

6 Anhang

A. Röntgenstrukturanalyse von *trans*-Di-[μ -(2-dimethylphosphanyl-1-bis(4-methoxyphenyl)ethanolato-[O,P])methylnickel(II)] **12**

Tabelle 6.1 Datensammlung

Diffektorometer:	Siemens PW100
	Mo-K α -Strahlung
	Graphitmonochromator
Wellenlänge Mo-K α :	71.07 pm
Temperatur:	293(2) K
Gitterkonstanten:	25 ausgesuchte Reflexe
Zahl der Reflexe:	6759 (-18 < h < 18) (-12 < k < 12) (-15 < l < 15)
Zahl der unabhängigen Reflexe:	1746
Daten/Parameterzahl/Restraints:	1746/217/6
Goodness of Fit:	1.015
R-Werte für $I > 2s(I)$:	0.0539
wR ₁	0.1023
R-Werte für alle Daten	0.1221
wR _{All}	0.1347

Tabelle 6.2 Kristallographische Daten

Kristallklasse:	monoklin
Raumgruppe:	C2 ₁ /c (Nr. 15)
Gitterkonstanten:	a = 193.600(4) pm b = 125.0100(2) pm c = 163.1000(3) pm β = 105.4030(1) °
VEZ:	3761.521(10) pm ³
Z:	4
röntgenographische Dichte:	1.361 g/cm ³

Tabelle 6.3 Atomkoordinaten

Atom	Wyck.	x	y	z
C1	8f	0.0560(5)	0.1760(9)	0.0815(6)
H16A	8f	0.00790	0.17810	0.04430
H16B	8f	0.07800	0.10830	0.07570
H16C	8f	0.08440	0.23260	0.06690
C2	8f	0.1800(5)	0.2218(8)	0.3503(5)
H2	8f	0.22460	0.18940	0.38350
H17B	8f	0.18520	0.29890	0.35530
C3	8f	0.2214(5)	0.2644(9)	0.1937(7)
H18A	8f	0.27110	0.24700	0.22050
H18B	8f	0.21290	0.33840	0.20360
H18C	8f	0.21140	0.25180	0.13360
C4	8f	0.2033(5)	0.0511(8)	0.2326(6)
H19A	8f	0.25510	0.05640	0.25280
H19B	8f	0.19040	0.02600	0.17490
H19C	8f	0.18570	0.00170	0.26760
C5	8f	0.1139(5)	0.2446(9)	0.4660(7)
C6	8f	0.1173(4)	0.1932(9)	0.5433(7)
H1	8f	0.12380	0.11940	0.54740
C7	8f	0.1110(5)	0.2511(11)	0.6145(7)
H5	8f	0.11400	0.21590	0.66550
C8	8f	0.0986(6)	0.4117(9)	0.5346(8)
H4	8f	0.09280	0.48550	0.53110
C9	8f	0.1003(5)	0.3611(12)	0.6092(8)
C10	8f	0.1054(5)	0.3547(10)	0.4635(8)
H3	8f	0.10410	0.39130	0.41360
C11	8f	0.0745(7)	0.5192(11)	0.6787(7)
H14A	8f	0.07190	0.54340	0.73360
H14B	8f	0.02820	0.52850	0.63840
H14C	8f	0.11040	0.55990	0.66090
C12	8f	0.1876(6)	0.0171(10)	0.4457(6)
H11	8f	0.22570	0.06140	0.47320
C13	8f	0.1957(6)	-0.0908(12)	0.4542(6)
H12	8f	0.23890	-0.11920	0.48740
C14	8f	0.1400(8)	-0.1585(10)	0.4138(8)
C15	8f	0.0755(6)	-0.1169(11)	0.3657(7)
H13	8f	0.03760	-0.16170	0.33860
C16	8f	0.0682(6)	-0.0053(10)	0.3586(6)
H9	8f	0.02440	0.02300	0.32690
C17	8f	0.1230(6)	0.0638(9)	0.3962(6)
C18	8f	0.1163(5)	0.1852(9)	0.3847(6)
C19	8f	0.0991(7)	-0.3385(9)	0.3887(8)
H15A	8f	0.11560	-0.41050	0.40240
H15B	8f	0.08630	-0.32910	0.32810
H15C	8f	0.05750	-0.32510	0.40950
P1	8f	0.16305(14)	0.1820(2)	0.23737(17)
O1	8f	0.0526(3)	0.2117(5)	0.3186(4)
O2	8f	0.1550(4)	-0.2662(7)	0.4270(5)
O3	8f	0.0938(4)	0.4091(7)	0.6833(5)
Ni1	8f	0.05162(7)	0.19397(11)	0.19747(8)

Tabelle 6.4 Anisotrope Auslenkungsparameter (\AA^2)

Atom	<i>U</i>₁₁	<i>U</i>₂₂	<i>U</i>₃₃	<i>U</i>₁₂	<i>U</i>₁₃	<i>U</i>₂₃
C1	0.057(8)	0.117(10)	0.052(7)	0.003(7)	0.013(6)	-0.001(8)
C2	0.036(7)	0.064(8)	0.052(7)	0.004(6)	0.009(5)	-0.006(6)
C3	0.075(9)	0.081(9)	0.090(9)	-0.020(7)	0.041(8)	-0.002(7)
C4	0.065(8)	0.076(9)	0.087(9)	0.024(7)	0.017(7)	-0.001(7)
C5	0.052(8)	0.049(9)	0.030(8)	0.001(6)	-0.002(6)	0.000(6)
C6	0.058(8)	0.052(7)	0.051(8)	0.008(6)	-0.001(6)	-0.012(8)
C7	0.056(8)	0.057(9)	0.053(9)	0.005(6)	0.001(6)	0.017(7)
C8	0.088(10)	0.052(8)	0.057(9)	0.003(7)	0.016(7)	-0.009(8)
C9	0.044(8)	0.085(12)	0.036(9)	-0.006(7)	-0.006(6)	-0.003(8)
C10	0.069(9)	0.053(9)	0.063(9)	-0.007(7)	0.011(7)	0.009(7)
C11	0.123(13)	0.096(12)	0.092(11)	0.002(10)	0.040(9)	-0.027(9)
C12	0.049(9)	0.067(10)	0.054(8)	-0.002(7)	-0.001(6)	0.013(7)
C13	0.061(9)	0.077(10)	0.054(8)	0.020(9)	0.012(7)	0.011(8)
C14	0.086(11)	0.043(9)	0.065(9)	0.002(8)	0.035(8)	-0.005(7)
C15	0.058(9)	0.084(11)	0.050(8)	0.001(8)	-0.002(7)	0.009(7)
C16	0.057(9)	0.060(9)	0.061(8)	0.004(8)	0.019(7)	0.006(7)
C17	0.042(8)	0.058(9)	0.050(7)	-0.010(7)	0.012(6)	-0.001(7)
C18	0.032(7)	0.059(8)	0.042(7)	-0.004(6)	-0.009(6)	0.006(6)
C19	0.123(13)	0.06(1)	0.095(11)	-0.002(9)	0.018(9)	0.007(8)
P1	0.044(2)	0.064(2)	0.0555(19)	-0.0030(17)	0.0138(15)	0.0023(17)
O1	0.034(4)	0.061(5)	0.041(4)	-0.004(4)	0.015(3)	-0.004(4)
O2	0.088(7)	0.056(6)	0.088(6)	0.007(5)	0.024(5)	0.009(5)
O3	0.105(7)	0.083(7)	0.057(6)	0.004(5)	0.016(5)	-0.016(5)
Ni1	0.0441(9)	0.0597(9)	0.0443(8)	-0.0002(8)	0.0103(6)	-0.0018(9)

Tabelle 6.5 Geometrische Parameter

Bindungsabstände (\AA)

C1—Ni1	1.928(9)	C12—C13	1.361(13)
C2—C18	1.540(12)	C12—C17	1.410(13)
C2—P1	1.852(9)	C13—C14	1.383(14)
C3—P1	1.80(1)	C14—C15	1.377(14)
C4—P1	1.820(9)	C14—O2	1.382(12)
C5—C10	1.385(12)	C15—C16	1.403(14)
C5—C6	1.402(13)	C16—C17	1.371(13)
C5—C18	1.531(13)	C17—C18	1.531(13)
C6—C7	1.401(13)	C18—O1	1.436(10)
C7—C9	1.389(13)	C19—O2	1.412(11)
C8—C9	1.363(13)	P1—Ni1	2.063(3)
C8—C10	1.396(13)	O1—Ni1 ⁱ	1.953(6)
C9—O3	1.384(12)	O1—Ni1	1.984(6)
C11—O3	1.422(13)	Ni1—O1 ⁱ	1.953(6)

Tabelle 6.5 Geometrische Parameter (Fortsetzung)

Bindungswinkel (°)			
C18—C2—P1	109.6(6)	O1—C18—C5	108.8(8)
C10—C5—C6	117.3(10)	C17—C18—C5	113.3(8)
C10—C5—C18	119.1(11)	O1—C18—C2	104.8(7)
C6—C5—C18	123.5(10)	C17—C18—C2	107.0(9)
C7—C6—C5	121.0(11)	C5—C18—C2	112.4(8)
C9—C7—C6	120.2(11)	C3—P1—C4	100.6(5)
C9—C8—C10	121.2(11)	C3—P1—C2	106.1(5)
C8—C9—O3	126.2(13)	C4—P1—C2	108.7(5)
C8—C9—C7	118.9(12)	C3—P1—Ni1	122.1(4)
O3—C9—C7	114.8(12)	C4—P1—Ni1	117.8(4)
C5—C10—C8	121.3(11)	C2—P1—Ni1	100.8(3)
C13—C12—C17	121.8(11)	C18—O1—Ni1 ⁱ	135.1(6)
C12—C13—C14	120.3(11)	C18—O1—Ni1	120.2(5)
C15—C14—O2	125.0(13)	Ni1 ⁱ —O1—Ni1	96.6(2)
C15—C14—C13	120.1(11)	C14—O2—C19	117.0(9)
O2—C14—C13	114.9(13)	C9—O3—C11	117.1(10)
C14—C15—C16	118.5(11)	C1—Ni1—O1 ⁱ	101.0(3)
C17—C16—C15	122.8(10)	C1—Ni1—O1	177.1(3)
C16—C17—C12	116.4(10)	O1 ⁱ —Ni1—O1	82.0(3)
C16—C17—C18	122.8(10)	C1—Ni1—P1	89.4(3)
C12—C17—C18	120.8(10)	O1 ⁱ —Ni1—P1	169.5(2)
O1—C18—C17	110.3(8)	O1—Ni1—P1	87.62(18)

Symmetry codes:

(i) -x, y, 0.5-z.

