

## Synthese und Struktur von $\text{Re}_4(\mu_3\text{-Te})_4(\text{TeBr}_2)_4\text{Br}_8$

E. Schulz Lang, U. Abram und J. Strähle\*

Tübingen, Institut für Anorganische Chemie der Universität

Bei der Redaktion eingegangen am 8. Mai 1995.

*Professor Gerhard Thiele zum 60. Geburtstag gewidmet*

**Inhaltsübersicht.**  $\text{Re}_4(\mu_3\text{-Te})_4(\text{TeBr}_2)_4\text{Br}_8$  entsteht bei 550 °C aus den Elementen in einer unter Vakuum abgeschmolzenen Glasampulle. Die diamagnetische Verbindung bildet an Luft stabile, metallisch glänzende schwarze Kristalle. Sie kristallisieren tetragonal in der Raumgruppe  $\bar{I}4$  mit  $a = 1120,2(2)$ ;  $c = 1393,5(3)$  pm; und  $Z = 2$ . Die Kristallstruktur ist aus isolierten  $\text{Re}_4(\mu_3\text{-Te})_4(\text{TeBr}_2)_4\text{Br}_8$ -Clustermolekülen aufgebaut, die

die Zentren  $\bar{4}$  in  $1/2, 1/2, 0$  und  $0, 0, 1/2$  besetzen. Inneres Gerüst ist eine  $\text{Re}_4\text{Te}_4$ -Heterocubaneinheit mit kurzen Re—Re-Abständen von 277 und 283 pm, die als Einfachbindungen interpretiert werden können. Jedes Re-Atom koordiniert außerdem zwei  $\text{Br}^-$ -Liganden und ein  $\text{TeBr}_2$ -Molekül, so daß für Re die Oxidationsstufe +IV resultiert. Bei der Umsetzung von  $\text{Re}_4(\mu_3\text{-Te})_4(\text{TeBr}_2)_4\text{Br}_8$  mit  $\text{I}_2$  kann  $(\text{TeI}_4)_4$  isoliert werden.

## Synthesis and Structure of $\text{Re}_4(\mu_3\text{-Te})_4(\text{TeBr}_2)_4\text{Br}_8$

**Abstract.**  $\text{Re}_4(\mu_3\text{-Te})_4(\text{TeBr}_2)_4\text{Br}_8$  is obtained from the elements at 550 °C in an evacuated glass ampoule. The diamagnetic compound forms air-stable, metallic lustre black crystals crystallizing in the tetragonal space group  $\bar{I}4$  with  $a = 1120.2(2)$ ,  $c = 1393.5(3)$  pm, and  $Z = 2$ . The crystal structure is built up by isolated cluster molecules  $\text{Re}_4(\mu_3\text{-Te})_4(\text{TeBr}_2)_4\text{Br}_8$  occupying the centres  $\bar{4}$  at  $1/2, 1/2, 0$  and  $0, 0, 1/2$ . The inner skeleton is formed by a  $\text{Re}_4\text{Te}_4$  heterocubane unit with short Re—Re dis-

tances of 277 and 283 pm, which can be discussed as single bonds. Each Re atom coordinates in addition two  $\text{Br}^-$  ligands and one  $\text{TeBr}_2$  molecule. For Re therefore results the oxidation state +IV. Reaction of  $\text{Re}_4(\mu_3\text{-Te})_4(\text{TeBr}_2)_4\text{Br}_8$  with  $\text{I}_2$  yields  $(\text{TeI}_4)_4$ .

