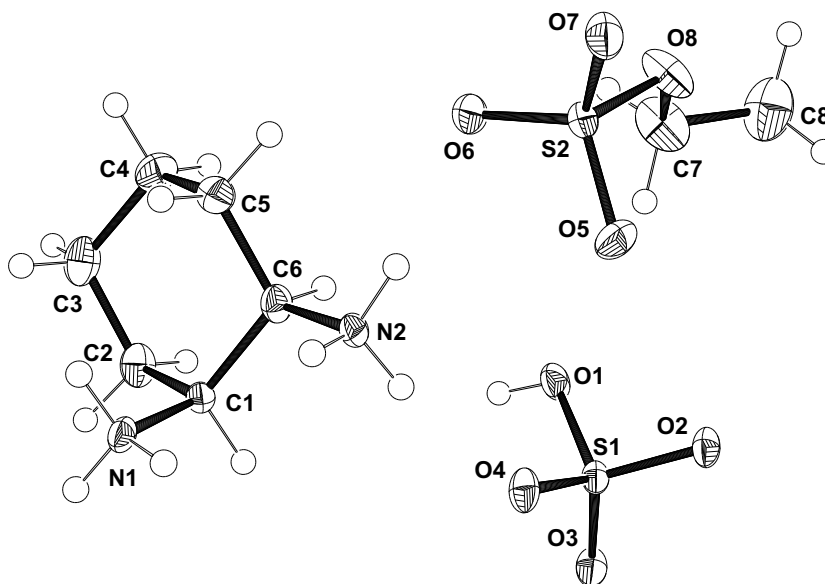


Abb. 8.33: Molekülstruktur von [cis-Cyclohexan-1,2-diammonium][HSO₄][EtOSO₃] (216) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

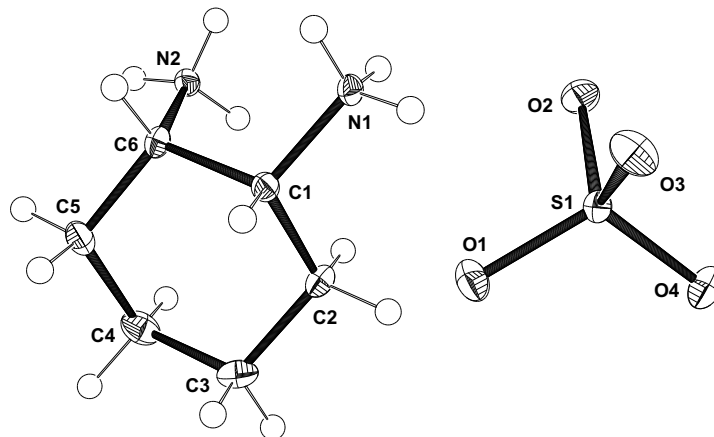


Abb. 8.34: Molekülstruktur von *cis*-Cyclohexan-1,2-diammoniumsulfat (215) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

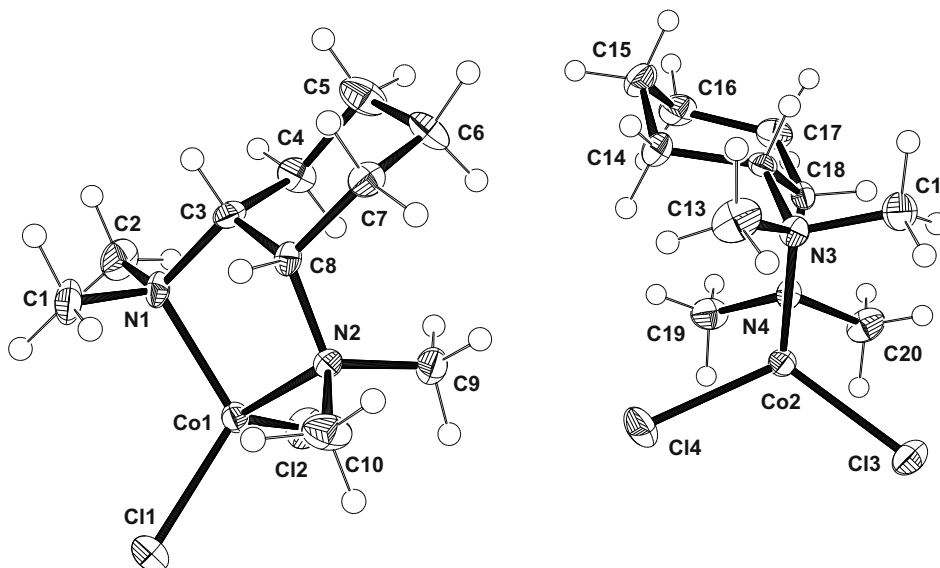


Abb. 8.35: Molekülstruktur von $[\text{CoCl}_2(\textit{cis}\text{-TMCDA})]$ (217) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

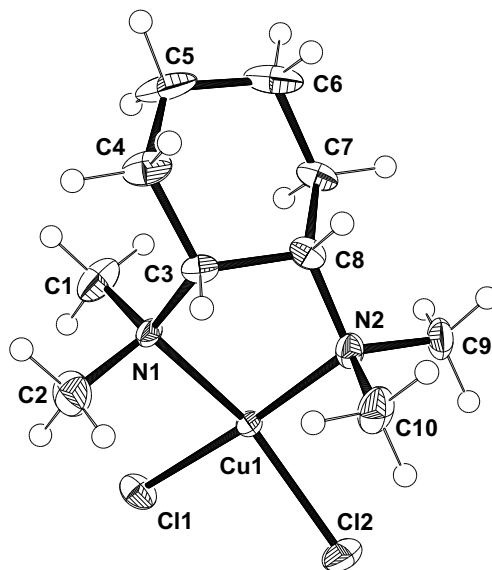


Abb. 8.36: Molekülstruktur von $[\text{CuCl}_2(\text{cis-TMCDA})]$ (218) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

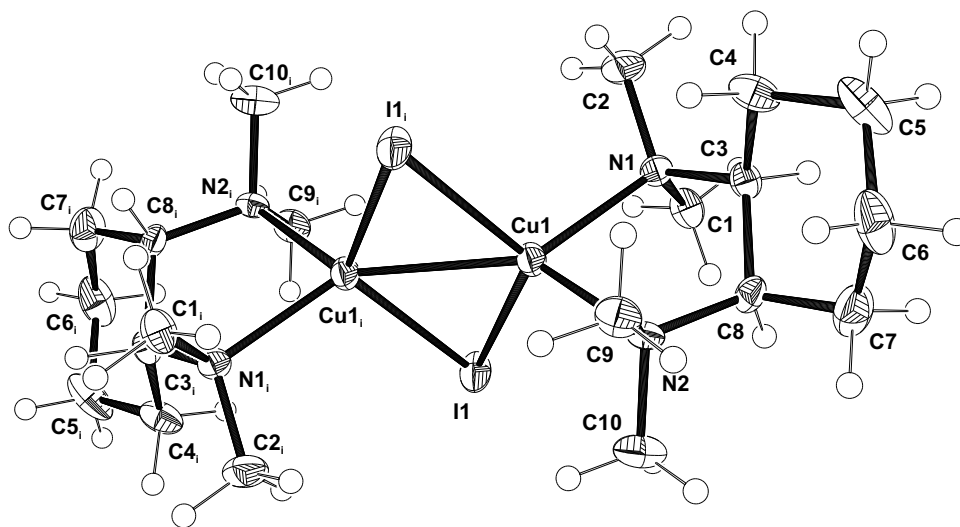


Abb. 8.37: Molekülstruktur von $[\text{CuI}(\text{cis-TMCDA})]_2$ (219) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

