

- [1] J. H. Westbrook, R. L. Fleischer, *Intermetallic Compounds—Principles and Practice*, Vol. 2, Wiley, New York, 1995.
 [2] E. Vigouroux, C.R. *Hebd. Seances Acad. Sci.* **1905**, *141*, 828–830.
 [3] T. B. Massalski, *Binary Phase Alloy Diagrams*, ASM International, USA, 1992.
 [4] M. Binnewies, E. Milke, *Thermochemical Data of Elements and Compounds*, Wiley-VCH, Weinheim, 1999.
 [5] Eisendraht (99.5 %), Merck.
 [6] Siliciumtetrachlorid ($\geq 99\%$), Riedel-de-Haën; Strömungsgeschwindigkeit des Argons ca. 4 L h^{-1} .
 [7] Mikrosonde Camebax, Microbeam, Cameca, Institut für Mineralogie der Universität Hannover.

Goldpentafluorid: Struktur und Fluoridionenaffinität**

In-Chul Hwang und Konrad Seppelt*

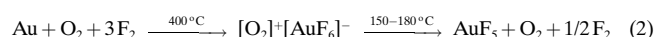
Unser Wissen über binäre Goldfluoride weist noch bemerkenswerte Lücken auf. AuF kann als Molekül nachgewiesen werden,^[1] und im Einklang mit neuesten Rechnungen beträgt die Bindungsenergie 73 kcal mol^{-1} .^[2] Alle Versuche zur Herstellung in kondensierter Phase sind bislang gescheitert. Es gibt mit $\text{F}_3\text{As}-\text{Au}\cdots\text{F}\cdots\text{SbF}_5$ überhaupt nur eine eindeutig charakterisierte Verbindung mit einer $\text{Au}^{\text{I}}\text{-F}$ -Wechselwirkung.^[3]

AuF_2 ist bislang noch nicht isoliert worden, obwohl Rechnungen ergeben, dass es als lineares Molekül existieren sollte.^[4] Ein Au^{II} -Ion in einer reinen Fluoridumgebung liegt in $\text{Au}(\text{SbF}_6)_2$ vor. Versuche zur Umwandlung in AuF_2 misslangen jedoch.^[5]

AuF_3 ist seit langem bekannt.^[6] Die Helixstruktur mit *cis*-Fluorbrücken zwischen nahezu quadratischen AuF_4 -Einheiten ist bemerkenswert und wird ein zweites Mal nur noch bei AgF_3 beobachtet.^[7,8] Salze mit dem $[\text{AuF}_4]^-$ -Ion sind wahrscheinlich die stabilsten Goldfluoride.^[6,9] Ein gemischtvalentes Au_3F_8 ist offensichtlich als $\text{Au}(\text{AuF}_4)_2$ zu formulieren.^[10]

Die Existenz von AuF_4 , hergestellt aus Au und F_2 im Nickelreaktor bei 500°C , ist sehr zweifelhaft.^[11] Die Reproduktion dieser Synthese unter ähnlichen Bedingungen lieferte NiF_2 ^[12] und $\text{Ni}(\text{AuF}_4)_2$,^[13] wie durch Röntgenpulveraufnahmen gezeigt wurde.^[12]

Goldpentafluorid wurde kurz nach der erstmaligen Herstellung der Hexafluoroaurate(v) $[\text{Xe}_2\text{F}_{11}]^+[\text{AuF}_6]^-$,^[11] $\text{Cs}^+[\text{AuF}_6]^-$,^[14] $[\text{O}_2]^+[\text{AuF}_6]^-$ ^[14,15] und $[\text{KrF}]^+[\text{AuF}_6]^-$ ^[16] erhalten. Es wird durch thermische Zersetzung von $[\text{O}_2]^+[\text{AuF}_6]^-$ oder $[\text{KrF}]^+[\text{AuF}_6]^-$ hergestellt [Gl. (1) bzw. (2)].^[16,17]



[*] Prof. Dr. K. Seppelt, I.-C. Hwang
 Institut für Anorganische und Analytische Chemie
 der Freien Universität Berlin
 Fabeckstraße 34–36, 14195 Berlin (Deutschland)
 Fax: (+49) 30-8384289
 E-mail: seppelt@chemie.fu-berlin.de

[**] Diese Arbeit wurde von der Deutschen Forschungsgemeinschaft und vom Fonds der Chemischen Industrie gefördert.