**Keywords:** Rhenium Tellurium Cluster Compound;  $\text{Re}_4\text{Te}_4$  Heterocubane; Crystal Structure

### 1 Einleitung

Rhenium bildet in niederen Oxidationsstufen häufig Metall—Metall-Mehrfachbindungen und Cluster [1, 2]. Dabei treten bei den Clustern insbesondere drei-, vier- und sechskernige Baugruppen auf. Wir haben nun auf einfache Weise aus den Elementen den neuen tetraedrischen  $\text{Re}_4$ -Cluster  $\text{Re}_4(\mu_3\text{-Te})_4(\text{TeBr}_2)_4\text{Br}_8$  erhalten, dessen zentrale Einheit  $\text{Re}_4(\mu_3\text{-Te})_4$  eine Heterocubanstruktur bildet. Analoge  $\text{Re}_4(\mu_3\text{-S})_4$ - oder  $\text{Re}_4(\mu_3\text{-Se})_4$ -Heterocubane waren bereits bei den Anionen  $[\text{Re}_4\text{X}_4(\text{CN})_{12}]^{4-}$  ( $\text{X} = \text{S}, \text{Se}$ ) [3] und  $[\text{Re}_4\text{S}_4(\text{S}_3)_6]^{4-}$  [4, 5] sowie in  $\text{Re}_4\text{S}_4\text{Te}_4$  [6] gefunden worden. In allen Fällen weisen die Re-Atome die Oxidationsstufe +IV auf, so daß insgesamt jeweils 12 Elektronen für die Metall—Metall-Bindungen in den diamagnetischen Verbindungen verfügbar sind.

### 2 Ergebnisse und Diskussion

#### Synthesen und Eigenschaften

$\text{Re}_4(\mu_3\text{-Te})_4(\text{TeBr}_2)_4\text{Br}_8$  wird bei 550 °C in einer unter Vakuum abgeschmolzenen Glasampulle aus den Elementen

erhalten. Als Nebenprodukt entsteht außerdem  $\text{TeBr}_4$ , das sich jedoch in einer getrennten Zone abscheidet, so daß beide Produkte rein isoliert werden können.  $\text{Re}_4(\mu_3\text{-Te})_4(\text{TeBr}_2)_4\text{Br}_8$  bildet metallisch glänzende schwarze Kristalle, die an Luft stabil sind. Es weist diamagnetisches Verhalten auf mit einer temperaturunabhängigen Molsuszeptibilität von  $\chi_{\text{Mol}} = -215 \cdot 10^{-6}$  emu/mol.

Bei der Umsetzung von  $\text{Re}_4(\mu_3\text{-Te})_4(\text{TeBr}_2)_4\text{Br}_8$  mit  $\text{I}_2$  bei 300 °C in einer unter Vakuum abgeschmolzenen Glasampulle wird  $\text{TeI}_4$  gebildet. Wir konnten Kristalle der orthorhombischen Modifikation  $\delta\text{-TeI}_4$  [7] sowie der tetragonalen Modifikation  $\varepsilon\text{-TeI}_4$  [8] isolieren.

#### Diskussion der Struktur

$\text{Re}_4(\mu_3\text{-Te})_4(\text{TeBr}_2)_4\text{Br}_8$  kristallisiert tetragonal in der Raumgruppe  $\bar{I}4$  mit den in Tab. 1 angegebenen Gitterkonstanten. Die Struktur ist in Abb. 1 dargestellt. In Tab. 2 sind wichtige interatomare Abstände und Winkel aufgeführt.

$\text{Re}_4(\mu_3\text{-Te})_4(\text{TeBr}_2)_4\text{Br}_8$  bildet tetraedrische  $\text{Re}_4$ -Cluster, die mit ihrem Schwerpunkt die Zentren  $\bar{4}$  der Raum-