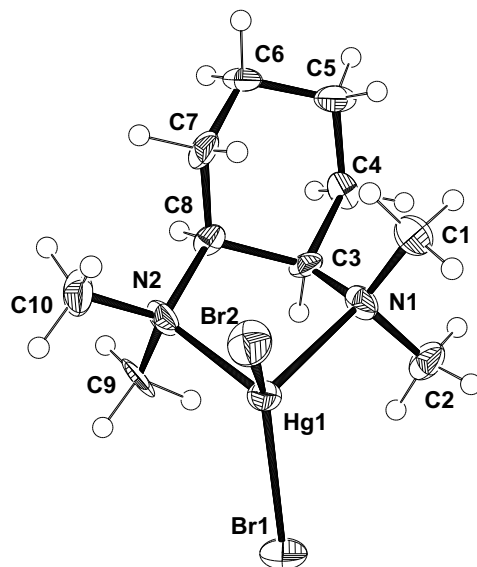


Abb. 8.38: Molekülstruktur von [HgBr₂(*cis*-TMCDA)] (220) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

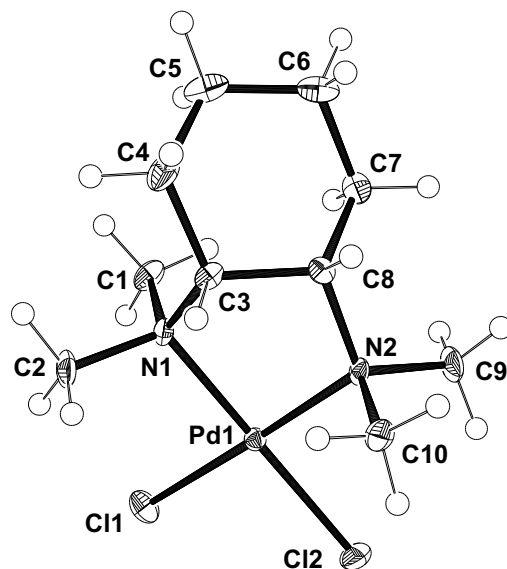


Abb. 8.39: Molekülstruktur von [PdCl₂(*cis*-TMCDA)] (221) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

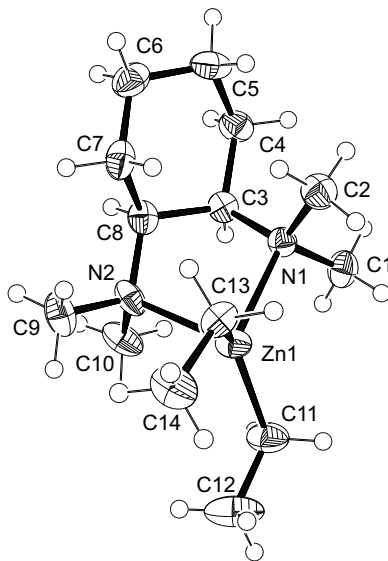


Abb. 8.40: Molekülstruktur von [ZnEt₂(*cis*-TMCDA)] (222) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

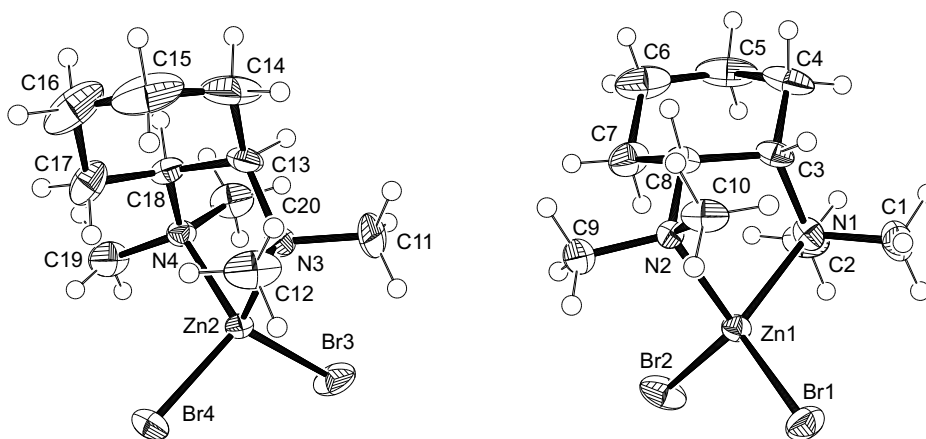


Abb. 8.41: Molekülstruktur von [ZnBr₂(*cis*-TMCDA)] (224) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

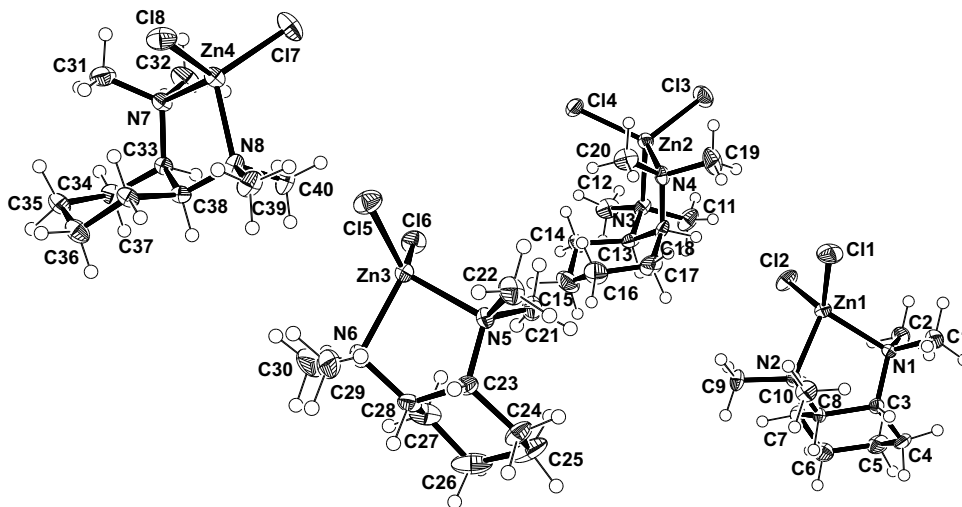


Abb. 8.42: Molekülstruktur von [ZnCl₂(*cis*-TMCD)] (223) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

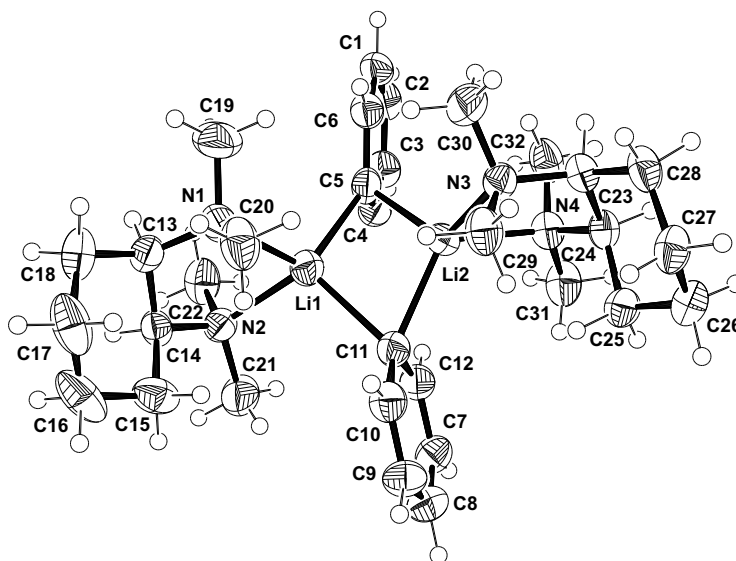


Abb. 8.43: Molekülstruktur von [(*cis*-TMCD)Li]₂(μ-Ph)₂ (227) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