B. Röntgenstrukturanalyse von *cis*-Bis(2-Dimethylphosphanyl-1bis(4-methoxyphenyl)ethanolato-[O,P])nickel(II) 18

Tabelle 6.6 Datensammlung

Diffraktometer:	Siemens PW100
	Mo-K α -Strahlung
	Graphitmonochromator
Wellenlänge Mo-K α :	71.07 pm
Temperatur:	293(2) K
Gitterkonstanten:	25 ausgesuchte Reflexe
Zahl der Reflexe:	8015 (-1 < h < 15) (-16 < k < 1) (-17 < l < 17)
Zahl der unabhängigen Reflexe:	4328
Daten/Parameterzahl:	3196/322
Goodness of Fit:	1.032
R-Werte für I > 2s(I):	0.050
wR ₁	0.1203
R-Werte für alle Daten	0.073
wR _{All}	0.1365

Tabelle 6.7 Kristallographisch Daten

Kristallklasse:	monoklin
Raumgruppe:	P2 ₁ /c (Nr. 14)
Gitterkonstanten:	a = 140.610(16) pm b = 152.004(15) pm c = 162.74(3) pm β = 107.63(1) °
VEZ:	3724.85(10) Å ³
Z:	4
röntgenographische Dichte:	1.265 g/cm ³

Tabelle 6.8 Atomkoordinaten

Atom	Wyck.	x	y	z
C1	4e	-0.1932(3)	1.0420(3)	0.4770(3)
H1A	4e	-0.25950	1.06660	0.45330
H1B	4e	-0.16850	1.02440	0.42990
C2	4e	-0.1950(3)	0.9626(3)	0.5362(3)
C3	4e	0.1890(3)	1.0743(3)	0.7667(3)
H3A	4e	0.22970	1.08040	0.72840
H3B	4e	0.22580	1.09790	0.82270
C4	4e	0.1628(3)	0.9761(3)	0.7749(3)
C5	4e	0.1081(4)	1.2400(3)	0.6950(3)
H5A	4e	0.04940	1.27530	0.67220
H5B	4e	0.14200	1.23370	0.65220
H5C	4e	0.15170	1.26790	0.74520
C6	4e	0.0209(4)	1.1559(4)	0.8115(3)
H6A	4e	-0.00110	1.10220	0.83080
H6B	4e	-0.03460	1.19540	0.79150
H6C	4e	0.07120	1.18260	0.85840
C7	4e	-0.0554(4)	1.1835(3)	0.4776(3)
H7A	4e	-0.01200	1.14610	0.45750
H7B	4e	-0.01780	1.23190	0.50930
H7C	4e	-0.10760	1.20560	0.42910
C8	4e	-0.1862(4)	1.2016(3)	0.5799(3)
H8A	4e	-0.21870	1.17390	0.61720
H8B	4e	-0.23560	1.22450	0.53000
H8C	4e	-0.14490	1.24880	0.61020
C9	4e	-0.2589(2)	0.9833(2)	0.59648(17)
C10	4e	-0.2189(2)	0.9636(2)	0.68356(18)
H10	4e	-0.15600	0.93800	0.70380
C11	4e	-0.2728(3)	0.9821(3)	0.74035(16)
H11	4e	-0.24600	0.96890	0.79860
C12	4e	-0.3667(3)	1.0204(3)	0.7101(3)
H12	4e	-0.40270	1.03290	0.74810
C13	4e	-0.4068(2)	1.0402(3)	0.6230(3)
H13	4e	-0.46960	1.06580	0.60270
C14	4e	-0.3529(2)	1.0216(2)	0.56618(19)
H14	4e	-0.37970	1.03480	0.50790
C15	4e	-0.2406(2)	0.88005(17)	0.48360(18)
C16	4e	-0.2051(2)	0.7982(2)	0.51733(17)
H16	4e	-0.15420	0.79440	0.56930
C17	4e	-0.2459(3)	0.72201(16)	0.4734(2)
H17	4e	-0.22220	0.66720	0.49600
C18	4e	-0.3221(3)	0.7277(2)	0.3957(2)
H18	4e	-0.34930	0.67680	0.36630
C19	4e	-0.3575(2)	0.8096(2)	0.36200(17)
H19	4e	-0.40840	0.81340	0.31000
C20	4e	-0.3167(2)	0.88575(19)	0.40594(19)
H20	4e	-0.34040	0.94050	0.38340
C21	4e	0.2434(2)	0.91426(18)	0.76123(19)
C22	4e	0.3406(2)	0.94092(18)	0.7703(2)
H22	4e	0.35970	0.99870	0.78540
C23	4e	0.40918(19)	0.8812(3)	0.7568(2)
H23	4e	0.47420	0.89900	0.76280
C24	4e	0.3806(3)	0.7948(2)	0.7342(2)
H24	4e	0.42650	0.75480	0.72510
C25	4e	0.2834(3)	0.76815(17)	0.7251(2)
H25	4e	0.26420	0.71030	0.71000
C26	4e	0.2148(2)	0.8279(2)	0.7386(2)

Tabelle 6.8 Atomkoordinaten (Fortsetzung)

Atom	Wyck.	x	y	z
H26	4e	0.14970	0.81000	0.73260
C27	4e	0.1560(2)	0.9590(2)	0.86666(14)
C28	4e	0.06539(19)	0.9340(2)	0.8774(2)
H28	4e	0.00920	0.92820	0.82960
C29	4e	0.0588(2)	0.9176(2)	0.9595(3)
H29	4e	-0.00180	0.90090	0.96670
C30	4e	0.1428(3)	0.9263(2)	1.03094(18)
H30	4e	0.13840	0.91540	1.08590
C31	4e	0.2334(3)	0.9513(2)	1.02023(15)
H31	4e	0.28960	0.95720	1.06800
C32	4e	0.23997(19)	0.9677(2)	0.93809(19)
H32	4e	0.30060	0.98440	0.93090
Ni1	4e	-0.01510(4)	1.03704(3)	0.64041(3)
O1	4e	-0.0964(2)	0.94419(17)	0.58336(18)
O2	4e	0.0714(2)	0.95615(19)	0.71204(19)
P1	4e	-0.10941(9)	1.12139(7)	0.54660(7)
P2	4e	0.07262(9)	1.13226(8)	0.72383(8)
C50	4e	0.5257(6)	0.6920(7)	0.5795(5)
C51	4e	0.5306(7)	0.6424(5)	0.6334(5)
H51A	4e	0.57960	0.66180	0.68520
H51B	4e	0.54950	0.58600	0.61690
H51C	4e	0.46680	0.63780	0.64320
O52	4e	0.5675(9)	0.7829(7)	0.6001(7)
C53	4e	0.4719(8)	0.6725(11)	0.4935(7)
H53A	4e	0.48320	0.71760	0.45630
H53B	4e	0.40190	0.66950	0.48770
H53C	4e	0.49360	0.61690	0.47770

Tabelle 6.9 Anisotrope Auslenkungsparameter (in Å²)

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
C1	0.041(3)	0.050(3)	0.038(2)	0.005(2)	0.006(2)	-0.001(2)
C2	0.047(3)	0.036(2)	0.038(2)	-0.002(2)	0.012(2)	-0.001(2)
C3	0.053(3)	0.045(3)	0.041(3)	-0.005(2)	0.006(2)	0.003(2)
C4	0.042(3)	0.035(3)	0.045(3)	-0.002(2)	0.007(2)	0.003(2)
C5	0.078(4)	0.035(3)	0.076(4)	-0.009(3)	0.007(3)	0.003(3)
C6	0.085(4)	0.058(3)	0.057(3)	0.008(3)	0.019(3)	-0.011(3)
C7	0.068(3)	0.039(3)	0.055(3)	-0.001(2)	0.025(3)	0.004(2)
C8	0.063(3)	0.058(3)	0.063(3)	0.015(3)	0.023(3)	-0.002(3)
C9	0.048(3)	0.041(3)	0.043(3)	-0.008(2)	0.016(2)	-0.007(2)
C10	0.079(4)	0.065(3)	0.046(3)	-0.008(3)	0.027(3)	-0.003(3)
C11	0.121(6)	0.098(5)	0.062(4)	-0.031(5)	0.046(4)	-0.016(4)
C12	0.117(6)	0.098(5)	0.106(5)	-0.038(5)	0.081(5)	-0.040(4)
C13	0.068(4)	0.084(4)	0.133(6)	-0.003(3)	0.056(4)	-0.024(4)
C14	0.053(3)	0.065(4)	0.073(4)	0.000(3)	0.026(3)	-0.002(3)
C15	0.041(3)	0.049(3)	0.042(3)	-0.004(2)	0.015(2)	-0.005(2)
C16	0.063(3)	0.053(3)	0.057(3)	-0.009(3)	0.010(3)	-0.003(3)
C17	0.083(4)	0.055(4)	0.083(4)	-0.013(3)	0.023(3)	-0.014(3)
C18	0.071(4)	0.081(5)	0.084(4)	-0.030(4)	0.025(3)	-0.043(4)
C19	0.057(3)	0.084(4)	0.062(3)	-0.017(3)	0.005(3)	-0.019(3)
C20	0.051(3)	0.060(3)	0.052(3)	-0.005(3)	0.011(3)	-0.008(3)
C21	0.050(3)	0.046(3)	0.030(2)	0.004(2)	0.008(2)	0.006(2)
C22	0.051(3)	0.058(3)	0.064(3)	0.009(3)	0.009(3)	0.004(3)
C23	0.056(4)	0.091(5)	0.089(4)	0.011(4)	0.025(3)	0.011(4)
C24	0.083(5)	0.096(5)	0.073(4)	0.036(4)	0.029(3)	0.007(4)
C25	0.085(4)	0.061(4)	0.068(4)	0.013(3)	0.022(3)	-0.002(3)
C26	0.063(3)	0.047(3)	0.055(3)	0.003(3)	0.023(3)	0.002(2)
C27	0.054(3)	0.034(2)	0.047(3)	0.004(2)	0.015(2)	-0.002(2)
C28	0.066(3)	0.040(3)	0.069(3)	0.003(3)	0.027(3)	0.003(2)
C29	0.088(4)	0.042(3)	0.094(4)	-0.002(3)	0.055(4)	0.001(3)
C30	0.122(6)	0.064(4)	0.065(4)	0.009(4)	0.049(4)	0.001(3)
C31	0.095(5)	0.086(4)	0.043(3)	0.011(4)	0.013(3)	-0.004(3)
C32	0.064(3)	0.065(3)	0.046(3)	-0.001(3)	0.017(3)	-0.006(3)
Ni1	0.0421(4)	0.0330(3)	0.0367(3)	0.0005(3)	0.0088(2)	-0.0016(2)
O1	0.0372(17)	0.0339(17)	0.0464(17)	0.0033(14)	0.0030(14)	-0.0032(13)
O2	0.0455(19)	0.0365(18)	0.0539(19)	-0.0020(15)	-0.0035(16)	0.0007(15)
P1	0.0467(7)	0.0352(7)	0.0400(7)	0.0042(5)	0.0132(6)	0.0000(5)
P2	0.0530(8)	0.0326(7)	0.0446(7)	-0.0016(6)	0.0083(6)	-0.0015(5)
C50	0.100(6)	0.123(7)	0.090(5)	-0.004(5)	0.034(5)	-0.007(5)
C51	0.201(10)	0.083(5)	0.090(6)	0.030(6)	0.013(6)	0.025(5)
O52	0.358(14)	0.223(10)	0.359(14)	-0.082(10)	0.232(12)	-0.063(10)
C53	0.176(11)	0.54(3)	0.122(8)	-0.186(15)	0.043(8)	-0.050(13)