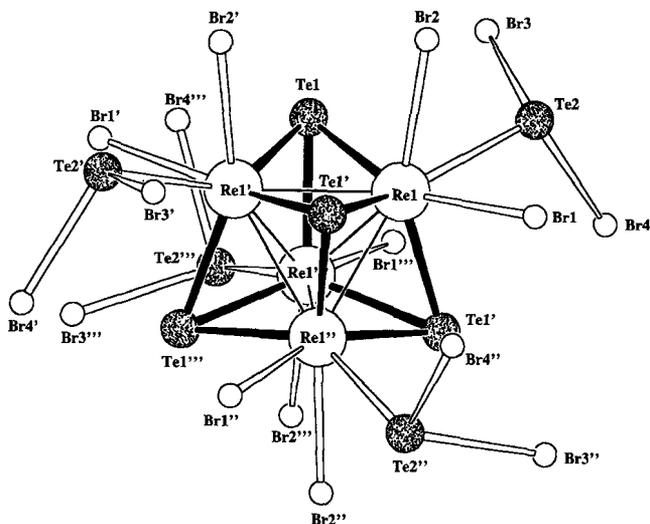


Abb. 1 Struktur von  $\text{Re}_4(\mu_3\text{-Te})_4(\text{TeBr}_2)_4\text{Br}_8$  [17]

Tabelle 1 Kristalldaten und Parameter der Strukturlösung von  $\text{Re}_4(\mu_3\text{-Te})_4(\text{TeBr}_2)_4\text{Br}_8$

|   |  |
|---|--|
| Summenformel  | $\text{Re}_4\text{Te}_8\text{Br}_{16}$   |
| Molmasse [g/mol]  | 3044,09  |
| F(000)  | 2552   |
| Kristallform  | schwarze Blöcke  |
| Kristallgröße   | $0,2 \times 0,15 \times 0,15$ mm   |
| Raumgruppe  | I4   |
| Kristallsystem  | tetragonal   |
| Gitterkonstanten  | $a = 1120,2(2)$  |
| bei $-60^\circ\text{C}$ [pm]                              | $c = 1393,5(3)$  |
| Volumen [ $\text{pm}^3$ ]                                 | $V = 1748,6(6) \cdot 10^6$   |
| Dichte [ $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ]                | $\rho_x = 5,782$   |
| Formeleinheiten   | $Z = 2$  |
| Meßmethode  | $\omega$ -Scans  |
| Meßtemperatur [ $^\circ\text{C}$ ]                        | $-60$  |
| Diffraktometer  | CAD4, Enraf-Nonius [13]  |
| Strahlung   | $\text{MoK}\alpha$ , $71,069$ pm   |
| Absorptionskoeffizient [ $\text{mm}^{-1}$ ]               | $\mu = 38,622$   |
| Methode der Absorptionskorrektur                          | DIFABS [16]  |
| min., max. Korrektur                                      | 0,823; 1,118   |
| Bereich von $h, k$ und $l$                                | $h: 0 \rightarrow 16; k: 0 \rightarrow 16; l: 0 \rightarrow 20$  |
| Zeitintervall der Intensitätskontrolle                    | 60 min, keine Zersetzung   |
| Gemessene Reflexe   | 1616   |
| $\theta$ Bereich  | $3 - 31^\circ$   |
| Unabhängige Reflexe; $R_{\text{int}}$                     | 1286; 0,042  |
| Verwendete, unabh. Reflexe mit $I \geq 2 \cdot \sigma(I)$ | 1145   |
| Lösung der Struktur                                       | Direkte Methoden [14] und Differenz-Fourier-Synthesen [15] mit $F^2$ , alle Atome anisotrop $1/[\sigma^2(F_o^2) + (0,0225 \cdot P)^2 + 588,3512 \cdot P]$ mit $P = (F_o^2 + 2F_c^2)/3$ |
| Verfeinerung  | 64   |
| Gütefaktoren  | $R1 = 0,070$<br>$wR2 = 0,159$  |
| Goof ( $F^2$ )  | 1,215  |
| Verwendete Programme                                      | SHELXS 86 [14], SHELXL93 [15]  |