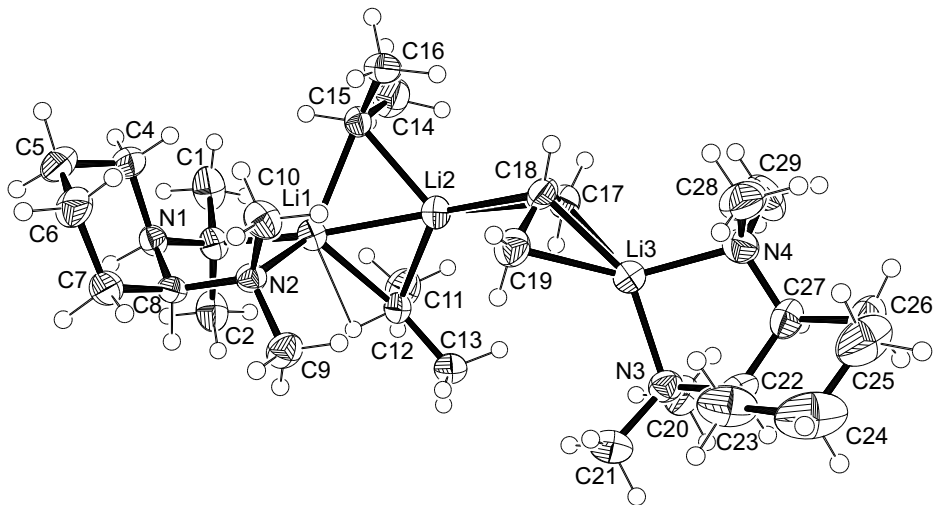


Abb. 8.44: Molekülstruktur von $[(\text{cis-TMCDA})\text{Li}(\mu\text{-}i\text{-Pr})_2\text{Li}(\text{C}_3\text{H}_5)\text{Li}(\text{cis-TMCDA})]$ (228) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

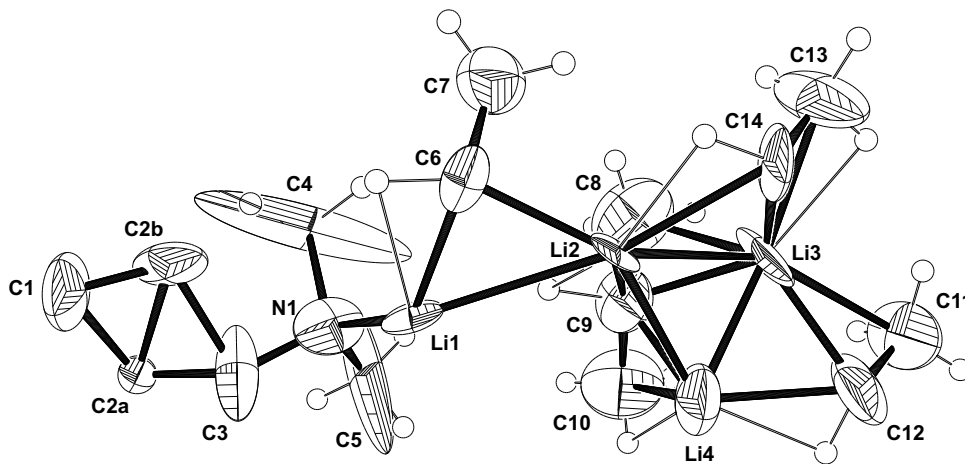


Abb. 8.45: Molekülstruktur von $[(\text{cis-TMCDA})\text{Li}(\mu\text{-}i\text{-Pr})(i\text{-PrLi})_4]$ (235) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

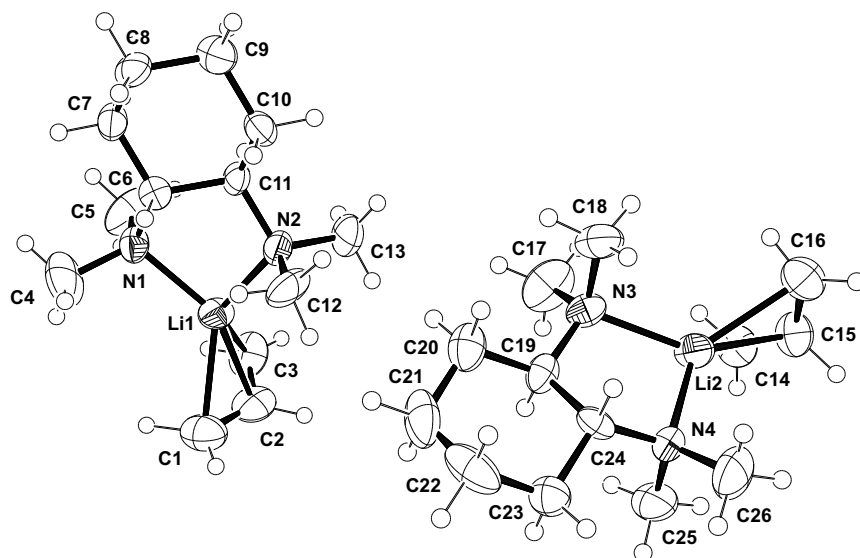


Abb. 8.46: Molekülstruktur von $[\text{Li}(\text{C}_3\text{H}_5)\{(\text{R},\text{R})\text{-TMCDA}\}]$ (237) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

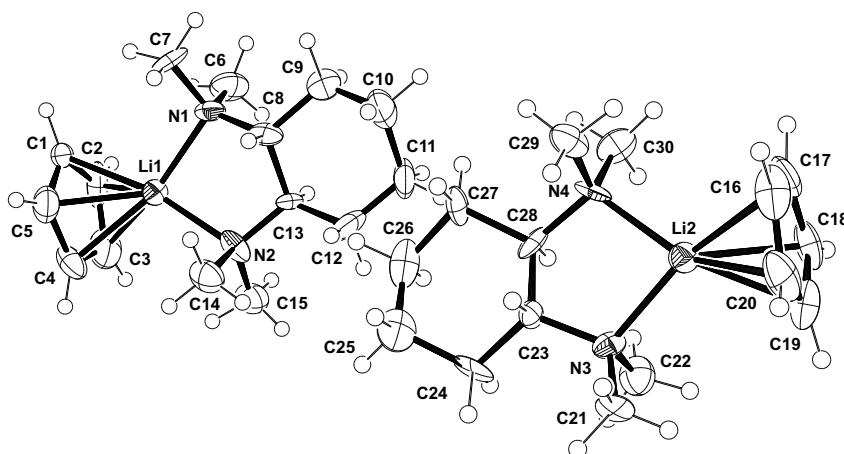


Abb. 8.47: Molekülstruktur von $[\text{LiCp}\{(\text{R},\text{R})\text{-TMCDA}\}]$ (238) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

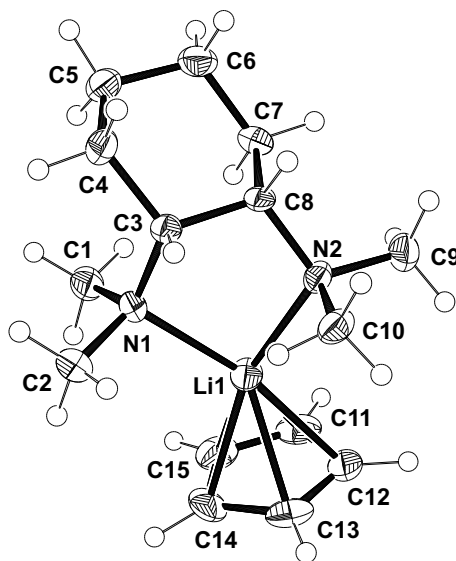


Abb. 8.48: Molekülstruktur von $[\text{LiCp}(\text{cis-TMCDA})]$ (239) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