Schließlich sollte nach unseren Ab-initio- und Dichtefunktionaltheorie(DFT)-Rechnungen AuF_6 nicht existieren, weder als oktaedrisches noch als nichtoktaedrisches Molekül.

AuF_5 ist ein extremes Oxidations- und Fluorierungsmittel, was die Handhabung sehr erschwert. Dagegen sind Salze mit $[\text{AuF}_6]^-$ -Ionen recht stabil. So kann $[\text{O}_2]^+[\text{AuF}_6]^-$ aus wasserfreier HF umkristallisiert werden und reagiert auch nicht mit HF/SbF₅-Lösungen, ein erster Hinweis auf die hohe Acidität des Systems HF/AuF₅.

Die Einkristallstrukturanalyse (Abbildung 1) zeigt geordnete $[\text{O}_2]^+$ - und oktaedrische $[\text{AuF}_6]^-$ -Ionen in einer fast regulären rhomboedrischen Elementarzelle.^[18]

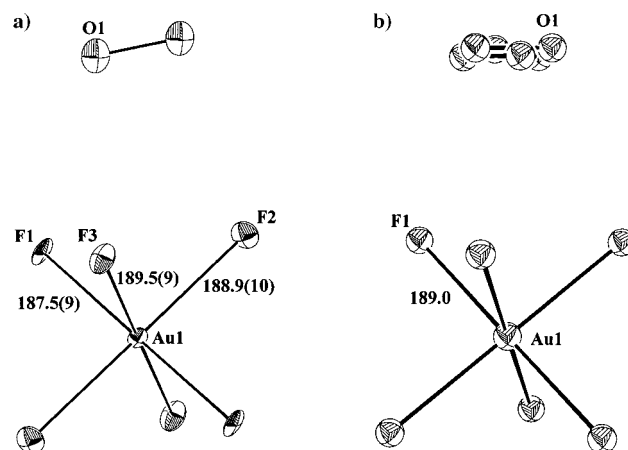


Abbildung 1. ORTEP-Darstellungen einer $[\text{O}_2]^+[\text{AuF}_6]^-$ -Einheit in der triklinen (a) und in der rhomboedrischen, fehlgeordneten (b)^[15] Kristallstruktur, Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Gezeigt ist eine Moleküleinheit mit dem kürzesten interionischen Abstand. Abstände in pm. Atome ohne Bezeichnung werden durch das Symmetriezentrum erzeugt.

Die Hochtemperaturphase von $[\text{O}_2]^+[\text{AuF}_6]^-$ ist dagegen regulär rhomboedrisch, wodurch sich zwangsläufig eine dreifache Fehlordnung der $[\text{O}_2]^+$ -Ionen um ihren Schwerpunkt herum ergibt, wie schon früher festgestellt wurde.^[15] Dieser rhomboedrisch-trikline Phasenübergang ist ein sehr einfacher Ordnungsprozess, da er im Wesentlichen nur das Kation betrifft. Die Bestimmung des O-O-Abstandes in $[\text{O}_2]^+$ -Salzen ist wegen teilweiser oder gänzlicher Fehlordnung oft problematisch, und es werden Werte zwischen 95.0 und 121.6 pm gefunden.^[15,19–21] Hier wird mit 107.9(27) pm ein Wert erhalten, der zwar immer noch einen beträchtlichen Fehler aufweist, aber bereits nahe am Wert für das freie $[\text{O}_2]^+$ -Ion (112.3 pm) liegt.^[22]

Wir haben AuF_5 nach der zweiten Methode [Gl. (2)] hergestellt, und Einkristalle durch Sublimation erhalten. Die Kristallstrukturanalyse zeigt, dass AuF_5 in festem Zustand dimer vorliegt (Abbildung 2).^[23] AuF_5 ist offensichtlich das einzige Pentafluorid mit dimerer Struktur. Sonst sind Pentafluoride entweder monomer (P ,^[24] As ,^[25] Cl ,^[26] Br ,^[27] I ^[27,28]), tetramer^[29,30] (Nb ,^[31] Ta ,^[31] Cr ,^[32] Mo ,^[33] W ,^[34] Tc ,^[35] Re ,^[36] Ru ,^[37] Os ,^[38] Rh ,^[39,40] Ir ,^[41] Pt ^[42,43]) oder polymer (Bi ,^[44] V ,^[36] $\alpha\text{-UF}_5$,^[45] $\beta\text{-UF}_5$ ^[46]).