Tabelle 6.10 Geometrische Parameter (\AA , °)

C1—C2	1.548(6)	C17—C18	1.390
C1—P1	1.823(4)	C18—C19	1.390
C2—O1	1.396(5)	C19—C20	1.390
C2—C15	1.545(5)	C21—C22	1.390
C2—C9	1.550(5)	C21—C26	1.390
C3—C4	1.553(6)	C22—C23	1.390
C3—P2	1.802(5)	C23—C24	1.390
C4—O2	1.412(5)	C24—C25	1.390
C4—C21	1.540(5)	C25—C26	1.390
C4—C27	1.547(5)	C27—C28	1.390
C5—P2	1.814(5)	C27—C32	1.390
C6—P2	1.823(5)	C28—C29	1.390
C7—P1	1.802(4)	C29—C30	1.390
C8—P1	1.817(5)	C30—C31	1.390
C9—C10	1.390	C31—C32	1.390
C9—C14	1.390	Ni1—O2	1.868(3)
C10—C11	1.390	Ni1—O1	1.876(3)
C11—C12	1.390	Ni1—P2	2.109(1)
C12—C13	1.390	Ni1—P1	2.123(1)
C13—C14	1.390	C50—C51	1.142(9)
C15—C16	1.390	C50—C53	1.407(11)
C15—C20	1.390	C50—O52	1.499(11)
C16—C17	1.390		
C2—C1—P1	105.0(3)	C25—C24—C23	120.00
O1—C2—C15	108.5(3)	C26—C25—C24	120.00
O1—C2—C1	107.3(3)	C25—C26—C21	120.00
C15—C2—C1	111.8(3)	C28—C27—C32	120.00
O1—C2—C9	111.3(3)	C28—C27—C4	119.6(3)
C15—C2—C9	107.1(3)	C32—C27—C4	120.4(3)
C1—C2—C9	110.9(3)	C27—C28—C29	120.00
C4—C3—P2	106.9(3)	C30—C29—C28	120.00
O2—C4—C21	108.2(3)	C29—C30—C31	120.00
O2—C4—C27	110.8(3)	C30—C31—C32	120.00
C21—C4—C27	107.5(3)	C31—C32—C27	120.00
O2—C4—C3	109.4(3)	O2—Ni1—O1	89.86(12)
C21—C4—C3	111.7(3)	O2—Ni1—P2	84.65(9)
C27—C4—C3	109.2(3)	O1—Ni1—P2	170.19(10)
C10—C9—C14	120.00	O2—Ni1—P1	173.16(10)
C10—C9—C2	117.9(3)	O1—Ni1—P1	86.80(9)
C14—C9—C2	122.1(3)	P2—Ni1—P1	99.48(5)
C11—C10—C9	120.00	C2—O1—Ni1	118.5(2)
C10—C11—C12	120.00	C4—O2—Ni1	126.0(2)
C11—C12—C13	120.00	C7—P1—C8	103.6(2)
C14—C13—C12	120.00	C7—P1—C1	106.0(2)
C13—C14—C9	120.00	C8—P1—C1	107.4(2)
C16—C15—C20	120.00	C7—P1—Ni1	118.37(17)
C16—C15—C2	118.0(2)	C8—P1—Ni1	119.28(17)
C20—C15—C2	122.0(2)	C1—P1—Ni1	101.08(14)
C17—C16—C15	120.00	C3—P2—C5	104.6(2)
C18—C17—C16	120.00	C3—P2—C6	108.9(2)
C17—C18—C19	120.00	C5—P2—C6	103.3(3)
C20—C19—C18	120.00	C3—P2—Ni1	101.50(15)
C19—C20—C15	120.00	C5—P2—Ni1	127.30(18)
C22—C21—C26	120.00	C6—P2—Ni1	110.20(19)
C22—C21—C4	123.3(3)	C51—C50—C53	120.9(11)
C26—C21—C4	116.7(3)	C51—C50—O52	120.5(9)
C21—C22—C23	120.00	C53—C50—O52	118.3(11)
C24—C23—C22	120.00		

C. Röntgenstrukturanalyse von *cis*-Bis(4,6-di-*tert*-butyl-2-(isopropylphenylphosphanyl)phenolato-[O,P])nickel(II) 24

Tabelle 6.11 Datensammlung

Diffaktometer:	Siemens PW100
	Mo-K α -Strahlung
	Graphitmonochromator
Wellenlänge Mo-K α :	71.07 pm
Temperatur:	293(2) K
Gitterkonstanten:	25 ausgesuchte Reflexe
Zahl der Reflexe:	10204 (-17 < h < 5) (-20 < k < 18) (-0 < l < 21)
Zahl der unabhängigen Reflexe:	10030
Daten/Parameterzahl:	10028/898
goodness-of-fit:	1.048
R-Wert für $ I > 2s(I)$:	0.1033
R-Wert für alle Daten	0.2439

Tabelle 6.12 Kristallographische Daten

Kristallklasse:	triklin
Raumgruppe:	P-1 (Nr. 2)
Gitterkonstanten:	$a = 157.90(4)$ pm $b = 186.86(6)$ pm $c = 203.85(5)$ pm $\alpha = 109.68(2)$ ° $\beta = 107.63(1)$ ° $\gamma = 114.15(2)$ °
VEZ:	4994(2) Å ³
Z:	4
röntgenographische Dichte:	1.024 g/cm ³

Tabelle 6.13 Atomkoordinaten

Atom	Wyck.	Occ.	x	y	z	U
Ni1	$2i$		0.7746(2)	0.15696(12)	0.52848(10)	
P1	$2i$		0.7040(3)	0.0587(2)	0.4206(2)	
P2	$2i$		0.7453(3)	0.2594(3)	0.5253(2)	
O1	$2i$		0.8161(7)	0.0829(6)	0.5455(5)	
O2	$2i$		0.8386(8)	0.2299(6)	0.6265(5)	
C1	$2i$		0.7329(11)	-0.0221(9)	0.4281(8)	
C2	$2i$		0.6971(12)	-0.1058(10)	0.3752(8)	
H2	$2i$		0.6561(12)	-0.1229(10)	0.3313(8)	0.0690
C3	$2i$		0.7223(14)	-0.1607(10)	0.3883(10)	
C4	$2i$		0.7838(13)	-0.1334(11)	0.4567(10)	
H4	$2i$		0.8009(13)	-0.1720(11)	0.4658(10)	0.0620
C5	$2i$		0.8191(12)	-0.0512(11)	0.5103(8)	
C6	$2i$		0.7907(12)	0.0058(10)	0.4964(9)	
C7	$2i$		0.8863(14)	-0.0219(12)	0.5838(9)	
C8	$2i$		0.9801(13)	0.0605(12)	0.6019(9)	
H8A	$2i$		1.0139(13)	0.0507(12)	0.5656(9)	0.1190
H8B	$2i$		1.0194(13)	0.0763(12)	0.6480(9)	0.1190
H8C	$2i$		0.9655(13)	0.1061(12)	0.6035(9)	0.1190
C9	$2i$		0.8331(14)	-0.0053(11)	0.6422(8)	
H9A	$2i$		0.7744(14)	-0.0566(11)	0.6313(8)	0.1200
H9B	$2i$		0.8187(14)	0.0403(11)	0.6436(8)	0.1200
H9C	$2i$		0.8728(14)	0.0106(11)	0.6882(8)	0.1200
C10	$2i$		0.9137(17)	-0.0915(14)	0.5858(10)	
H10A	$2i$		0.8564(17)	-0.1440(14)	0.5746(10)	0.1680
H10B	$2i$		0.9521(17)	-0.0730(14)	0.633(1)	0.1680
H10C	$2i$		0.9496(17)	-0.1009(14)	0.5509(10)	0.1680
C11	$2i$		0.6834(20)	-0.2572(12)	0.3330(11)	
C121	$2i$	0.5	0.767(3)	-0.2803(24)	0.3285(21)	0.077(12)
H12A	$2i$	0.5	0.7926(30)	-0.2768(24)	0.3746(21)	0.1150
H12B	$2i$	0.5	0.8165(30)	-0.2408(24)	0.3155(21)	0.1150
H12C	$2i$	0.5	0.7437(30)	-0.3377(24)	0.2928(21)	0.1150
C131	$2i$	0.5	0.6608(49)	-0.2663(36)	0.2669(32)	0.153(24)
H13A	$2i$	0.5	0.7127(49)	-0.2234(36)	0.2585(32)	0.2290
H13B	$2i$	0.5	0.6041(49)	-0.2598(36)	0.2589(32)	0.2290
H13C	$2i$	0.5	0.6489(49)	-0.3224(36)	0.2345(32)	0.2290
C141	$2i$	0.5	0.6142(27)	-0.3169(22)	0.3613(19)	0.057(11)
H14A	$2i$	0.5	0.6426(27)	-0.3009(22)	0.4108(19)	0.0850
H14B	$2i$	0.5	0.6006(27)	-0.3750(22)	0.3333(19)	0.0850
H14C	$2i$	0.5	0.5556(27)	-0.3126(22)	0.3577(19)	0.0850
C122	$2i$	0.5	0.7745(28)	-0.2567(21)	0.2977(19)	0.059(10)
H12D	$2i$	0.5	0.7898(28)	-0.2184(21)	0.2738(19)	0.0880
H12E	$2i$	0.5	0.7569(28)	-0.3137(21)	0.2635(19)	0.0880
H12F	$2i$	0.5	0.8294(28)	-0.2378(21)	0.3353(19)	0.0880
C132	$2i$	0.5	0.6011(24)	-0.2819(19)	0.2651(18)	0.042(9)
H13D	$2i$	0.5	0.6227(24)	-0.2380(19)	0.2469(18)	0.0630
H13E	$2i$	0.5	0.5436(24)	-0.2866(19)	0.2799(18)	0.0630
H13F	$2i$	0.5	0.5881(24)	-0.3358(19)	0.2278(18)	0.0630
C142	$2i$	0.5	0.6639(35)	-0.3177(28)	0.3690(23)	0.098(17)
H14D	$2i$	0.5	0.6405(35)	-0.3751(28)	0.3333(23)	0.1470
H14E	$2i$	0.5	0.6165(35)	-0.3152(28)	0.3951(23)	0.1470
H14F	$2i$	0.5	0.7221(35)	-0.3018(28)	0.4019(23)	0.1470
C15	$2i$		0.7508(11)	0.0877(10)	0.3491(8)	
H15	$2i$		0.7361(11)	0.1333(10)	0.3475(8)	0.0570
C16	$2i$		0.8604(13)	0.1252(11)	0.3681(9)	
H16A	$2i$		0.8874(13)	0.1709(11)	0.4154(9)	0.1190
H16B	$2i$		0.8852(13)	0.1471(11)	0.3336(9)	0.1190
H16C	$2i$		0.8773(13)	0.0810(11)	0.3671(9)	0.1190
C17	$2i$		0.7063(13)	0.0133(11)	0.2721(8)	
H17A	$2i$		0.6377(13)	-0.0100(11)	0.2605(8)	0.1200
H17B	$2i$		0.7231(13)	-0.0310(11)	0.2709(8)	0.1200
H17C	$2i$		0.7308(13)	0.0351(11)	0.2375(8)	0.1200