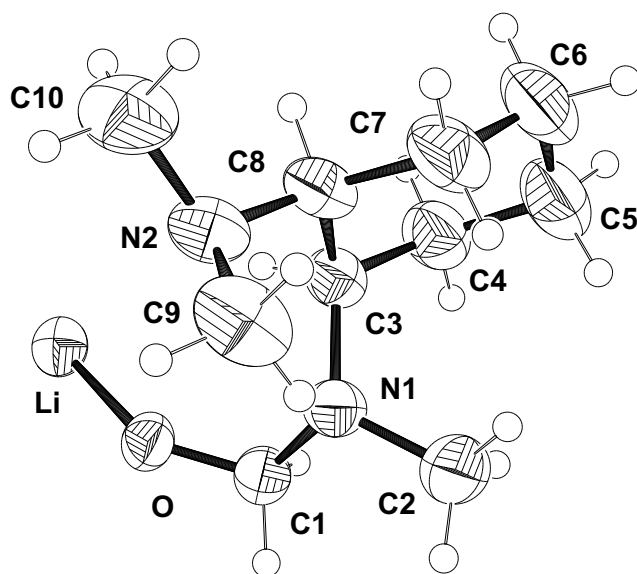


Abb. 8.49: Molekülstruktur von *N*-Lithiummethoxy-*N,N,N'*-trimethylcyclohexan-(1*R*,2*S*)-diamin (*rac.*) (248) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Tabelle 8.4: Energien der möglichen Koordinationsverbindungen mit *cis*-TMCDA (**158**), Allyllithium (**229**) und *iso*-Propyllithium berechnet mit M052X/6-31+G(d)^[113–117].

	ohne Nullpunktskorrektur	mit Nullpunktskorrektur
[Li(C ₃ H ₅)(<i>cis</i> -TMCDA)] (230)	−628.569256414	−628.172366
<i>cis</i> -TMCDA (158) 1	−503.717168585	−503.393467
<i>cis</i> -TMCDA (158) 2	−503.717180129	−503.393469
[{(<i>cis</i> -TMCDA)Li} ₂ (μ - <i>iso</i> -Propyl) ₂] (231)	−1259.47201086	−1258.706343
[(<i>cis</i> -TMCDA)Li(μ - <i>i</i> -Pr) ₂ Li(<i>i</i> -Pr)Li(<i>cis</i> -TMCDA)] (233)	−1385.59619861	−1384.659729
[(<i>cis</i> -TMCDA)Li(μ - <i>i</i> -Pr) ₂ Li(C ₃ H ₅)Li(<i>cis</i> -TMCDA)] (228)	−1384.42065413	−1383.507605

Tabelle 8.5: Energien der berechneten Strukturen zur α -Lithiierung von *cis*-TMCDA (**158**) berechnet mit M052X/6-31+G(d)^[113–117].

	ohne Nullpunktskorrektur	mit Nullpunktskorrektur
240 a	−669.072048122	−668.624572
240 b	−669.071700982	−668.624132
ÜZar1	−669.027274895	−668.585546
ÜZar2	−669.030608507	−668.588966
ÜZas1	−669.030230109	−668.588403
ÜZas2	−669.026762840	−668.585577
ÜZbr1	−669.030230346	−668.588409
ÜZbr2	−669.030608651	−668.588970
ÜZbs1	−669.027275220	−668.585553
ÜZbs2	−669.030608651	−668.588970

Tabelle 8.6: Energien der berechneten Strukturen zur α -Lithiierung von TMS-*cis*-TMCDA (*rac.*) (**241**) berechnet mit M052X/6-31+G(d)^[113–117].

	ohne Nullpunktskorrektur	mit Nullpunktskorrektur
243 a	–1077.69750510	–1077.146854
243 b	–1077.69345173	–1077.143241
ÜZar1	–1077.65287847	–1077.108227
ÜZar2	–1077.65057243	–1077.105607
ÜZas1	–1077.64883313	–1077.103413
ÜZas2b	–1077.59783896	–1077.118185
ÜZbr1	–1077.64965598	–1077.104985
ÜZbr2	–1077.64653109	–1077.102467
ÜZbs1	–1077.64845510	–1077.104003
ÜZbs2a	–1077.66535780	–1077.120055
ÜZbs2b	–1077.66197080	–1077.115566

Tabelle 8.7: Energien der berechneten Strukturen zur Thermodynamik der α -Lithiierung von *cis*-TMCDA (**158**) beziehungsweise TMS-*cis*-TMCDA (*rac.*) (**241**) berechnet mit M052X/6-31+G(d)^[113–117].

	ohne Nullpunktskorrektur	mit Nullpunktskorrektur
244a	–1352.07230390	–1351.198015
244b	–1352.06633681	–1351.191295
244c	–1352.06660055	–1351.191438
160-3	–1532.01768820	–1531.078488
160-4	–2042.73327303	–2041.477734
<i>t</i> -BuLi-Tetramer	–661.416247655	–660.922427

8.3 Weitere Angaben zu den Einkristallröntgenstrukturanalysen und den quantenchemischen Berechnungen von Kapitel 4.3

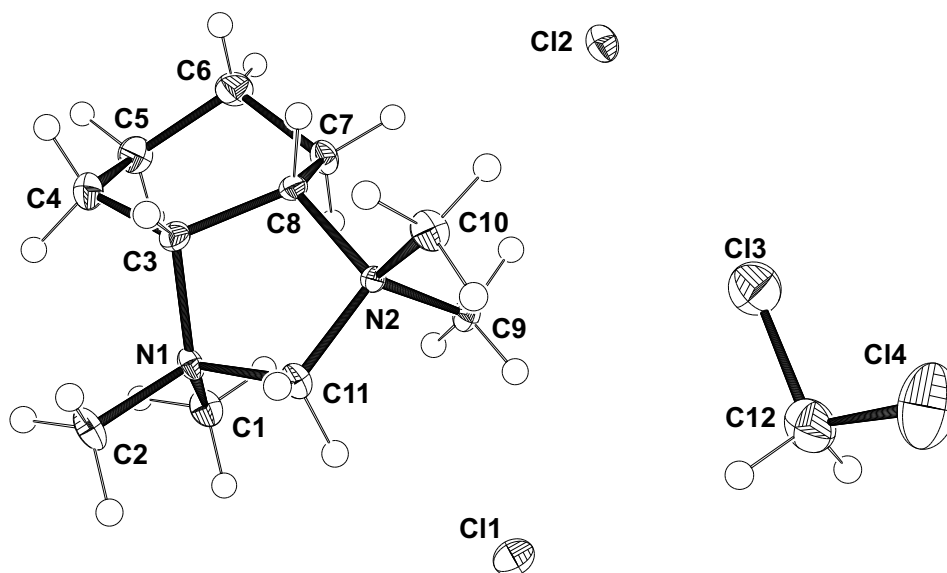


Abb. 8.50: Molekülstruktur von [cis-CTMI]Cl₂ (251) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Tabelle 8.8: Energien der berechneten Strukturen zur Reaktion von (*R,R*)-DEDMCDA (**120**) mit Dichlormethan, berechnet mit M052X/6-31+G(d)^[113-117].

	ohne Nullpunktskorrektur	mit Nullpunktskorrektur
ÜZ Inversion	-582.334486364	-581.956030
Edukt A	-582.343270165	-581.962562
Edukt B	-582.342091468	-581.961443
E1	-582.343524366	-581.963039
E2	-582.342014366	-581.961759
E3	-582.338837743	-581.958310
E4	-582.343270166	-581.962562
ÜZ1	-1541.93951543	-1541.525398
ÜZ2	-1541.93592280	-1541.521528
ÜZ3	-1541.93416275	-1541.520499
ÜZ4	-1541.94023862	-1541.526178
I1a=I2b	-1081.59622486	-1081.178616
I1b=I2a	-1081.59439817	-1081.177027
I3a=I4b	-1081.59895438	-1081.181452
I3b=I4a	-1081.60419745	-1081.186618
ÜZ2-1a=ÜZ2-2b	-1081.55401762	-1081.137116
ÜZ2-1b=ÜZ2-2a	-1081.55275555	-1081.136217
ÜZ2-3a=ÜZ2-4b	-1081.55403221	-1081.137081
ÜZ2-3b=ÜZ2-4a	-1081.55629624	-1081.138974
CH₂Cl₂	-959.637622304	-959.607303

Tabelle 8.9: Energien der berechneten Strukturen zur Reaktion von (*R,R*)-PrTMCDA (**181**) mit Dichlormethan, berechnet mit M052X/6-31+G(d)^[113-117] und PCM^[152,153] (Dichlormethan).