Gasförmiges AuF_5 ist offenbar ebenfalls stark assoziiert.^[47] Eine Strukturbestimmung durch Elektronenbeugung ergab

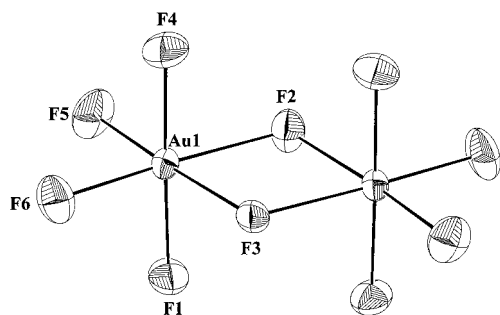


Abbildung 2. ORTEP-Darstellung des Dimers $(\text{AuF}_5)_2$ im Kristall. Schwingungsellipsoide repräsentieren 50% Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Atome ohne Bezeichnung werden durch eine Spiegelebene erzeugt. Abstände und Winkel siehe Tabelle 1.

ein Gemisch aus Dimer und Trimer im Verhältnis 82:18.^[48] Die Strukturdaten für das gasförmige Dimer stimmen mit unseren Kristallstrukturdaten gut überein (Tabelle 1). In dieser doppelt fluorverbrückten Struktur kommen sich die beiden Goldatome bis auf 313.5 pm recht nahe, nach unseren Rechnungen besteht hier aber keine Gold-Gold-Wechselwirkung, wie es bei niedervalenten Goldverbindungen oft der

Tabelle 1. Abstände [pm] und Winkel $^\circ$ im $(\text{AuF}_5)_2$ -Molekül gemäß Kristallstrukturanalyse sowie Werte für die Gasstruktur (Elektronenbeugung) und Ergebnisse der Ab-initio-Rechnung.

	Kristallstruktur	Elektronenbeugung ^[a]	Ab-initio-Rechnung
Au-F1, Au-F4	189.1(6), 190.1(5)	188.9(9)	196.5
Au-F2, Au-F3	201.3(5), 203.1(5)	203.0(7)	207.7
Au-F5, Au-F6	185.4(6), 187.5(6)	182.2(8)	192.5
F2-Au-F3	78.4(2)	80.1(5)	79.0
F1-Au-F4 ^[b]	178.5(3)	181.0(11)	179.3
F5-Au-F6	87.0(3)	92.3(17)	96.2

[a] Siehe Lit. [48]. [b] Gemessen über der Ringmitte.

Fall ist. Ein früherer Versuch zur Kristallstrukturanalyse von AuF_5 aus Pulverdaten ergab eine hexagonale Zelle ganz anderer Metrik und möglicherweise eine spiralförmige polymere AuF_6 -Kette als Strukturmotiv. Da die $\text{Au}\cdots\text{Au}$ -Abstände selbst für eine lineare Au-F-Au -Brücke mit 424 pm extrem groß wären, ist das Strukturmodell anzuzweifeln.^[49] Gegen die Existenz verschiedener Modifikationen im festen Zustand spricht auch, dass das Raman-Spektrum unabhängig von der Temperatur immer einheitlich und auffallend bandenarm ist (siehe *Experimentelles* und Lit. [17, 49]).