gruppe  $I\bar{4}$  besetzen. Die vier Re-Atome und die vier  $\mu_3$ -verbrückenden Te-Atome sind in einer Heterocubanstruktur angeordnet. Zusätzlich zu den drei benachbarten Te-Atomen der Heterocubaneinheit koordiniert jedes Re-Atom noch zwei  $\text{Br}^-$ - und einen  $\text{TeBr}_2$ -Liganden, so daß sich für die Re-Atome unter Vernachlässigung der Re—Re-Bindungen die Koordinationszahl sechs in Form eines verzerrten Oktaeders ergibt. Die  $\text{TeBr}_2$ -Liganden sind über eines ihrer freien Elektronenpaare koordiniert; dabei resultiert eine pyramidale Struktur  $\text{TeBr}_2\text{Re}$ . Unter der Annahme, daß ungeladene  $\text{TeBr}_2$ -Liganden vorliegen, ergibt sich für die Re-Atome die Oxidationszahl +IV. Für die Re—Re-Bindungen verbleiben somit drei Elektronen pro Re-Atom, bzw. zwölf Elektronen für die Bindungen im  $\text{Re}_4$ -Cluster, wie dies auch bei den vergleichbaren Clustern  $[\text{Re}_4\text{X}_4(\text{CN})_{12}]^{4-}$  ( $\text{X} = \text{S}, \text{Se}$ ) [3],  $[\text{Re}_4\text{S}_4(\text{S}_3)_6]^{4-}$  [4, 5] und  $\text{Re}_4\text{S}_4\text{Te}_4$  [6] der Fall ist. Für die Annahme von Re—Re-Bindungen sprechen auch die Re—Re-Abstände von 277 und 283 pm (Tab. 2), die Einfachbindungen zugeordnet werden können, sowie der Diamagnetismus der Verbindung.

Es ist interessant, daß  $\text{TeBr}_2$ , das im festen Zustand instabil ist [9], durch Koordination am Metallzentrum stabilisiert werden kann. Im Gaszustand ist  $\text{TeBr}_2$  hingegen existent, so daß die Molekülstruktur durch Elektronenbeugung bestimmt werden konnte [10]. Die hierbei bestimmten Strukturparameter  $\text{Te}-\text{Br} = 251$  pm und  $\text{Br}-\text{Te}-\text{Br} = 98^\circ$  stimmen gut mit den in  $\text{Re}_4(\mu_3\text{-Te})_4(\text{TeBr}_2)_4\text{Br}_8$  gefundenen Werten ( $\text{Te}2-\text{Br}3 = 254$  pm,  $\text{Te}2-\text{Br}4 = 251$  pm,  $\text{Br}3-\text{Te}2-\text{Br}4 = 95,5^\circ$ , Tab. 2) überein.

Die drei Abstände Re—Te zum  $\mu_3$ -überbrückenden Tellurid-Liganden liegen im engen Bereich von 259 bis 261 pm. Sie entsprechen kovalenten Einfachbindungen. Deutlich länger ist hingegen der Abstand  $\text{Re}1-\text{Te}2 = 274$  pm zum koordinierten  $\text{TeBr}_2$ -Molekül.

Tabelle 2 Ausgewählte Abstände und Bindungswinkel in  $\text{Re}_4(\mu_3\text{-Te})_4(\text{TeBr}_2)_4\text{Br}_8$  Standardabweichungen in Klammern