	ohne Nullpunktskorrektur	mit Nullpunktskorrektur
E1	-582.344830050	-581.964617
E2	-582.344855643	-581.964757
E3	-582.345259746	-581.965269
E4	-582.344821302	-581.964588
ÜZ1	-1541.95630045	-1541.543608
ÜZ2	-1541.95753183	-1541.544584
ÜZ3	-1541.96226899	-1541.550332
ÜZ4	-1541.96159575	-1541.549535
I1	-1081.64933827	-1081.233445
I2	-1081.65809330	-1081.241282
I3a=I4b	-1081.66072729	-1081.244515
I3b=I4a	-1081.66231547	-1081.245922
ÜZ2-1	-1081.55401762	-1081.137116
ÜZ2-2	-1081.55275555	-1081.136217
ÜZ2-3a=ÜZ2-4b	-1081.63054154	-1081.214807
ÜZ2-3b=ÜZ2-4a	-1081.62838732	-1081.213132
CPrTMI-Dikation	-621.387290140	-620.974169
CH₂Cl₂	-959.641906375	-959.611824

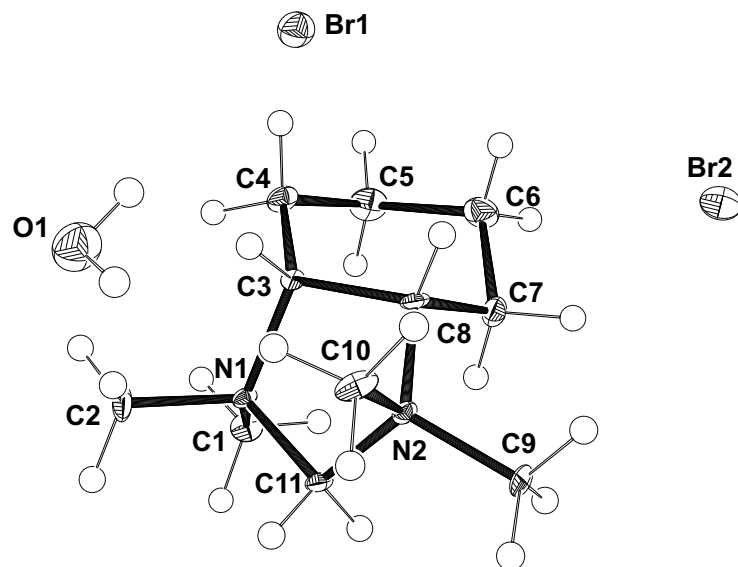


Abb. 8.51: Molekülstruktur von $[cis\text{-CTMI}]\text{Br}_2$ (252) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

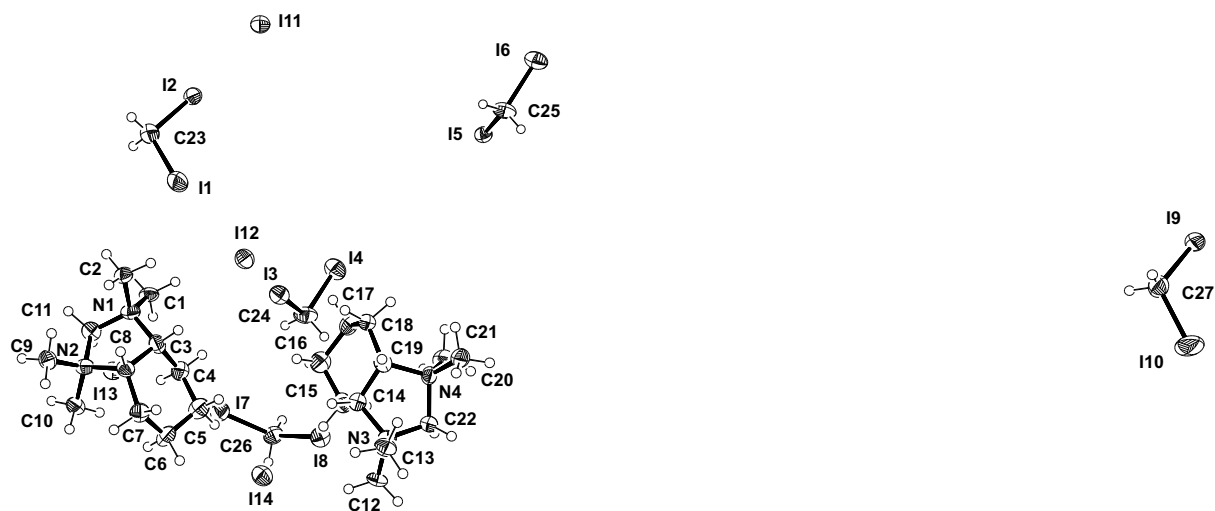


Abb. 8.52: Molekülstruktur von $[cis\text{-CTMI}]\text{I}_2$ (253) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

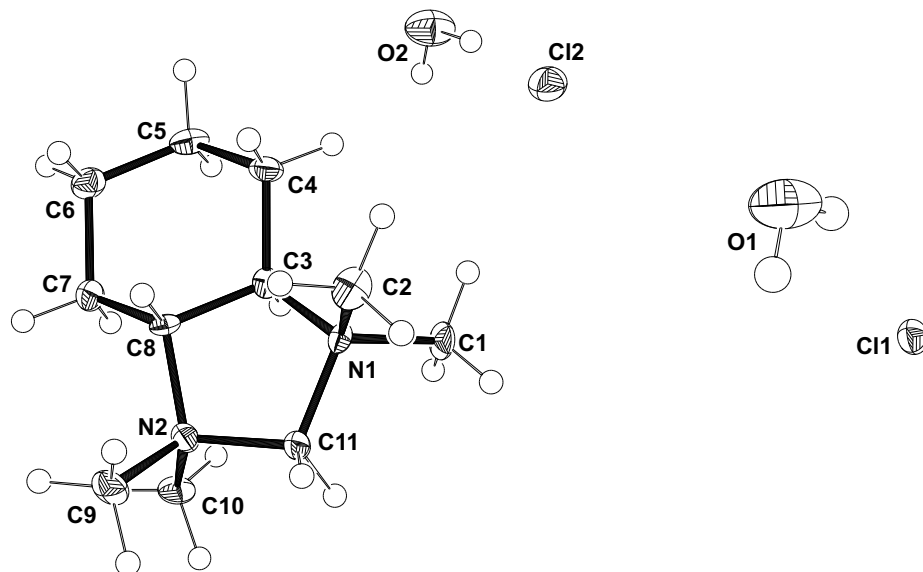


Abb. 8.53: Molekülstruktur von $[(R,R)\text{-CTMI}]\text{Cl}_2$ (254) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

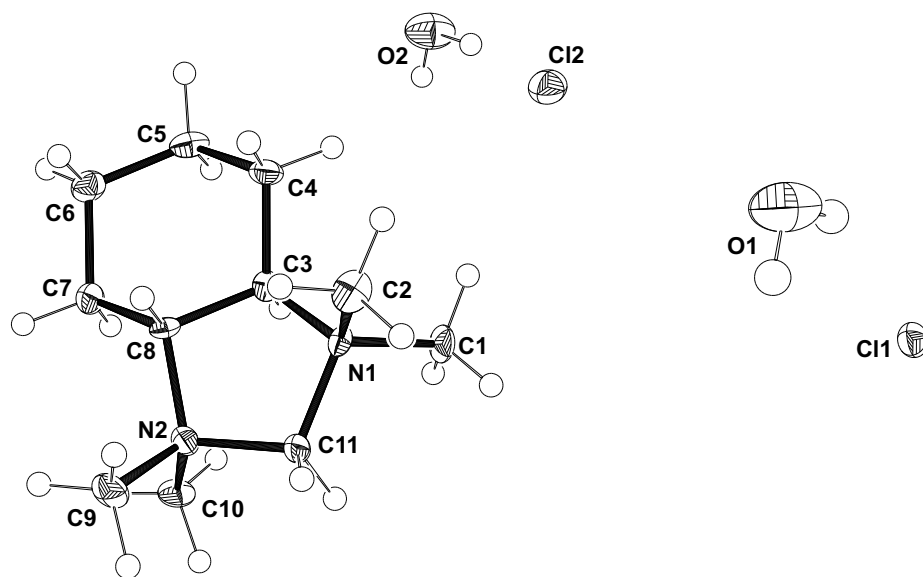


Abb. 8.54: Molekülstruktur von $[(R,R)\text{-CTMI}]\text{I}_2$ (256) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