Die Dimerisierungsenergie zweier AuF_5 -Moleküle, die im Übrigen quadratisch-pyramidal aufgebaut zu sein scheinen, wurde zu $-70.1 \text{ kcal mol}^{-1}$ berechnet.^[50] Daraus kann man qualitativ schließen, dass AuF_5 eine sehr hohe Fluoridionenaffinität haben sollte. Kürzlich haben Christe et al. eine quantitative Lewis-Säureskala aufgestellt, die auf Fluoridionenaffinitäten basiert, welche durch Ab-initio-Methoden errechnet wurden.^[51] Typische Werte sind 83.1 (BF_3), 94.9 (PF_5), 105.9 (AsF_5), 114.6 (AlCl_3), 115.0 (AlF_3) und $120.3 \text{ kcal mol}^{-1}$ (SbF_5). Der Rekord von SbF_5 wird von

AuF_5 und $(\text{AuF}_5)_2$ mit 141.2 bzw. $128.8 \text{ kcal mol}^{-1}$ überboten. Um die Konkurrenz von AuF_5 und SbF_5 um ein F^- -Ion zu beschreiben, haben wir auch die Struktur des bislang unbekannten zweikernigen Anions $[\text{F}_5\text{Au}\cdots\text{F}\cdots\text{SbF}_5]^-$ berechnet (Abbildung 3). Hier ergibt sich, dass das verbrückende

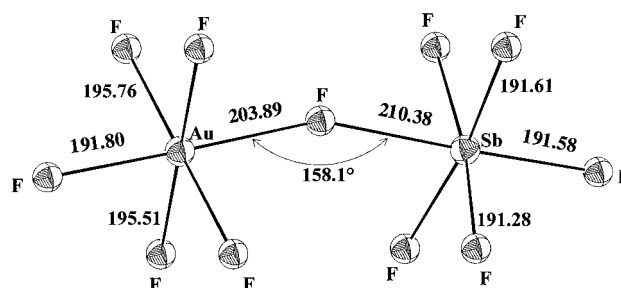


Abbildung 3. Berechnete Struktur des $[\text{AuSbF}_{11}]^-$ -Ions. Abstände in pm.

Fluoratom deutlich dichter am Gold- als am Antimonatom positioniert ist, trotz des größeren Ionenradius des Goldatoms. Die Struktur wird somit am besten als $[\text{AuF}_6]^- \cdot \text{SbF}_5$ beschrieben.

So kann man annehmen, dass eine HF/AuF_5 -Lösung eine stärkere Brønsted-Säure als die stärkste bisher bekannte HF/SbF_5 -Lösung ist.^[52] Allerdings ist die extreme Acidität der HF/AuF_5 -Lösung auch der Grund, warum AuF_5 sich in HF unter Bildung von AuF_3 und F_2 zersetzt. Bekanntlich sind hohe Oxidationsstufen in saurer Lösung destabilisiert.^[5] Wären HF/AuF_5 -Lösungen nicht so instabil, könnten sie für Protonierungen verwendet werden, die sonst nicht einmal mit HF/SbF_5 möglich sind.

Experimentelles

$[\text{O}_2]^+[\text{AuF}_6]^-$ wird wie in Lit. [14, 15] beschrieben hergestellt. Nach Abkühlung (0.05 K min^{-1}) von 400°C auf Raumtemperatur erhält man nach dem Ablassen des O_2/F_2 -Drucks würfelförmige, hellgelbe Kristalle, die sich im inneren oberen Teil des Monelautoklaven durch Sublimation gebildet haben. Einkristalle von $[\text{O}_2]^+[\text{AuF}_6]^-$ entstehen durch Umkristallisation aus wasserfreier HF beim Abkühlen von 50 auf 20°C oder aus HF/SbF_5 beim Abkühlen von 20 auf -18°C . Raman-Spektrum (1064 nm , 200 mW, Raumtemperatur, krist.): $\tilde{\nu} = 1833, 595, 228 \text{ cm}^{-1}$. Kristallstrukturanalyse:^[18] Mit einer Spezialapparatur^[53] wird ein geeigneter Kristall auf einen Bruker-SMART-CCD-1000-TM-Diffraktometer montiert und vermessen. Strukturlösung und Verfeinerung wurden mit den SHELX-Programmen^[54, 55] durchgeführt.