| Abstände in pm                                |            |   |          |
|---|------------|---|----------|
| $\text{Re}(1)-\text{Te}(1)$                   | 260,5(4)   | $\text{Re}(1)-\text{Re}(1')$                  | 283,1(3) |
| $\text{Re}(1)-\text{Te}(1')$                  | 258,5(3)   | $\text{Re}(1)-\text{Re}(1'')$                 | 277,4(3) |
| $\text{Re}(1)-\text{Te}(1'')$                 | 259,2(4)   | $\text{Te}(2)-\text{Br}(3)$                   | 254,3(7) |
| $\text{Re}(1)-\text{Te}(2)$                   | 273,8(3)   | $\text{Te}(2)-\text{Br}(4)$                   | 250,9(7) |
| $\text{Re}(1)-\text{Br}(1)$                   | 264,0(5)   | $\text{Te}(2)-\text{Br}(1)$                   | 295,6(6) |
| $\text{Re}(1)-\text{Br}(2)$                   | 262,5(4)   | $\text{Te}(2)-\text{Br}(2)$                   | 291,6(5) |
| Winkel in Grad                                |            |   |          |
| $\text{Re}(1')-\text{Re}(1)-\text{Re}(1'')$   | 60,67(3)   | $\text{Re}(1)-\text{Te}(1)-\text{Re}(1')$     | 64,53(9) |
| $\text{Re}(1'')-\text{Re}(1)-\text{Re}(1''')$ | 60,67(3)   | $\text{Re}(1)-\text{Te}(1)-\text{Re}(1''')$   | 66,13(9) |
| $\text{Re}(1')-\text{Re}(1)-\text{Re}(1''')$  | 58,67(6)   | $\text{Re}(1'')-\text{Te}(1)-\text{Re}(1''')$ | 66,32(6) |
| $\text{Te}(1)-\text{Re}(1)-\text{Te}(1')$     | 108,17(9)  | $\text{Br}(3)-\text{Te}(2)-\text{Br}(4)$      | 95,5(2)  |
| $\text{Te}(1)-\text{Re}(1)-\text{Te}(1'')$    | 112,10(10) | $\text{Re}(1)-\text{Te}(2)-\text{Br}(3)$      | 107,5(2) |
| $\text{Te}(1')-\text{Re}(1)-\text{Te}(1'')$   | 108,58(9)  | $\text{Re}(1)-\text{Te}(2)-\text{Br}(4)$      | 108,3(2) |
| $\text{Br}(1)-\text{Re}(1)-\text{Br}(2)$      | 81,2(2)    |   |          |

Symmetriecodes: (')  $1 - x, y, -z$ ; (")  $1 - x, 1 - y, z$ ; ("" )  $x, 1 - y, -z$

**Tabelle 3** Ortsparameter und Temperaturparameter  $U_{ij}$  ( $\text{pm}^2 \cdot 10^{-1}$ ) der Atome in  $\text{Re}_4(\mu_3\text{-Te})_4(\text{TeBr}_2)_4\text{Br}_8$ . Die Faktoren  $U_{ij}$  entsprechen der Form:  $-2\pi^2[h^2a^2U_{11} + \dots + 2hka^2b^2U_{12}]$ . Standardabweichungen in Klammern

| Atom  | x         | y         | z          | $U_{11}$ | $U_{22}$ | $U_{33}$ | $U_{23}$ | $U_{13}$ | $U_{12}$ |
|-------|-----------|-----------|------------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| Re(1) | 0.3808(1) | 0.4665(1) | 0.0733(1)  | 10(1)    | 10(1)    | 7(1)     | 0(1)     | 2(1)     | -1(1)    |
| Te(1) | 0.5531(3) | 0.3151(3) | 0.1038(2)  | 21(1)    | 19(1)    | 14(1)    | 2(1)     | 0(1)     | -1(1)    |
| Te(2) | 0.2173(3) | 0.2984(3) | 0.1289(2)  | 17(1)    | 28(2)    | 19(1)    | 0(1)     | 7(1)     | -9(1)    |
| Br(1) | 0.1620(4) | 0.5516(5) | 0.0891(4)  | 13(2)    | 38(3)    | 31(3)    | 4(2)     | 6(2)     | 6(2)     |
| Br(2) | 0.3555(5) | 0.4472(5) | 0.2599(3)  | 28(2)    | 28(2)    | 8(2)     | -3(2)    | 8(2)     | -3(2)    |
| Br(3) | 0.3319(6) | 0.1099(5) | 0.1721(4)  | 49(3)    | 23(2)    | 28(3)    | 7(2)     | -7(3)    | -6(2)    |
| Br(4) | 0.1212(6) | 0.2137(6) | -0.0188(5) | 31(3)    | 38(3)    | 38(3)    | -4(3)    | -12(2)   | -16(2)   |