Tabelle 6.13 Atomkoordinaten (Fortsetzung)

C18	<i>2i</i>	0.5739(11)	0.0105(9)	0.3911(8)	
C19	<i>2i</i>	0.5190(12)	-0.0519(10)	0.4138(9)	
H19	<i>2i</i>	0.5489(12)	-0.0705(10)	0.4408(9)	0.0930
C20	<i>2i</i>	0.4198(13)	-0.0865(12)	0.3964(12)	
H20	<i>2i</i>	0.3838(13)	-0.1285(12)	0.4117(12)	0.1200
C21	<i>2i</i>	0.3733(12)	-0.0602(13)	0.3567(9)	
H21	<i>2i</i>	0.3067(12)	-0.0835(13)	0.3452(9)	0.0840
C22	<i>2i</i>	0.4289(14)	0.0019(12)	0.3350(9)	
H22	<i>2i</i>	0.3993(14)	0.0207(12)	0.3080(9)	0.0800
C23	<i>2i</i>	0.5288(13)	0.0372(11)	0.3525(9)	
H23	<i>2i</i>	0.5648(13)	0.0795(11)	0.3376(9)	0.0710
C24	<i>2i</i>	0.7688(12)	0.3208(10)	0.6206(8)	
C25	<i>2i</i>	0.7412(11)	0.3837(9)	0.6543(9)	
H25	<i>2i</i>	0.7005(11)	0.3942(9)	0.6277(9)	0.0610
C26	<i>2i</i>	0.7761(13)	0.4299(10)	0.7286(9)	
C27	<i>2i</i>	0.8359(13)	0.4106(10)	0.7647(8)	
H27	<i>2i</i>	0.8604(13)	0.4432(10)	0.8142(8)	0.0580
C28	<i>2i</i>	0.8628(12)	0.3479(9)	0.7349(8)	
C29	<i>2i</i>	0.8232(13)	0.2963(10)	0.6584(8)	
C30	<i>2i</i>	0.9339(13)	0.3336(10)	0.7771(8)	
C31	<i>2i</i>	0.9758(13)	0.4003(11)	0.8565(8)	
H31A	<i>2i</i>	1.0063(13)	0.4571(11)	0.8578(8)	0.1150
H31B	<i>2i</i>	1.0220(13)	0.3905(11)	0.8807(8)	0.1150
H31C	<i>2i</i>	0.9249(13)	0.3947(11)	0.8803(8)	0.1150
C32	<i>2i</i>	0.8859(15)	0.2438(11)	0.7755(9)	
H32A	<i>2i</i>	0.9313(15)	0.2354(11)	0.8022(9)	0.1310
H32B	<i>2i</i>	0.8633(15)	0.2021(11)	0.7264(9)	0.1310
H32C	<i>2i</i>	0.8326(15)	0.2370(11)	0.7967(9)	0.1310
C33	<i>2i</i>	1.0213(13)	0.3446(11)	0.7436(9)	
H33A	<i>2i</i>	1.0518(13)	0.4013(11)	0.7446(9)	0.1160
H33B	<i>2i</i>	0.9995(13)	0.3029(11)	0.6947(9)	0.1160
H33C	<i>2i</i>	1.0664(13)	0.3364(11)	0.7710(9)	0.1160
C34	<i>2i</i>	0.7413(15)	0.4991(11)	0.7657(10)	
C351	<i>2i</i>	0.43	0.8011(54)	0.5516(47)	0.8388(34) 0.126(25)
H35A	<i>2i</i>	0.43	0.7943(54)	0.5159(47)	0.8647(34) 0.1880
H35B	<i>2i</i>	0.43	0.7816(54)	0.5940(47)	0.8624(34) 0.1880
H35C	<i>2i</i>	0.43	0.8670(54)	0.5796(47)	0.8379(34) 0.1880
C361	<i>2i</i>	0.43	0.7526(60)	0.5511(40)	0.7303(30) 0.104(22)
H36A	<i>2i</i>	0.43	0.8126(60)	0.5653(40)	0.7173(30) 0.1560
H36B	<i>2i</i>	0.43	0.7525(60)	0.6028(40)	0.7612(30) 0.1560
H36C	<i>2i</i>	0.43	0.7009(60)	0.5221(40)	0.6876(30) 0.1560
C352	<i>2i</i>	0.57	0.8350(24)	0.5845(21)	0.8175(19) 0.063(12)
H35D	<i>2i</i>	0.57	0.8789(24)	0.6030(21)	0.7897(19) 0.0940
H35E	<i>2i</i>	0.57	0.8651(24)	0.5735(21)	0.8532(19) 0.0940
H35F	<i>2i</i>	0.57	0.8177(24)	0.6285(21)	0.8408(19) 0.0940
C362	<i>2i</i>	0.57	0.6823(38)	0.5167(25)	0.7130(19) 0.075(14)
H36D	<i>2i</i>	0.57	0.7230(38)	0.5437(25)	0.6870(19) 0.1130
H36E	<i>2i</i>	0.57	0.6584(38)	0.5539(25)	0.7402(19) 0.1130
H36F	<i>2i</i>	0.57	0.6294(38)	0.4634(25)	0.6797(19) 0.1130
C37	<i>2i</i>		0.6658(19)	0.4602(15)	0.7965(15)
H37A	<i>2i</i>		0.6430(19)	0.5002(15)	0.8195(15) 0.2460
H37B	<i>2i</i>		0.6902(19)	0.4448(15)	0.8315(15) 0.2460
H37C	<i>2i</i>		0.6140(19)	0.4096(15)	0.7592(15) 0.2460
C38	<i>2i</i>		0.8366(14)	0.3319(9)	0.4952(8)
H38	<i>2i</i>		0.8267(14)	0.3026(9)	0.4431(8) 0.0670
C39	<i>2i</i>		0.8346(13)	0.4175(9)	0.5108(9)
H39A	<i>2i</i>		0.7727(13)	0.4065(9)	0.4871(9) 0.1090
H39B	<i>2i</i>		0.8831(13)	0.4516(9)	0.4931(9) 0.1090
H39C	<i>2i</i>		0.8468(13)	0.4480(9)	0.5618(9) 0.1090
C40	<i>2i</i>		0.9377(14)	0.3527(11)	0.5345(9)
H40A	<i>2i</i>		0.9409(14)	0.3001(11)	0.5255(9) 0.1200
H40B	<i>2i</i>		0.9490(14)	0.3833(11)	0.5854(9) 0.1200

Tabelle 6.13 Atomkoordinaten (Fortsetzung)