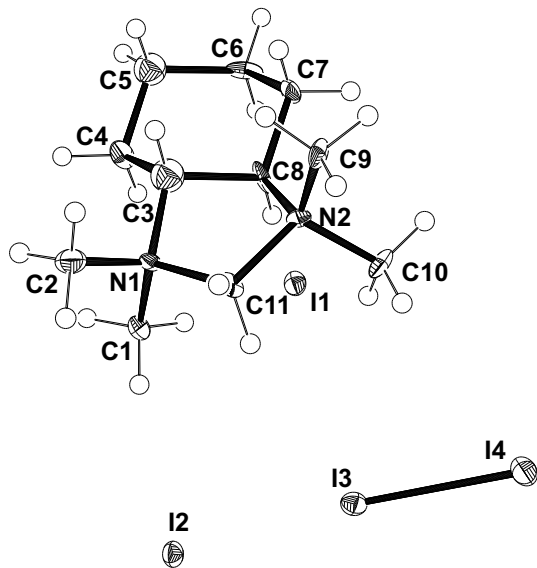


Abb. 8.55: Molekülstruktur von $[(R,R)\text{-CTMI}][\text{I}_3]\text{I}$ (257) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

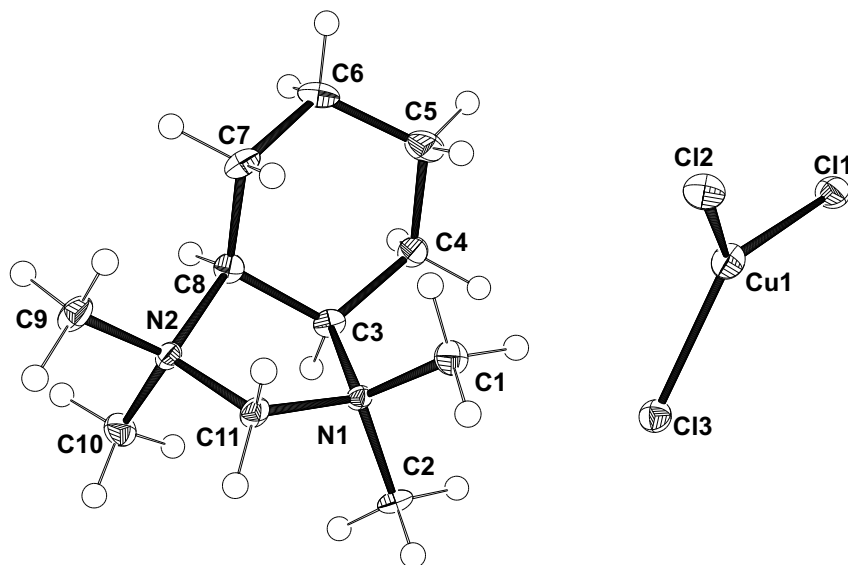


Abb. 8.56: Molekülstruktur von $[\text{cis-CTMI}][\text{CuCl}_3]$ (258) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

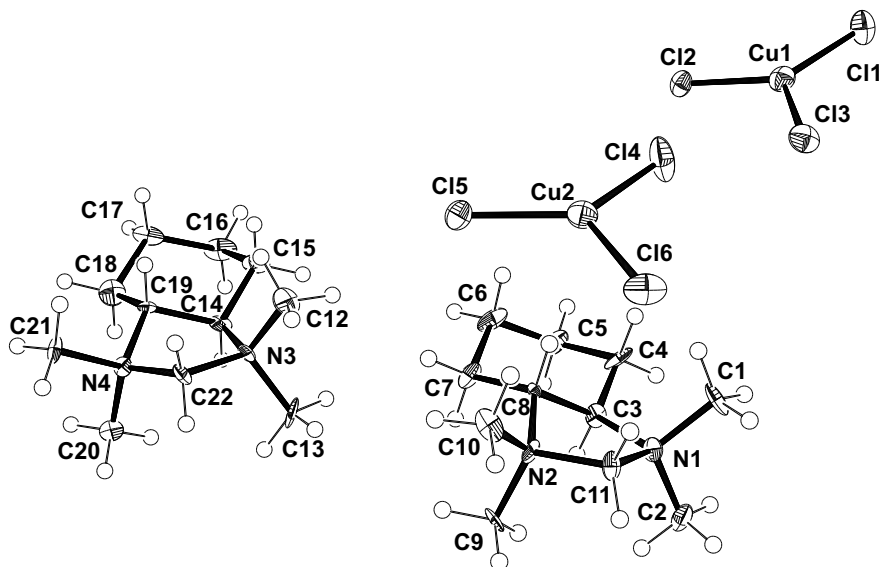


Abb. 8.57: Molekülstruktur von $[(R,R)\text{-CTMI}][\text{CuCl}_3]$ (259) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

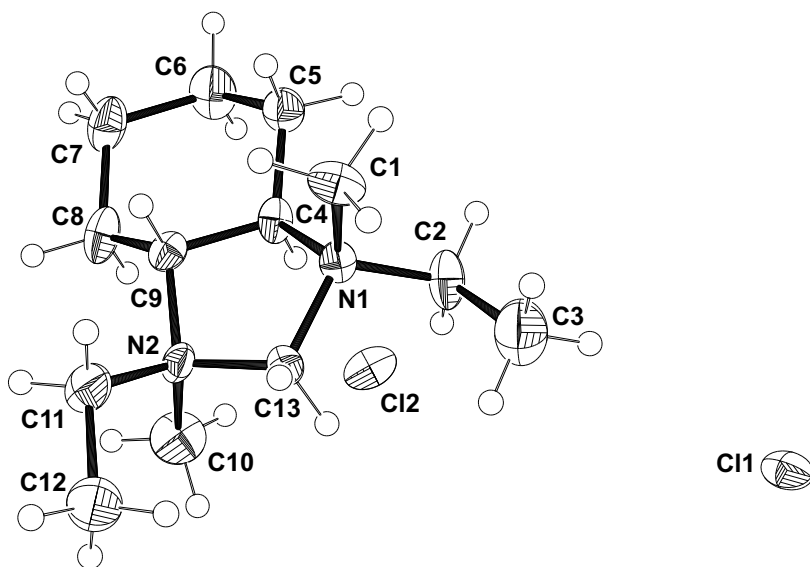


Abb. 8.58: Molekülstruktur von $[(R,R)\text{-CDEDMI}]\text{Cl}_2$ (260) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

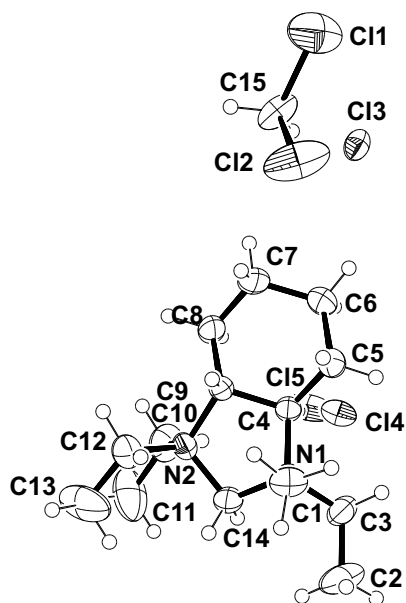


Abb. 8.59: Molekülstruktur von $[(R,R)\text{-CDEDMI}]\text{Cl}_2$ (260) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