$(\text{AuF}_5)_2$: In einem 80 cm langen Perfluorethylenpropylen (FEP)-Pyrolyserohr wird 1 g $[\text{O}_2]^+[\text{AuF}_6]^-$ im Handschuhkasten eingewogen. Das Pyrolyserohr wird nun an eine Metallvakuumapparatur angeschlossen und von außen auf -20°C gekühlt. Danach wird bei 180°C im Hochvakuum 15 Stunden pyrolysiert. Dabei werden in der Kühlzone bei 60°C ein gelber Feststoff, bei 25°C eine rote, dickflüssige Phase und bei 0°C braunrote, plättchenförmige Kristalle gebildet. Nach der vollständigen Pyrolyse wird das Rohr abgeschmolzen. Raman-Spektren identifizieren den gelben Feststoff als $[\text{O}_2]^+[\text{AuF}_6]^-$, die rote, dickflüssige Phase und die braunroten Kristalle werden als AuF_5 identifiziert. AuF_5 ist in wasserfreier HF unterhalb 0°C unlöslich, oberhalb 0°C zerfällt es zu AuF_3 und F_2 . Raman-Spektrum (-100°C , 1064 nm , 70 mW, relative Intensitäten in Klammern): $\tilde{\nu} = 654$ (60), 596 (100), 501 (5), 279 (3), 254 (2), 239 (7), 228 (3), 220 (7), 213 (1), 178 cm^{-1} (1). Kristallstrukturanalyse:^[23] Messung wie oben beschrieben.

Weitere Einzelheiten zu den Kristallstrukturuntersuchungen können beim Fachinformationszentrum Karlsruhe, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen (Fax: (+49) 7247-808-666; E-mail: crysdata@fiz-karlsruhe.de), unter den

Hinterlegungsnummern CSD-411864 ($[\text{O}_2]^+[\text{AuF}_6]^-$) und -411877 ($(\text{AuF}_5)_2$) angefordert werden.

Eingegangen am 10. Mai 2001 [Z17077]