H40C	<i>2i</i>	0.9856(14)	0.3873(11)	0.5169(9)	0.1200
C41	<i>2i</i>	0.6336(12)	0.2459(9)	0.4820(8)	
C42	<i>2i</i>	0.5577(15)	0.2212(10)	0.5128(9)	
H42	<i>2i</i>	0.5680(15)	0.2149(10)	0.5557(9)	0.0850
C43	<i>2i</i>	0.4670(15)	0.2056(13)	0.4821(12)	
H43	<i>2i</i>	0.4177(15)	0.1893(13)	0.5044(12)	0.1170
C44	<i>2i</i>	0.4500(14)	0.2142(13)	0.4188(14)	
H44	<i>2i</i>	0.3897(14)	0.2049(13)	0.3979(14)	0.1390
C45	<i>2i</i>	0.5253(19)	0.2371(13)	0.387(1)	
H45	<i>2i</i>	0.5151(19)	0.2434(13)	0.3441(10)	0.1140
C46	<i>2i</i>	0.6152(15)	0.2508(11)	0.4169(9)	
H46	<i>2i</i>	0.6634(15)	0.2633(11)	0.3929(9)	0.0830
Ni2	<i>2i</i>	0.2865(2)	-0.23167(12)	-0.04247(10)	
P3	<i>2i</i>	0.1913(3)	-0.1815(3)	-0.0023(2)	
P4	<i>2i</i>	0.3981(3)	-0.1827(3)	0.0527(2)	
O3	<i>2i</i>	0.2031(8)	-0.2721(6)	-0.1337(5)	
O4	<i>2i</i>	0.3498(10)	-0.2904(7)	-0.0902(6)	
C47	<i>2i</i>	0.1294(11)	-0.1870(9)	-0.0830(8)	
C48	<i>2i</i>	0.0710(12)	-0.1516(9)	-0.0903(9)	
H48	<i>2i</i>	0.0669(12)	-0.1127(9)	-0.0494(9)	0.0490
C49	<i>2i</i>	0.0170(12)	-0.1726(10)	-0.1579(9)	
C50	<i>2i</i>	0.0291(12)	-0.2334(9)	-0.2162(8)	
H50	<i>2i</i>	-0.0060(12)	-0.2490(9)	-0.2620(8)	0.0490
C51	<i>2i</i>	0.0855(11)	-0.2710(9)	-0.2126(8)	
C52	<i>2i</i>	0.1443(13)	-0.2412(10)	-0.1409(9)	
C53	<i>2i</i>	0.0868(12)	-0.3389(10)	-0.2791(8)	
C54	<i>2i</i>	0.1905(12)	-0.3039(10)	-0.2894(9)	
H54A	<i>2i</i>	0.1932(12)	-0.3457(10)	-0.3311(9)	0.1060
H54B	<i>2i</i>	0.2347(12)	-0.2929(10)	-0.2476(9)	0.1060
H54C	<i>2i</i>	0.2075(12)	-0.2516(10)	-0.2958(9)	0.1060
C55	<i>2i</i>	0.0177(13)	-0.3596(10)	-0.3482(8)	
H55A	<i>2i</i>	0.0215(13)	-0.4027(10)	-0.3882(8)	0.0990
H55B	<i>2i</i>	0.0351(13)	-0.3086(10)	-0.3568(8)	0.0990
H55C	<i>2i</i>	-0.0468(13)	-0.3806(10)	-0.3429(8)	0.0990
C56	<i>2i</i>	0.0627(12)	-0.4221(9)	-0.2684(8)	
H56A	<i>2i</i>	0.0638(12)	-0.4641(9)	-0.3108(8)	0.0950
H56B	<i>2i</i>	-0.0001(12)	-0.4438(9)	-0.2600(8)	0.0950
H56C	<i>2i</i>	0.1093(12)	-0.4103(9)	-0.2277(8)	0.0950
C57	<i>2i</i>	-0.0492(16)	-0.1349(13)	-0.1709(9)	
C58	<i>2i</i>	-0.1500(15)	-0.2064(13)	-0.2024(13)	
H58A	<i>2i</i>	-0.1534(15)	-0.2490(13)	-0.2466(13)	0.2030
H58B	<i>2i</i>	-0.1924(15)	-0.1840(13)	-0.2118(13)	0.2030
H58C	<i>2i</i>	-0.1689(15)	-0.2321(13)	-0.1689(13)	0.2030
C59	<i>2i</i>	-0.0194(19)	-0.0863(16)	-0.2189(11)	
H59A	<i>2i</i>	0.0453(19)	-0.0410(16)	-0.1974(11)	0.2100
H59B	<i>2i</i>	-0.0616(19)	-0.0622(16)	-0.2240(11)	0.2100
H59C	<i>2i</i>	-0.0233(19)	-0.1251(16)	-0.2655(11)	0.2100
C60	<i>2i</i>	-0.0453(14)	-0.0684(12)	-0.1014(10)	
H60A	<i>2i</i>	0.0190(14)	-0.0221(12)	-0.0807(10)	0.1350
H60B	<i>2i</i>	-0.0645(14)	-0.0943(12)	-0.0681(10)	0.1350
H60C	<i>2i</i>	-0.0881(14)	-0.0465(12)	-0.1113(10)	0.1350
C61	<i>2i</i>	0.0983(13)	-0.2558(10)	0.0248(9)	
H61	<i>2i</i>	0.1292(13)	-0.2509(10)	0.0709(9)	0.0740
C62	<i>2i</i>	0.0638(13)	-0.3488(10)	-0.0303(9)	
H62A	<i>2i</i>	0.1182(13)	-0.3588(10)	-0.0363(9)	0.1170
H62B	<i>2i</i>	0.0299(13)	-0.3572(10)	-0.0758(9)	0.1170
H62C	<i>2i</i>	0.0218(13)	-0.3884(10)	-0.0131(9)	0.1170
C63	<i>2i</i>	0.0161(5)	-0.2359(5)	0.0368(4)	
H63A	<i>2i</i>	0.0406(5)	-0.1777(5)	0.0713(4)	0.1120
H63B	<i>2i</i>	-0.0265(5)	-0.2743(5)	0.0547(4)	0.1120
H63C	<i>2i</i>	-0.0183(5)	-0.2430(5)	-0.0080(4)	0.1120
C64	<i>2i</i>	0.2333(5)	-0.0730(5)	0.0684(4)	

Tabelle 6.13 Atomkoordinaten (Fortsetzung)

C65	<i>2i</i>	0.2760(5)	-0.0041(5)	0.0494(4)		
H65	<i>2i</i>	0.2798(5)	-0.0138(5)	0.0022(4)	0.0720	
C66	<i>2i</i>	0.3130(5)	0.0795(5)	0.1011(4)		
H66	<i>2i</i>	0.3416(5)	0.1256(5)	0.0884(4)	0.1040	
C67	<i>2i</i>	0.3074(5)	0.0941(5)	0.1717(4)		
H67	<i>2i</i>	0.3322(5)	0.1500(5)	0.2063(4)	0.1010	
C68	<i>2i</i>	0.2647(5)	0.0251(5)	0.1907(4)		
H68	<i>2i</i>	0.2610(5)	0.0349(5)	0.2380(4)	0.0930	
C69	<i>2i</i>	0.2277(5)	-0.0584(5)	0.1390(4)		
H69	<i>2i</i>	0.1991(5)	-0.1046(5)	0.1517(4)	0.0690	
C70	<i>2i</i>	0.4747(14)	-0.226(1)	0.0148(9)		
C71	<i>2i</i>	0.5649(15)	-0.2064(10)	0.0477(10)		
H71	<i>2i</i>	0.5907(15)	-0.1697(10)	0.0963(10)	0.0750	
C72	<i>2i</i>	0.6188(14)	-0.2396(11)	0.0107(11)		
C73	<i>2i</i>	0.5758(15)	-0.2945(11)	-0.0612(11)		
H73	<i>2i</i>	0.6103(15)	-0.3194(11)	-0.0860(11)	0.0680	
C74	<i>2i</i>	0.4895(15)	-0.3152(10)	-0.0984(10)		
C75	<i>2i</i>	0.4322(14)	-0.2779(11)	-0.0590(11)		
C76	<i>2i</i>	0.4428(16)	-0.3763(13)	-0.1795(10)		
C77	<i>2i</i>	0.5119(16)	-0.4112(14)	-0.2091(11)		
H77A	<i>2i</i>	0.5217(16)	-0.4428(14)	-0.1832(11)	0.2070	
H77B	<i>2i</i>	0.5724(16)	-0.3640(14)	-0.2029(11)	0.2070	
H77C	<i>2i</i>	0.4845(16)	-0.4483(14)	-0.2594(11)	0.2070	
C78	<i>2i</i>	0.3468(16)	-0.4526(13)	-0.1896(11)		
H78A	<i>2i</i>	0.3571(16)	-0.4837(13)	-0.1634(11)	0.1850	
H78B	<i>2i</i>	0.3200(16)	-0.4900(13)	-0.2399(11)	0.1850	
H78C	<i>2i</i>	0.3031(16)	-0.4319(13)	-0.1719(11)	0.1850	
C79	<i>2i</i>	0.4279(15)	-0.3262(13)	-0.2209(10)		
H79A	<i>2i</i>	0.4884(15)	-0.2787(13)	-0.2142(10)	0.1440	
H79B	<i>2i</i>	0.3845(15)	-0.3050(13)	-0.2033(10)	0.1440	
H79C	<i>2i</i>	0.4014(15)	-0.3633(13)	-0.2713(10)	0.1440	
C80	<i>2i</i>	0.7209(16)	-0.2143(12)	0.0477(11)		
C811	<i>2i</i>	0.7950(24)	-0.1805(22)	0.0081(17)	0.084(12)	
H81A	<i>2i</i>	0.5	0.8574(24)	-0.1658(22)	0.0342(17)	0.1260
H81B	<i>2i</i>	0.5	0.7954(24)	-0.1305(22)	0.0044(17)	0.1260
H81C	<i>2i</i>	0.5	0.7789(24)	-0.2241(22)	-0.0394(17)	0.1260
C821	<i>2i</i>	0.5	0.7624(27)	-0.148(2)	0.1274(14)	0.088(13)
H82A	<i>2i</i>	0.5	0.7184(27)	-0.1663(20)	0.1551(14)	0.1330
H82B	<i>2i</i>	0.5	0.7718(27)	-0.0929(20)	0.1298(14)	0.1330
H82C	<i>2i</i>	0.5	0.8228(27)	-0.1436(20)	0.1465(14)	0.1330
C831	<i>2i</i>	0.5	0.7265(33)	-0.294(2)	0.0501(22)	0.127(18)
H83A	<i>2i</i>	0.5	0.6811(33)	-0.3191(20)	0.0745(22)	0.1910
H83B	<i>2i</i>	0.5	0.7901(33)	-0.2773(20)	0.0755(22)	0.1910
H83C	<i>2i</i>	0.5	0.7118(33)	-0.3353(20)	0.0018(22)	0.1910
C812	<i>2i</i>	0.5	0.7588(33)	-0.2673(26)	-0.0039(20)	0.133(19)
H81D	<i>2i</i>	0.5	0.8231(33)	-0.2516(26)	0.0191(20)	0.1990
H81E	<i>2i</i>	0.5	0.7588(33)	-0.2563(26)	-0.0467(20)	0.1990
H81F	<i>2i</i>	0.5	0.7183(33)	-0.3272(26)	-0.0167(20)	0.1990
C822	<i>2i</i>	0.5	0.7846(32)	-0.1187(18)	0.0622(23)	0.132(18)
H82D	<i>2i</i>	0.5	0.8495(32)	-0.1008(18)	0.0857(23)	0.1990
H82E	<i>2i</i>	0.5	0.7607(32)	-0.0838(18)	0.0926(23)	0.1990
H82F	<i>2i</i>	0.5	0.7829(32)	-0.1126(18)	0.0173(23)	0.1990
C832	<i>2i</i>	0.5	0.7326(31)	-0.2222(25)	0.1199(16)	0.104(15)
H83D	<i>2i</i>	0.5	0.7988(31)	-0.2049(25)	0.1392(16)	0.1560
H83E	<i>2i</i>	0.5	0.6939(31)	-0.2807(25)	0.1127(16)	0.1560
H83F	<i>2i</i>	0.5	0.7124(31)	-0.1859(25)	0.1530(16)	0.1560
C84	<i>2i</i>		0.3633(13)	-0.218(1)	0.1271(9)	
H84	<i>2i</i>		0.3250(13)	-0.1909(10)	0.1486(9)	0.0750
C85	<i>2i</i>		0.2965(13)	-0.3152(11)	0.0901(11)	
H85A	<i>2i</i>		0.2460(13)	-0.3269(11)	0.0521(11)	0.1360
H85B	<i>2i</i>		0.2691(13)	-0.3352(11)	0.1247(11)	0.1360
H85C	<i>2i</i>		0.3325(13)	-0.3441(11)	0.0702(11)	0.1360