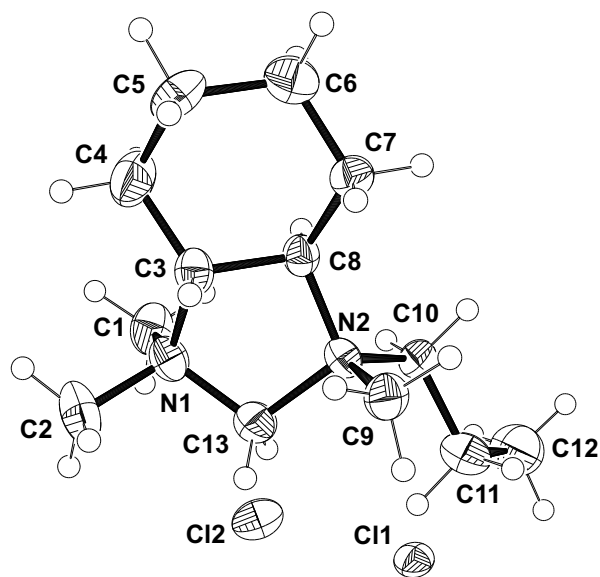


Abb. 8.60: Molekülstruktur von $[(R,R)\text{-CPrTMI}]\text{Cl}_2$ (269) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

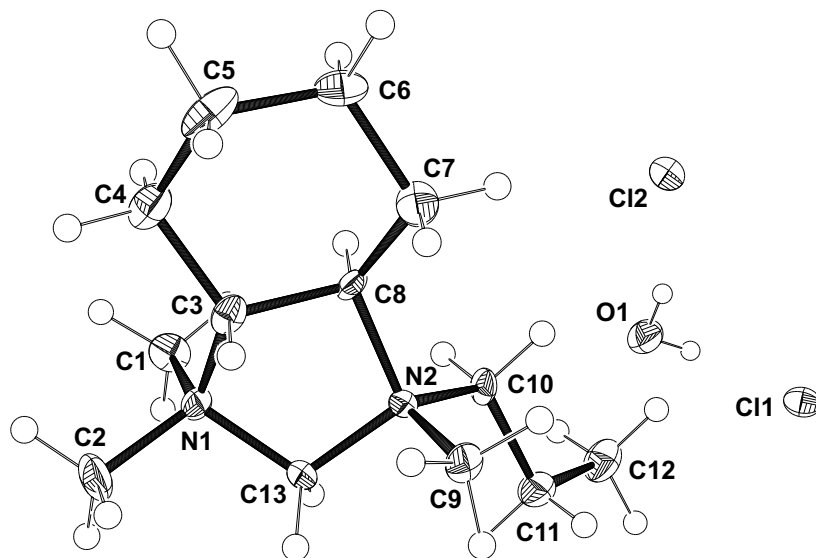


Abb. 8.61: Molekülstruktur von $[(R,R)\text{-CPrTMI}]\text{Cl}_2$ (269) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

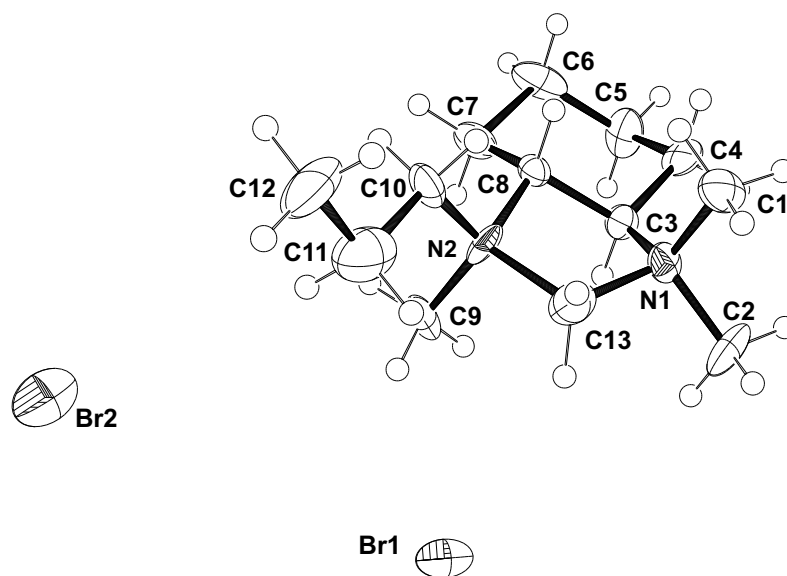


Abb. 8.62: Molekülstruktur von $[(R,R)\text{-CPrTMI}]\text{Br}_2$ (270) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

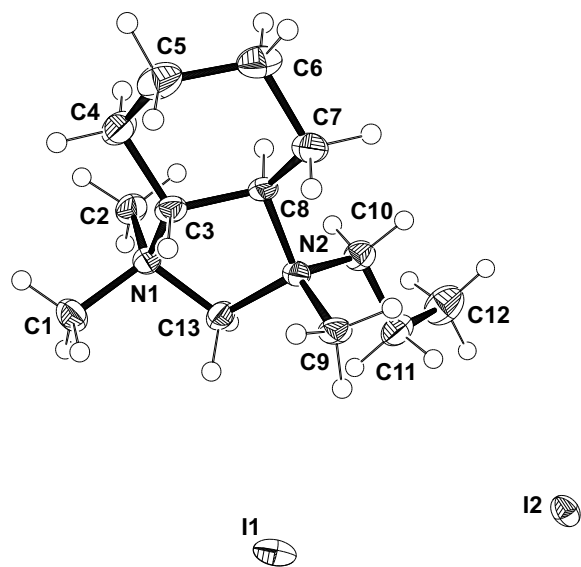


Abb. 8.63: Molekülstruktur von $[(R,R)\text{-CPrTMI}]_2$ (271) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

8.4 Weitere Angaben zu den Einkristallröntgenstrukturanalysen und den quantenchemischen Berechnungen von Kapitel 4.4

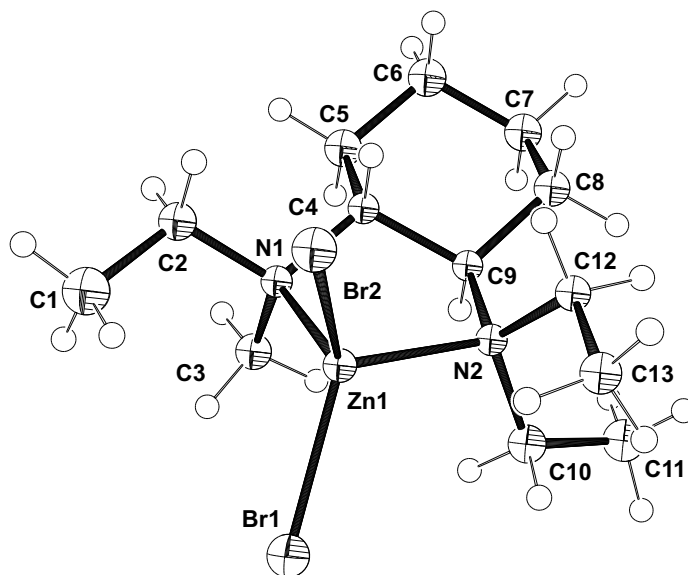


Abb. 8.64: Molekülstruktur von (S) - $[\text{ZnBr}_2\{(R,R)\text{-MTECDA}\}]$ (273) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Tabelle 8.10: Energien der berechneten Strukturen von (R,R) -TMCDA (6), berechnet mit M052X/6-31+G(d)^[113–117].

	ohne Nullpunktkorrektur	mit Nullpunktkorrektur
6A	–503.726650301	–503.403645
6B	–503.725429968	–503.402726
6C	–503.717402902	–503.394967