- [1] D. Schröder, J. Krušák, I. C. Thornieport-Oetting, T. M. Klapötke, H. Schwarz, *Angew. Chem.* **1994**, 106, 223–225; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1994**.
- [2] P. Schwerdtfeger, J. S. McFlaters, R. L. Stephens, M. I. Liddell, M. Dolg, B. A. Hess, *Chem. Phys. Lett.* **1994**, 218, 362.
- [3] R. Küster, K. Seppelt, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2000**, 626, 236–240.
- [4] P. Schwerdtfeger, J. S. McFeaters, M. J. Liddell, *J. Chem. Phys.* **1995**, 103, 245–251.
- [5] S. M. Elder, G. M. Lucier, F. J. Hollander, N. Bartlett, *J. Am. Chem. Soc.* **1997**, 119, 1020–1026.
- [6] A. G. Sharpe, *J. Chem. Soc.* **1949**, 2901–2902.
- [7] F. W. B. Einstein, P. R. Rao, J. Trotter, N. Bartlett, *J. Chem. Soc. A* **1967**, 478–482.
- [8] B. Zemva, K. Lutar, A. Jesih, W. G. Casteel, Jr., A. P. Wilkinson, D. E. Cox, R. B. Von Dreele, H. Borrmann, N. Bartlett, *J. Am. Chem. Soc.* **1991**, 113, 4192–4198.
- [9] R. Hoppe, W. Klemm, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **1952**, 68, 2, 364.
- [10] O. Graudejus, A. P. Wilkinson, N. Bartlett, *Inorg. Chem.* **2000**, 39, 1545–1548.
- [11] K. Leary, N. Bartlett, *J. Chem. Soc. Chem. Commun.* **1972**, 903–904.
- [12] W. Tauch, A. Palmer, A. J. Schultz, *Acta Crystallogr. Sect. B* **1993**, 49, 984–987.
- [13] H. Bialowons, B. G. Müller, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **1997**, 623, 434–438.
- [14] N. Bartlett, K. Leary, *Rev. Chim. Miner.* **1976**, 13, 82–97.
- [15] O. Graudejus, B. G. Müller, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **1996**, 622, 1076–1082.
- [16] J. H. Holloway, G. J. Schrobilgen, *J. Chem. Soc. Chem. Commun.* **1975**, 623–624.
- [17] M. J. Vasile, T. J. Richardson, F. A. Stevie, W. E. Falconer, *J. Chem. Soc. Dalton Trans.* **1976**, 351–353.
- [18] $[\text{O}_2]^+[\text{AuF}_6]^-$: $a = 493.3(1)$, $b = 497.3(2)$, $c = 500.6(2)$ pm, $\alpha = 101.32(1)^\circ$, $\beta = 90.63(1)^\circ$, $\gamma = 102.09(1)^\circ$, $V = 117.6 \times 10^6$ pm³, $T = 169^\circ\text{C}$, triklin, Raumgruppe $P\bar{1}$, $Z = 2$, $\text{Mo}_{\text{K}\alpha}$, $\lambda = 71.069$ pm, $\rho_{\text{ber}} = 4.84$ g cm⁻³, $2\theta_{\text{max}} = 61.3^\circ$, 1800 gemessene Schichten in $0.3^\circ\omega$ -Schritten, 1452 gemessene, 705 unabhängige Reflexe ($R_{\text{int}} = 0.05$), Absorptionskorrektur durch Äquilibration symmetriegleicher Reflexe, $T_{\text{max}} = 1.0$, $T_{\text{min}} = 0.202$, 44 Parameter, $R_1 = 0.0556$, $wR_2 = 0.1406$.
- [19] J. A. Ibers, W. C. Hamilton, *J. Chem. Phys.* **1966**, 44, 1748–1752.
- [20] N. Bartlett, D. H. Lohmann, *Proc. Chem. Soc. London* **1962**, 115–116.
- [21] B. G. Müller, *J. Fluorine Chem.* **1981**, 17, 409–421; B. G. Müller, *J. Fluorine Chem.* **1981**, 17, 489–499.
- [22] G. Herzberg, *Molecular Spectra and Molecular Structure, Vol. 1, Spectra of Diatomic Molecules*, 2. Aufl., van Nostrand Reinhold, New York, **1950**, S. 560.
- [23] $(\text{AuF}_5)_2$: $a = 936.6(1)$, $b = 1505.2(2)$, $c = 484.0(2)$ pm, $V = 682.3 \times 10^6$ pm³, $T = -133^\circ\text{C}$ orthorhombisch, Raumgruppe $Pnma$, $Z = 8$, $\text{Mo}_{\text{K}\alpha}$, $\lambda = 71.069$ pm, $\rho_{\text{ber}} = 5.68$ g cm⁻³, $2\theta_{\text{max}} = 61.0^\circ$, 1800 gemessene Schichten in $0.3^\circ\omega$ -Schritten, 8420 gemessene, 1068 unabhängige Reflexe ($R_{\text{int}} = 0.099$), Absorptionskorrektur durch Äquilibration symmetriegleicher Reflexe, $T_{\text{max}} = 1.0$, $T_{\text{min}} = 0.4846$, 59 Parameter, $R_1 = 0.0334$, $wR_2 = 0.0806$.
- [24] D. Mootz, M. Wiebcke, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **1987**, 545, 39–42.
- [25] J. Köhler, A. Simon, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **1989**, 575, 55–60.