Tabelle 6.13 Atomkoordinaten (Fortsetzung)

C86	<i>2i</i>	0.4458(5)	-0.1947(4)	0.1886(4)	
H86A	<i>2i</i>	0.4858(5)	-0.1336(4)	0.2103(4)	0.1200
H86B	<i>2i</i>	0.4833(5)	-0.2225(4)	0.1698(4)	0.1200
H86C	<i>2i</i>	0.4199(5)	-0.2136(4)	0.2242(4)	0.1200
C87	<i>2i</i>	0.4743(5)	-0.0659(4)	0.0970(4)	
C88	<i>2i</i>	0.5423(5)	-0.0277(4)	0.0639(4)	
H88	<i>2i</i>	0.5507(5)	-0.0615(4)	0.0222(4)	0.1010
C89	<i>2i</i>	0.5977(5)	0.0611(4)	0.0932(4)	
H89	<i>2i</i>	0.6432(5)	0.0866(4)	0.0711(4)	0.1290
C90	<i>2i</i>	0.5852(5)	0.1117(4)	0.1555(4)	
H90	<i>2i</i>	0.6223(5)	0.1710(4)	0.1751(4)	0.1150
C91	<i>2i</i>	0.5172(5)	0.0735(4)	0.1886(4)	
H91	<i>2i</i>	0.5088(5)	0.1073(4)	0.2303(4)	0.0880
C92	<i>2i</i>	0.4618(5)	-0.0153(4)	0.1593(4)	
H92	<i>2i</i>	0.4163(5)	-0.0408(4)	0.1814(4)	0.0800
C200	<i>1e</i>	1/2	-1/2	0	0.290(29)
O100	<i>2i</i>	0.5	0.7616(52)	-0.3637(51)	0.5340(43)
C104	<i>2i</i>	0.5	0.6951(55)	-0.3502(45)	0.5899(37)
C103	<i>2i</i>	0.5	0.6868(54)	-0.4253(45)	0.5145(40)
C102	<i>2i</i>	0.5	0.7893(47)	-0.4465(39)	0.4034(33)
C101	<i>2i</i>	0.5	0.7843(41)	-0.3983(37)	0.4849(34)
					0.143(21)

Tabelle 6.14 Anisotrope Auslenkungsparameter (in Å²)

Atom	<i>U</i> ₁₁	<i>U</i> ₂₂	<i>U</i> ₃₃	<i>U</i> ₁₂	<i>U</i> ₁₃	<i>U</i> ₂₃
Ni1	0.044(2)	0.0417(13)	0.0354(12)	0.0181(12)	0.0096(13)	0.0101(10)
P1	0.038(3)	0.038(2)	0.040(3)	0.018(2)	0.004(3)	0.011(2)
P2	0.045(4)	0.044(3)	0.033(2)	0.017(3)	0.006(3)	0.014(2)
O1	0.053(9)	0.033(6)	0.047(6)	0.019(6)	0.000(7)	0.009(5)
O2	0.061(9)	0.047(7)	0.033(6)	0.027(6)	0.009(7)	0.008(5)
C1	0.034(13)	0.033(9)	0.041(10)	0.022(9)	0.004(10)	0.011(8)
C2	0.068(16)	0.046(11)	0.044(11)	0.023(11)	0.000(11)	0.010(9)
C3	0.068(17)	0.039(11)	0.062(13)	0.016(11)	0.034(13)	0.019(10)
C4	0.063(16)	0.061(12)	0.066(13)	0.049(11)	0.030(13)	0.036(11)
C5	0.051(15)	0.051(11)	0.041(10)	0.032(11)	0.009(11)	0.020(9)
C6	0.033(13)	0.04(1)	0.044(11)	0.006(9)	0.007(10)	0.019(9)
C7	0.070(18)	0.079(14)	0.050(12)	0.052(13)	0.011(13)	0.027(11)
C8	0.055(16)	0.112(17)	0.073(14)	0.037(14)	0.005(13)	0.044(13)
C9	0.110(19)	0.101(15)	0.045(11)	0.054(14)	0.033(13)	0.038(11)
C10	0.146(26)	0.150(21)	0.074(15)	0.120(21)	0.003(17)	0.026(14)
C11	0.172(27)	0.074(14)	0.087(15)	0.096(17)	0.059(18)	0.054(13)
C15	0.042(13)	0.072(11)	0.052(11)	0.04(1)	0.030(11)	0.032(9)
C16	0.076(17)	0.085(14)	0.072(13)	0.035(13)	0.037(14)	0.026(11)
C17	0.086(17)	0.100(15)	0.038(10)	0.039(13)	0.021(12)	0.015(10)
C18	0.025(13)	0.051(11)	0.032(10)	-0.007(10)	0.001(10)	0.007(8)
C19	0.077(18)	0.107(16)	0.099(16)	0.054(14)	0.057(16)	0.077(14)
C20	0.039(17)	0.120(19)	0.203(28)	0.047(15)	0.058(20)	0.117(20)
C21	0.023(14)	0.105(17)	0.066(14)	0.029(13)	-0.003(13)	0.021(12)
C22	0.048(16)	0.085(15)	0.073(14)	0.043(13)	-0.009(15)	0.029(12)
C23	0.041(17)	0.081(14)	0.038(11)	0.023(12)	-0.007(13)	0.015(10)
C24	0.051(14)	0.045(10)	0.030(9)	0.018(10)	0.004(10)	0.005(8)
C25	0.051(14)	0.045(10)	0.056(12)	0.027(10)	0.007(11)	0.013(9)
C26	0.048(14)	0.053(11)	0.049(12)	0.026(10)	0.024(12)	0.016(10)
C27	0.054(15)	0.038(10)	0.032(10)	0.02(1)	-0.004(11)	-0.003(8)
C28	0.034(13)	0.044(10)	0.032(9)	0.021(9)	-0.002(10)	0.016(8)
C29	0.048(14)	0.04(1)	0.027(9)	0.009(10)	0.009(10)	0.016(9)
C30	0.046(14)	0.052(11)	0.023(9)	0.015(10)	0.004(10)	0.002(8)
C31	0.071(17)	0.083(14)	0.053(12)	0.037(13)	-0.011(12)	0.007(10)
C32	0.125(22)	0.068(13)	0.053(12)	0.033(14)	0.009(13)	0.026(10)
C33	0.070(17)	0.093(14)	0.071(13)	0.046(13)	0.008(14)	0.027(12)
C34	0.075(16)	0.050(11)	0.060(13)	0.016(11)	0.034(14)	0.003(10)

Tabelle 6.14 Anisotrope Auslenkungsparameter (in Å²) (Fortsetzung)