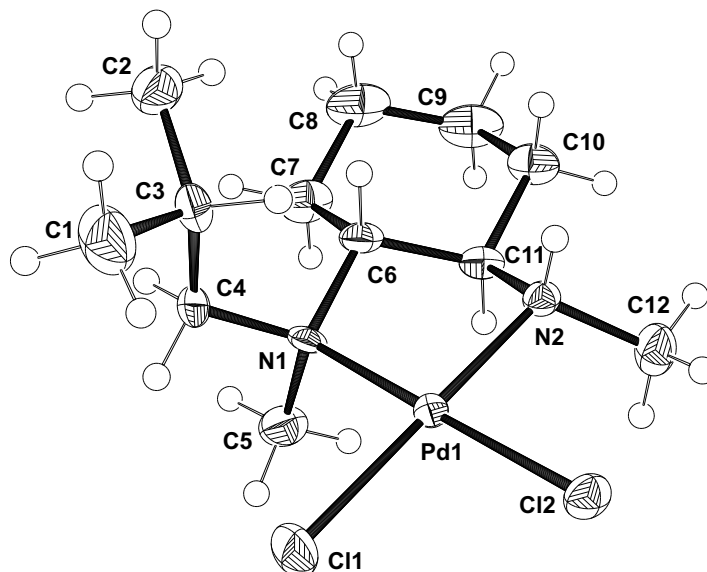


Abb. 8.65: Molekülstruktur von (S,S) - $[PdCl_2\{(R,R)\text{-iBDMCDA}\}]$ (275) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

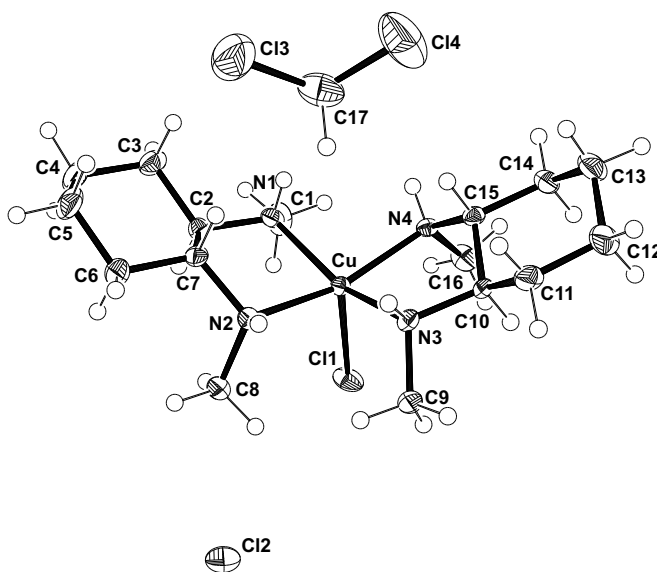


Abb. 8.66: Molekülstruktur von (R,S,R',S') - $[CuCl\{(R,R)\text{-DMCDA}\}_2]Cl$ (276) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

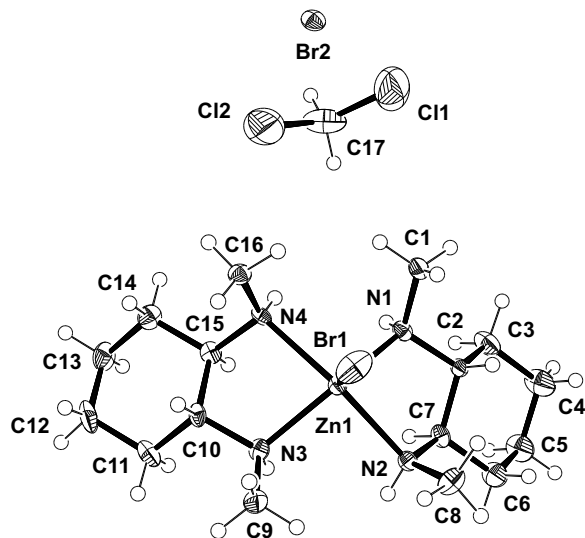


Abb. 8.67: Molekülstruktur von (R,S,R',S') -[ZnBr{(R,R)-DMCDA}₂]Br (**204**) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

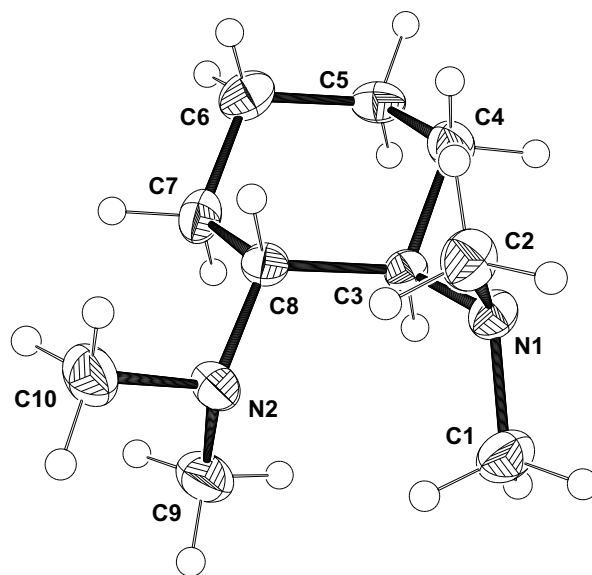


Abb. 8.68: Molekülstruktur von (R,R) -TMCDA (**6**) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

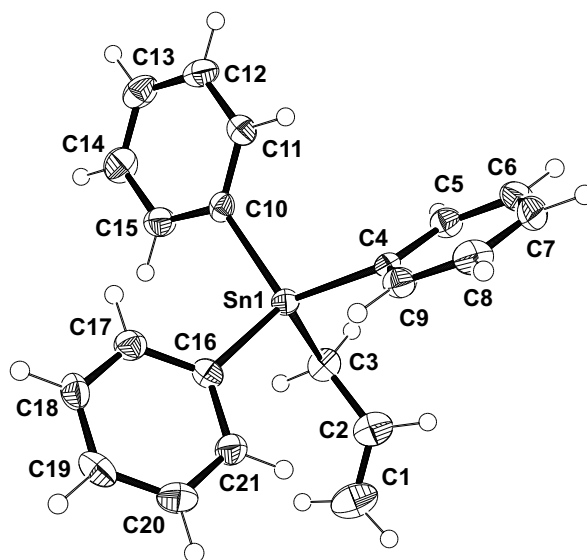


Abb. 8.69: Molekülstruktur von Allyltriphenylstannan (234) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

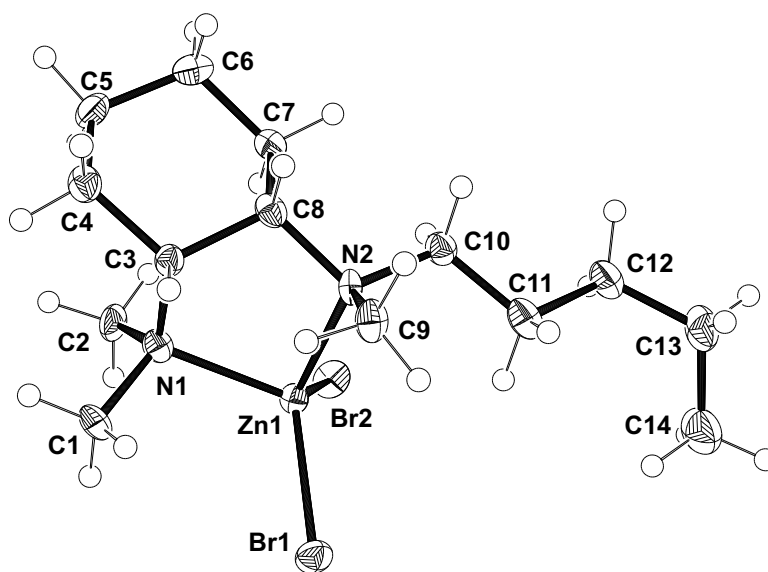


Abb. 8.70: Molekülstruktur von [ZnBr₂(*cis*-PTMCDA)] (279) im Kristall (Ortep-Darstellung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).