- [26] D. F. Smith, *Science* **1963**, 141, 1039–1040.
- [27] R. D. Burbank, F. N. Bensey, Jr., *J. Chem. Phys.* **1957**, 27, 982–983.
- [28] R. D. Burbank, G. R. Jones, *Inorg. Chem.* **1974**, 13, 1071–1074.
- [29] T. K. Davies, K. C. Morss, *J. Chem. Soc. A* **1970**, 1054.
- [30] A. J. Edwards, P. Taylor, *J. Chem. Soc. Chem. Commun.* **1971**, 1376.
- [31] A. J. Edwards, *J. Chem. Soc.* **1964**, 3714–3718.
- [32] A. J. Edwards, *Proc. Chem. Soc.* **1963**, 205.
- [33] A. J. Edwards, P. D. Peacock, R. W. H. Small, *J. Chem. Soc.* **1964**, 644–648.
- [34] A. J. Edwards, *J. Chem. Soc. A* **1969**, 909.
- [35] A. J. Edwards, D. Hugill, R. D. Peacock, *Nature* **1963**, 200, 672.
- [36] A. J. Edwards, G. R. Jones, *J. Chem. Soc. A* **1969**, 1651–1654.
- [37] J. H. Holloway, R. D. Peacock, R. W. H. Small, *J. Chem. Soc.* **1964**, 644–648.
- [38] S. J. Mitchell, J. H. Holloway, *J. Chem. Soc. A* **1971**, 2789–2794.
- [39] K. Morrell, A. Zalkin, A. Tressaud, N. Bartlett, *Inorg. Chem.* **1973**, 12, 2640–2644.
- [40] J. H. Holloway, P. R. Rao, N. Bartlett, *Chem. Commun.* **1965**, 306.
- [41] N. Bartlett, P. R. Rao, *Chem. Commun.* **1965**, 252–253.
- [42] N. Bartlett, D. H. Lohmann, *J. Chem. Soc.* **1964**, 619–626.
- [43] B. G. Müller, M. Serafin, *Eur. J. Solid State Inorg. Chem.* **1992**, 29, 625–633.
- [44] N. Bartlett, F. Einstein, D. F. Stewart, J. Trotter, *Chem. Commun.* **1966**, 550–552.
- [45] P. Garyeller, A. C. Larson, P. Peterson, D. D. Ensor, J. P. Young, *Inorg. Chim. Acta* **1979**, 37, 129–133.
- [46] J. C. Taylor, A. B. Waugh, *J. Solid State Chem.* **1980**, 35, 137–140.
- [47] M. G. Vasile, T. J. Richardson, F. A. Stevie, W. E. Falconer, *J. Chem. Soc. Dalton Trans.* **1976**, 351.
- [48] J. Brunvoll, A. A. Ischenko, A. A. Ivanovo, G. V. Romanov, V. B. Sokolov, V. P. Spiridonov, T. G. Strand, *Acta Chem. Scand. A* **1982**, 36, 705–709.
- [49] Y. M. Kiseler, A. I. Popov, A. V. Gorynnor, N. A. Chumayevskii, L. N. Savinova, V. B. Sokolov, S. N. Spirin, *Zh. Neorg. Khim.* **1990**, 35, 345–349 (*Russ. J. Inorg. Chem.*).
- [50] Gaussian 98 (Revision A.7), M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, V. G. Zakrzewski, J. A. Montgomery, R. E. Stratmann, J. C. Burant, S. Dapprich, J. M. Millam, A. D. Daniels, K. N. Kudin, M. C. Strain, O. Farkas, J. Tomasi, V. Barone, M. Cossi, R. Cammi, B. Mennucci, C. Pomelli, C. Adamo, S. Clifford, J. Ochterski, G. A. Petersson, P. Y. Ayala, Q. Cui, K. Morokuma, D. K. Malick, A. D. Rabuck, K. Raghavachari, J. B. Foresman, J. Cioslowski, J. V. Ortiz, A. G. Baboul, B. B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R. Gomperts, R. L. Martin, D. J. Fox, T. Keith, M. A. Al-Laham, C. Y. Peng, A. Nanayakkara, C. Gonzalez, M. Challacombe, P. M. W. Gill, B. G. Johnson, W. Chen, M. W. Wong, J. L. Andres, M. Head-Gordon, E. S. Replogle, J. A. Pople, Gaussian, Inc., Pittsburgh, PA, **1998**. Fluor: Basissatz 6-31+G(d,p), Gold: relativistisch korrigierter 6s5p3d-Basisatz und Pseudopotentiale für 60 Rumpfelektronen (Institut für Theoretische Chemie, Universität Stuttgart).
- [51] MP2-Rechnung mit PDZ-Basisatz und effektiven Rumpfpotentialen für die schweren Elemente: K. O. Christe, D. A. Dixon, D. Mc Lennore, W. W. Wilson, J. A. Sheekey, J. A. Boat, *J. Fluorine Chem.* **2000**, 101, 151–153.
- [52] R. J. Gillespie, K. C. Moss, *J. Chem. Soc. A* **1966**, 1170.
- [53] H. Schumann, W. Genthe, E. Hahn, M.-B. Hossein, D. van der Helm, *J. Organomet. Chem.* **1986**, 28, 2561–2567.
- [54] G. Sheldrick, Program for Crystal Structure Solution, Universität Göttingen, **1986**.
- [55] G. Sheldrick, Program for Crystal Structure Refinement, Universität Göttingen, **1993**.