C37	0.188(30)	0.121(21)	0.273(35)	0.113(22)	0.155(30)	0.106(24)
C38	0.062(16)	0.045(11)	0.025(9)	0.008(10)	0.002(11)	0.000(8)
C39	0.068(16)	0.039(10)	0.090(14)	0.01(1)	0.015(13)	0.022(10)
C40	0.069(17)	0.083(14)	0.047(11)	0.000(13)	0.009(13)	0.026(10)
C41	0.050(15)	0.05(1)	0.038(10)	0.025(10)	0.007(12)	0.015(9)
C42	0.079(19)	0.085(15)	0.067(15)	0.055(16)	0.015(17)	0.032(12)
C43	0.112(27)	0.121(19)	0.077(17)	0.051(20)	0.041(19)	0.059(16)
C44	0.054(19)	0.092(18)	0.189(33)	0.034(15)	0.028(23)	0.044(20)
C45	0.126(27)	0.079(16)	0.072(15)	0.044(20)	-0.017(20)	0.037(13)
C46	0.085(21)	0.055(12)	0.041(12)	0.025(14)	-0.006(13)	0.005(10)
Ni2	0.038(2)	0.0435(13)	0.0385(13)	0.0203(12)	0.0096(13)	0.0116(10)
P3	0.040(3)	0.052(3)	0.038(3)	0.025(3)	0.013(3)	0.017(2)
P4	0.035(3)	0.045(3)	0.047(3)	0.021(2)	0.011(3)	0.017(2)
O3	0.049(9)	0.049(7)	0.029(6)	0.021(7)	0.010(7)	0.008(5)
O4	0.071(11)	0.057(7)	0.048(8)	0.042(8)	0.016(9)	0.004(6)
C47	0.038(12)	0.061(11)	0.033(9)	0.036(10)	0.014(10)	0.015(9)
C48	0.037(14)	0.046(10)	0.042(11)	0.025(10)	0.014(12)	0.015(9)
C49	0.027(13)	0.051(11)	0.046(11)	0.012(9)	0.009(12)	0.014(9)
C50	0.043(13)	0.055(11)	0.025(9)	0.022(10)	-0.004(10)	0.021(9)
C51	0.015(12)	0.044(10)	0.037(10)	0.017(9)	-0.001(10)	0.014(8)
C52	0.041(15)	0.047(11)	0.051(12)	0.023(10)	0.017(13)	0.025(10)
C53	0.048(14)	0.052(11)	0.034(10)	0.023(10)	0.018(11)	0.017(8)
C54	0.078(17)	0.075(13)	0.055(12)	0.037(12)	0.029(13)	0.018(10)
C55	0.064(17)	0.075(13)	0.046(11)	0.027(12)	0.004(12)	0.018(10)
C56	0.068(15)	0.059(12)	0.051(11)	0.030(11)	0.006(11)	0.011(9)
C57	0.086(19)	0.092(15)	0.039(11)	0.057(15)	0.012(13)	0.016(11)
C58	0.049(18)	0.090(17)	0.199(28)	0.031(15)	-0.011(20)	-0.006(18)
C59	0.219(33)	0.239(29)	0.125(20)	0.191(28)	0.094(22)	0.141(22)
C60	0.080(18)	0.111(16)	0.098(16)	0.065(15)	0.013(15)	0.040(14)
C61	0.074(16)	0.057(11)	0.066(12)	0.034(11)	0.031(13)	0.032(10)
C62	0.075(16)	0.065(12)	0.091(14)	0.017(12)	0.037(14)	0.045(12)
C63	0.044(14)	0.114(16)	0.067(13)	0.039(12)	0.023(13)	0.032(12)
C64	0.041(12)	0.063(11)	0.026(9)	0.033(10)	0.007(9)	0.006(8)
C65	0.061(15)	0.076(13)	0.065(12)	0.044(12)	0.030(12)	0.037(11)
C66	0.107(20)	0.061(13)	0.092(16)	0.048(14)	0.020(16)	0.021(12)
C67	0.089(19)	0.097(16)	0.051(12)	0.069(15)	-0.008(14)	-0.011(12)
C68	0.055(15)	0.123(18)	0.054(12)	0.052(14)	0.021(12)	0.021(13)
C69	0.043(13)	0.090(13)	0.031(10)	0.036(11)	0.006(10)	0.010(9)
C70	0.051(15)	0.048(11)	0.047(12)	0.024(11)	0.020(13)	0.012(9)
C71	0.056(16)	0.063(12)	0.061(13)	0.030(12)	0.011(14)	0.014(10)
C72	0.037(14)	0.059(12)	0.083(16)	0.024(11)	0.025(15)	0.030(11)
C73	0.068(17)	0.057(12)	0.071(15)	0.047(13)	0.035(15)	0.028(11)
C74	0.049(15)	0.047(11)	0.070(14)	0.034(12)	0.010(14)	0.015(10)
C75	0.045(15)	0.037(10)	0.087(17)	0.025(12)	0.020(16)	0.024(11)
C76	0.076(18)	0.070(14)	0.060(13)	0.046(14)	0.004(14)	0.008(11)
C77	0.161(26)	0.159(22)	0.109(19)	0.135(21)	0.042(20)	-0.005(17)
C78	0.101(22)	0.093(17)	0.108(18)	0.028(17)	0.004(18)	-0.006(15)
C79	0.093(20)	0.134(19)	0.069(14)	0.076(17)	0.016(15)	0.024(14)
C80	0.060(18)	0.081(15)	0.121(20)	0.032(14)	0.023(18)	0.029(14)
C84	0.074(16)	0.054(11)	0.070(12)	0.023(11)	0.043(13)	0.041(10)
C85	0.062(16)	0.087(15)	0.128(18)	0.020(13)	0.023(15)	0.067(14)
C86	0.067(18)	0.107(16)	0.068(13)	0.032(14)	-0.001(13)	0.051(12)
C87	0.058(13)	0.043(10)	0.05(1)	0.039(10)	0.011(11)	0.020(9)
C88	0.094(18)	0.050(12)	0.115(17)	0.024(12)	0.060(15)	0.045(12)
C89	0.093(18)	0.044(12)	0.183(23)	0.022(12)	0.077(18)	0.043(14)
C90	0.107(20)	0.053(12)	0.120(18)	0.043(13)	0.035(17)	0.017(13)
C91	0.072(17)	0.063(13)	0.055(12)	0.028(12)	0.002(13)	-0.002(10)
C92	0.067(16)	0.049(11)	0.065(12)	0.015(11)	0.020(12)	0.017(10)

Tabelle 6.15 Bindungsabstände (\AA)

Ni1—O1	1.869(10)	Ni2—P4	2.150(5)
Ni1—O2	1.89(1)	Ni2—P3	2.156(5)
Ni1—P1	2.157(4)	P3—C47	1.79(2)
Ni1—P2	2.166(5)	P3—C61	1.837(15)
P1—C1	1.795(15)	P3—C64	1.844(8)
P1—C18	1.82(2)	P4—C70	1.80(2)
P1—C15	1.828(14)	P4—C87	1.837(8)
P2—C41	1.78(2)	P4—C84	1.885(14)
P2—C24	1.805(14)	O3—C52	1.30(2)
P2—C38	1.84(2)	O4—C75	1.29(2)
O1—C6	1.31(2)	C47—C48	1.36(2)
O2—C29	1.32(2)	C47—C52	1.38(2)
C1—C6	1.40(2)	C48—C49	1.40(2)
C1—C2	1.40(2)	C49—C50	1.43(2)
C2—C3	1.33(2)	C49—C57	1.53(2)
C3—C4	1.43(2)	C50—C51	1.35(2)
C3—C11	1.58(2)	C51—C52	1.45(2)
C4—C5	1.39(2)	C51—C53	1.52(2)
C5—C6	1.41(2)	C53—C56	1.54(2)
C5—C7	1.54(2)	C53—C55	1.53(2)
C7—C8	1.54(2)	C53—C54	1.56(2)
C7—C9	1.53(2)	C57—C58	1.50(2)
C7—C10	1.54(2)	C57—C60	1.52(2)
C11—C131	1.30(6)	C57—C59	1.53(2)
C11—C142	1.49(4)	C61—C63	1.51(2)
C11—C141	1.52(4)	C61—C62	1.55(2)
C11—C121	1.55(4)	C64—C65	1.390
C11—C132	1.61(4)	C64—C69	1.390
C11—C122	1.66(4)	C65—C66	1.390
C15—C16	1.53(2)	C66—C67	1.390
C15—C17	1.56(2)	C67—C68	1.390
C18—C23	1.36(2)	C68—C69	1.390
C18—C19	1.39(2)	C70—C71	1.36(2)
C19—C20	1.39(2)	C70—C75	1.40(2)
C20—C21	1.38(2)	C71—C72	1.38(2)
C21—C22	1.37(2)	C72—C73	1.38(2)
C22—C23	1.39(2)	C72—C80	1.53(3)
C24—C25	1.40(2)	C73—C74	1.33(2)
C24—C29	1.41(2)	C74—C75	1.49(2)
C25—C26	1.39(2)	C74—C76	1.55(2)
C26—C27	1.38(2)	C76—C79	1.53(2)
C26—C34	1.59(2)	C76—C78	1.54(3)
C27—C28	1.38(2)	C76—C77	1.55(2)
C28—C29	1.44(2)	C80—C811	1.52(2)
C28—C30	1.52(2)	C80—C812	1.53(2)
C30—C32	1.52(2)	C80—C832	1.53(2)
C30—C31	1.55(2)	C80—C831	1.54(2)
C30—C33	1.56(2)	C80—C821	1.55(2)
C34—C361	1.36(5)	C80—C822	1.55(2)
C34—C37	1.44(2)	C84—C86	1.53(2)
C34—C351	1.45(6)	C84—C85	1.54(2)
C34—C362	1.57(4)	C87—C88	1.390
C34—C352	1.59(4)	C87—C92	1.390
C38—C39	1.54(2)	C88—C89	1.390
C38—C40	1.55(2)	C89—C90	1.390
C41—C46	1.38(2)	C90—C91	1.390
C41—C42	1.38(2)	C91—C92	1.390
C42—C43	1.38(2)	O100—C101	1.17(6)
C43—C44	1.37(2)	O100—C103	1.17(6)
C44—C45	1.39(2)	O100—C104	1.64(9)
C45—C46	1.38(2)	C104—C103	1.65(6)
Ni2—O4	1.869(11)	C103—C101	1.65(10)
Ni2—O3	1.896(11)	C102—C101	1.63(6)

Tabelle 6.16 Bindungswinkel ($^{\circ}$)