Ebenfalls mit kovalenten Einfachbindungen kann man die Abstände  $\text{Re1}-\text{Br1} = 264 \text{ pm}$  und  $\text{Re1}-\text{Br2} = 263 \text{ pm}$  interpretieren. Sie sind vergleichbar mit den Abständen im *fac*- $\text{ReBr}_3(\text{NCMe}_2\text{CH}_2\text{C}(\text{O})\text{Me})(\text{PMe}_2\text{Ph})_2$  ( $256-261 \text{ pm}$  [11]) und  $[\text{ReBr}_3(\text{CO})_3]^{2-}$  ( $256-266 \text{ pm}$  [12]).

### Experimentelle Angaben

#### Synthese von $\text{Re}_4(\mu_3\text{-Te})_4(\text{TeBr}_2)_4\text{Br}_8$

93 mg (0,5 mmol) Re (Aldrich, 99,995%), 383 mg (3 mmol) Te (Merck, 99%) und 480 mg (3 mmol)  $\text{Br}_2$  (Merck, 99%) werden in einer vorher ausgeheizten Glasampulle (Außendurchmesser 1,8 cm, Länge 20 cm) unter Vakuum abgeschmolzen. Die Ampulle wird innerhalb von ca. 30 min auf  $550^\circ\text{C}$  aufgeheizt und anschließend sehr langsam abgekühlt; und zwar zunächst im Verlauf von 12 h auf  $400^\circ\text{C}$  und dann in weiteren 36 h auf  $100^\circ\text{C}$ . Dieses Temperaturprogramm wird solange wiederholt, bis sich  $\text{Re}_4(\mu_3\text{-Te})_4(\text{TeBr}_2)_4\text{Br}_8$  in Form von schwarzen, dreieckigen Kristallen gebildet hat. Als Nebenprodukt entsteht außerdem  $\text{TeBr}_4$ . Da sich beide Produkte jedoch in getrennten Zonen abscheiden, kann  $\text{Re}_4(\mu_3\text{-Te})_4(\text{TeBr}_2)_4\text{Br}_8$  rein isoliert werden.

Analysen für  $\text{Re}_4(\mu_3\text{-Te})_4(\text{TeBr}_2)_4\text{Br}_8$ .  $\text{ReTe}_2\text{Br}_4$ , Molgew. 761,04: Br 43,11 (ber. 42,00)%

#### Reaktion von $\text{Re}_4(\mu_3\text{-Te})_4(\text{TeBr}_2)_4\text{Br}_8$ mit $\text{I}_2$

152 mg (0,05 mmol)  $\text{Re}_4(\mu_3\text{-Te})_4(\text{TeBr}_2)_4\text{Br}_8$  und 508 mg (2 mmol)  $\text{I}_2$  werden in einer unter Vakuum abgeschmolzenen Glasampulle 12 h auf  $300^\circ\text{C}$  erhitzt. Es entstehen rötlich durchscheinende, luftstabile Kristalle von  $\text{TeI}_4$ .

#### Bestimmung der Struktur

Nach der Bestimmung der Raumgruppe und der angenäherten Gitterkonstanten mit Buerger-Präzessionsaufnahmen der Schichten hk0, hk1, h0l und h1l wurde ein geeigneter Kristall von  $\text{Re}_4(\mu_3\text{-Te})_4(\text{TeBr}_2)_4\text{Br}_8$  bei  $-60^\circ\text{C}$  auf dem Einkristalldiffraktometer [13] mit monochromatischer  $\text{MoK}\alpha$ -Strahlung vermessen. Die Gitterkonstanten (Tab. 1) wurden anhand von 25 genau zentrierten Reflexen hoher Beugungswinkel durch eine Ausgleichsrechnung verfeinert. Die Registrierung der Reflexintensitäten erfolgte mit  $\omega$ -Scans.