O1—Ni1—O2	85.0(5)	O4—Ni2—P3	169.9(4)
O1—Ni1—P1	86.4(3)	O3—Ni2—P3	83.8(4)
O2—Ni1—P1	171.2(4)	P4—Ni2—P3	103.2(2)
O1—Ni1—P2	170.3(3)	C47—P3—C61	105.0(8)
O2—Ni1—P2	85.8(4)	C47—P3—C64	107.8(6)
P1—Ni1—P2	102.9(2)	C61—P3—C64	106.4(6)
C1—P1—C18	107.4(8)	C47—P3—Ni2	101.2(5)
C1—P1—C15	109.0(7)	C61—P3—Ni2	111.4(6)
C18—P1—C15	106.6(7)	C64—P3—Ni2	123.5(3)
C1—P1—Ni1	99.7(5)	C70—P4—C87	105.6(6)
C18—P1—Ni1	118.1(5)	C70—P4—C84	109.0(8)
C15—P1—Ni1	115.4(5)	C87—P4—C84	105.8(6)
C41—P2—C24	107.6(8)	C70—P4—Ni2	100.5(7)
C41—P2—C38	105.0(8)	C87—P4—Ni2	117.3(3)
C24—P2—C38	104.8(7)	C84—P4—Ni2	117.7(6)
C41—P2—Ni1	125.5(5)	C52—O3—Ni2	120.5(11)
C24—P2—Ni1	99.9(7)	C75—O4—Ni2	122.0(11)
C38—P2—Ni1	112.1(6)	C48—C47—C52	123.4(17)
C6—O1—Ni1	122.3(11)	C48—C47—P3	128.7(12)
C29—O2—Ni1	119.2(11)	C52—C47—P3	107.7(14)
C6—C1—C2	122.6(16)	C47—C48—C49	121.2(16)
C6—C1—P1	111.6(12)	C48—C49—C50	113.8(17)
C2—C1—P1	125.5(14)	C48—C49—C57	124.6(15)
C3—C2—C1	119.7(17)	C50—C49—C57	121.6(16)
C2—C3—C4	119.1(16)	C51—C50—C49	127.8(16)
C2—C3—C11	123.5(20)	C50—C51—C52	114.8(15)
C4—C3—C11	117.3(19)	C50—C51—C53	121.9(15)
C5—C4—C3	122.1(17)	C52—C51—C53	123.2(16)
C4—C5—C6	118.2(17)	O3—C52—C47	123.0(17)
C4—C5—C7	121.9(17)	O3—C52—C51	118.3(15)
C6—C5—C7	119.9(15)	C47—C52—C51	118.4(17)
O1—C6—C1	119.8(17)	C51—C53—C56	110.6(12)
O1—C6—C5	122.1(16)	C51—C53—C55	113.2(15)
C1—C6—C5	118.0(15)	C56—C53—C55	109.2(13)
C8—C7—C9	108.9(14)	C51—C53—C54	107.9(12)
C8—C7—C10	107.5(17)	C56—C53—C54	107.8(15)
C9—C7—C10	108.3(15)	C55—C53—C54	108.0(13)
C8—C7—C5	112.5(15)	C58—C57—C60	108.7(17)
C9—C7—C5	108.2(15)	C58—C57—C59	111.4(20)
C10—C7—C5	111.4(15)	C60—C57—C59	104.1(17)
C131—C11—C141	120.9(40)	C58—C57—C49	108.4(17)
C131—C11—C121	98.7(36)	C60—C57—C49	111.5(16)
C141—C11—C121	105.4(23)	C59—C57—C49	112.7(16)
C131—C11—C3	111.4(30)	C63—C61—C62	112.2(14)
C142—C11—C3	112.8(22)	C63—C61—P3	114.5(11)
C141—C11—C3	109.4(18)	C62—C61—P3	109.(1)
C121—C11—C3	110.0(23)	C65—C64—C69	120.00
C142—C11—C132	117.9(28)	C65—C64—P3	117.2(3)
C3—C11—C132	110.8(18)	C69—C64—P3	122.7(3)
C142—C11—C122	106.4(28)	C66—C65—C64	120.00
C3—C11—C122	104.1(19)	C65—C66—C67	120.00
C132—C11—C122	103.4(21)	C68—C67—C66	120.00
C16—C15—C17	109.8(12)	C69—C68—C67	120.00
C16—C15—P1	110.0(12)	C68—C69—C64	120.00
C17—C15—P1	115.0(11)	C71—C70—C75	122.7(16)
C23—C18—C19	118.8(16)	C71—C70—P4	127.6(13)
C23—C18—P1	122.8(12)	C75—C70—P4	109.3(16)
C19—C18—P1	118.2(14)	C70—C71—C72	121.6(18)
C20—C19—C18	120.1(16)	C71—C72—C73	116.3(20)
C21—C20—C19	121.5(15)	C71—C72—C80	120.8(19)
C22—C21—C20	117.5(16)	C73—C72—C80	122.9(17)
C21—C22—C23	121.4(16)	C74—C73—C72	126.3(17)
C18—C23—C22	120.7(16)	C73—C74—C75	117.5(18)

Tabelle 6.16 Bindungswinkel ($^{\circ}$)(Fortsetzung)

C25—C24—C29	123.6(15)	C73—C74—C76	125.5(17)
C25—C24—P2	128.2(16)	C75—C74—C76	117.0(19)
C29—C24—P2	108.2(12)	O4—C75—C70	121.7(16)
C26—C25—C24	118.5(17)	O4—C75—C74	122.8(19)
C27—C26—C25	117.5(15)	C70—C75—C74	115.5(19)
C27—C26—C34	125.1(16)	C79—C76—C78	110.2(20)
C25—C26—C34	117.4(19)	C79—C76—C77	109.0(18)
C28—C27—C26	126.5(16)	C78—C76—C77	108.7(17)
C27—C28—C29	116.7(17)	C79—C76—C74	109.3(15)
C27—C28—C30	123.7(15)	C78—C76—C74	111.0(17)
C29—C28—C30	119.5(14)	C77—C76—C74	108.6(18)
O2—C29—C24	122.8(14)	C811—C80—C72	113.7(21)
O2—C29—C28	120.6(17)	C72—C80—C812	109.1(23)
C24—C29—C28	116.6(15)	C72—C80—C832	115.3(23)
C32—C30—C28	110.2(14)	C812—C80—C832	110.0(21)
C32—C30—C31	109.2(14)	C811—C80—C831	104.8(19)
C28—C30—C31	112.1(14)	C72—C80—C831	109.8(23)
C32—C30—C33	109.3(15)	C811—C80—C821	105.9(18)
C28—C30—C33	109.9(14)	C72—C80—C821	117.5(21)
C31—C30—C33	106.1(15)	C831—C80—C821	103.9(19)
C361—C34—C37	132.1(38)	C72—C80—C822	107.5(24)
C361—C34—C351	108.1(35)	C812—C80—C822	107.2(18)
C37—C34—C351	86.9(37)	C832—C80—C822	107.5(19)
C37—C34—C362	98.0(23)	C86—C84—C85	112.1(13)
C37—C34—C352	118.6(21)	C86—C84—P4	116.7(10)
C362—C34—C352	111.3(22)	C85—C84—P4	106.0(11)
C361—C34—C26	110.6(26)	C88—C87—C92	120.00
C37—C34—C26	107.1(15)	C88—C87—P4	118.0(3)
C351—C34—C26	107.9(30)	C92—C87—P4	121.9(3)
C362—C34—C26	115.8(18)	C87—C88—C89	120.00
C352—C34—C26	106.4(18)	C90—C89—C88	120.00
C39—C38—C40	107.8(14)	C89—C90—C91	120.00
C39—C38—P2	113.9(12)	C92—C91—C90	120.00
C40—C38—P2	108.7(11)	C91—C92—C87	120.00
C46—C41—C42	117.6(17)	C101—O100—C103	89.4(79)
C46—C41—P2	124.6(15)	C101—O100—C104	158.8(84)
C42—C41—P2	117.6(14)	C103—O100—C104	69.4(48)
C41—C42—C43	122.3(16)	C103—C104—O100	41.9(28)
C44—C43—C42	120.0(17)	O100—C103—C104	68.7(57)
C43—C44—C45	117.9(20)	O100—C103—C101	45.1(41)
C46—C45—C44	122.0(16)	C104—C103—C101	113.8(55)
C41—C46—C45	120.1(16)	O100—C101—C102	163.2(74)
O4—Ni2—O3	87.5(5)	O100—C101—C103	45.5(41)
O4—Ni2—P4	85.9(4)	C102—C101—C103	125.0(56)
O3—Ni2—P4	171.4(3)		

Ich danke

für die Durchführung und Lösung der Röntgenstrukturanalyse von
24 Herrn Prof. Dr. H. J. Haupt und Herrn Dr. U. Flörke von der
Universität/GH Paderborn

Herrn Dr. G. Cordier für die Bereitstellung von Meßzeit sowie die
exzellente Einführung in die Methoden der Einkristalldiffraktometrie

Frau Prof. Dr. B. Eisenmann für hilfreiche Diskussionen und Tips

Frau J. Wendlig für die oft aufwendigen Protonen- und
Phosphorresonanzmessungen bei tiefen Temperaturen sowie Herrn K.-
O. Runzheimer und Frau K. Jungk für die Aufnahme weitere NMR-
Spektren

Herrn Prof. Dr. J. Heinicke und Herrn Dr. M. He sowie Herrn Prof. Dr.
G. Luft , Herrn Dr. A. Rau, Herrn Dipl.Ing. Th. Wieczorek und Herrn
Dipl.Ing. D. Walter für die Durchführung der Katalyseversuche

Frau D. Vogt für die Polymeranalytik

allen Mitarbeitern der Arbeitsgruppe Anorganische Chemie I der
Technischen Universität Darmstadt für die gute Zusammenarbeit

Lebenslauf

Name: Olaf Franz Hetche
Geboren: 21. November 1968 Offenbach am Main
Eltern: Werner Hetche (selbst. Fleischermeister)
Familienstand: Rita Hetche, geb.Kaiser(Fleischereifachverkäuferin)
ledig

Wehrdienst 10/1988 bis 12/1989, Entlassung im Dienstgrad eines Obergefreiten

Ausbildung

1/1997-4/2000 Dissertation unter der Leitung von Prof. Dr. H.-F. Klein,
Technische Universität Darmstadt
Thema: *[O,P]- und [N,P]-Chelatkomplexe des Nickels-Modellverbindungen für homogene Einkomponentenkatalysatoren*
10/1990-12/1996 Diplomstudiengang Chemie, Technische Universität Darmstadt
Diplomarbeit unter der Leitung von Prof. Dr. H.-F. Klein,
Technische Universität Darmstadt
Thema: *Trimethylphosphan-Komplexe des nullwertigen Nickels mit akzeptorsubstituierten Olefinen*
7/1979-7/1988 Abitur, Leibniz-Schule Offenbach am Main
7/1975-6/1979 Mauerfeldschule Offenbach am Main

Berufserfahrung

3/1997- Wissenschaftlicher Mitarbeiter im Fachbereich Anorganische Chemie, Technische Universität Darmstadt
Betreuung von Grund- und Vertiefungspraktika
8/1996-12/1998 nebenberufliche Qualitätsanalytik in der Fa. LTS in Langen/Hessen
1993-1996 Werksstudent in der Produktion von pharmazeutischen Zwischenprodukten Fa. Clariant Offenbach (vormals Hoechst AG Offenbach)
1991-1993 Werksstudent Fa. ALSKO Dreieich
2/1990-9/1990 Service-Inkassomitarbeiter Fa. ALSKO Dreieich

Fremdsprachen Englisch, Französisch (Schulkenntnisse), Latein

EDV-Kenntnisse: MS-Office, ChemWin, STOE X-Step, Diamond, Novell, LINUX

Sachkenntnis: Prüfung nach § 13 der Verordnung über gefährliche Stoffe für das Inverkehrbringen von giftigen und sehr giftigen Stoffen und Zubereitungen

Olaf Hetché
In der Kirchtanne 27
64297 Darmstadt

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit erkläre ich an Eides Statt, daß ich meine Dissertation selbständig und nur mit den angegebenen Hilfsmitteln angefertigt habe.

Darmstadt, den 11.02.2000