Die Schweratomlagen ergaben sich aus Direkten Methoden [14]; die übrigen Atomlagen aus nachfolgenden Differenzfouriersynthesen [15]. Nach der Verfeinerung mit Faktoren für die isotrope Temperaturbewegung wurde eine empirische Absorptionskorrektur mit dem Programm DIFABS [16] durchgeführt. Die Verfeinerung wurde dann mit anisotropen Temperaturparametern für alle Atome fortgesetzt. Weitere Parameter der Struk-

turbestimmungen sind in Tab. 1 aufgeführt. In Tabelle 3 sind die Orts- und anisotropen Temperaturparameter angegeben.<sup>1)</sup>

Die Arbeit wurde von der Deutschen Forschungsgemeinschaft und dem Fonds der Chemischen Industrie großzügig finanziell unterstützt. E. Schulz Lang dankt dem DAAD für ein Promotionsstipendium.

### Literatur

- [1] F. A. Cotton, R. A. Walton, Multiple Bonds between Metal Atoms, John Wiley & Sons, New York 1982
- [2] A. Perrin, M. Sergent, New. J. Chem. **12** (1988) 337
- [3] M. Laing, P. M. Kiernan, W. P. Griffith, J. Chem. Soc., Chem. Commun. **1977**, 221
- [4] A. Müller, E. Krickemeyer, H. Bögge, Angew. Chem. **98** (1986) 258; Angew. Chem. Int. Ed. Engl. **25** (1986) 272
- [5] A. Müller, E. Krickemeyer, H. Bögge, Z. anorg. allg. Chem. **554** (1987) 61
- [6] V. E. Fedorov, Yu. V. Mironov, V. P. Fedin, Yu. I. Mironov, J. Struct. Chem. **35** (1994) 146
- [7] B. Krebs, V. Paulat, Acta Crystallogr. **B32** (1976) 1470
- [8] R. Kniep, H. J. Beister, D. Wald, Z. Naturforsch. **43b** (1988) 966
- [9] R. Kniep, A. Rabenau, Topics Current Chem. **111** (1983) 145
- [10] M. T. Rogers, R. A. Spurr, J. Am. Chem. Soc. **69** (1947) 2102
- [11] S. Ritter, U. Abram, Z. anorg. allg. Chem. **620** (1994) 1786
- [12] R. Alberto, R. Schibli, A. Egli, P. A. Schubiger, W. A. Herrmann, G. Artus, U. Abram, T. A. Kaden, J. Organomet. Chem. **493** (1995) 119
- [13] Automatisches Vierkreisdiffraktometer CAD4, Fa. Enraf-Nonius, Delft
- [14] G. M. Sheldrick, Acta Crystallogr. **A46** (1990) 467
- [15] G. M. Sheldrick, SHELXL93, Fortranprogramm zur Strukturverfeinerung, Göttingen 1993
- [16] N. Walker, D. Stuart, Acta Crystallogr. **A39** (1983) 158
- [17] E. Keller, SCHAKAL, Fortranprogramm zur graphischen Darstellung von Kristallstrukturen, Freiburg 1986

Anschr. d. Verf.:

Prof. Dr. J. Strähle, Priv.-Doz. Dr. U. Abram und E. Schulz-Lang  
Institut für Anorganische Chemie der Universität  
Auf der Morgenstelle 18  
D-72076 Tübingen

<sup>1)</sup> Weitere Einzelheiten zur Kristallstrukturuntersuchung können beim Fachinformationszentrum Karlsruhe, D-76344 Eggenstein-Leopoldshafen, unter Angabe der Hinterlegungsnummer CSD-58929 angefordert werden.