

## 79. Herstellung, Kristallstruktur und magnetische Eigenschaften von Bis(1,2-benzochinondiimid)-1,2-benzosemichinondiimidokobalt(II)-tetraphenylborat-pentahydrat

von **Margareta Zehnder**

Institut für Anorganische Chemie der Universität, Spitalstrasse 51, CH-4056 Basel

und **Hans Löliger**

Zentrale Funktion Forschung, Physik Klybeck, Ciba-Geigy AG, CH-4002 Basel

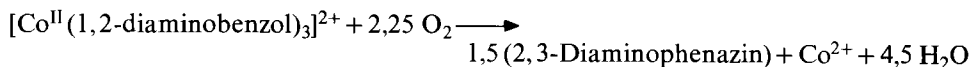
(5. II. 80)

### Synthesis, Crystal Structure, and Magnetic Properties of Bis(1,2-benzoquinonediimide)-1,2-benzosemiquinonediimidocobalt(II)-tetraphenylborate-pentahydrate

#### Summary

Co(II)-salts catalyze the autoxidation of 1,2-diaminobenzene in slightly alkaline solution. Deeply coloured metal complexes are formed during the reaction suggesting intermediate radical or semiquinonediimide stages of the aromatic ligands. Starting from  $[\text{Co}^{\text{II}}(1,2\text{-diaminobenzene})_3](\text{ClO}_4)_2$  two different intermediate complexes can be isolated, the magnetic properties of which point to a high-spin cobalt(II)-complex and a low-spin cobalt(II)-complex with a radical ligand respectively. The X-ray structure determination of the latter complex yielded a square pyramidal arrangement, the Co-N<sub>4</sub>-plane distance being only 0.5 Å. The dark blue coloured complex is diamagnetic. Two of the aromatic ligands have the oxidation state of a benzoquinonediimide while the third, coordinated by one amino group only, is pseudosemiquinonoid. Crystals of C<sub>42</sub>H<sub>48</sub>BCoN<sub>6</sub>O<sub>5</sub> are monoclinic,  $a = 14.493(5)$ ,  $b = 18.341(7)$ ,  $c = 15.492(5)$  Å,  $\beta = 99.198(5)$ , space group  $P2_1/n$ .  $D_{\text{obs.}} = 1.290$ ,  $D_{\text{calc.}} = 1.289$  g/cm<sup>3</sup> for  $Z = 4$ . The structure was solved by *Patterson's* method and refined by least-squares techniques to  $R = 0.088$  for 2866 of 5014 independent reflexions.

Die Co<sup>2+</sup>-katalysierte Oxydation von 1,2-Diaminobenzol zu 2,3-Diaminophenazin verläuft über intermediäre Metallkomplexe. Ausgehend von  $[\text{Co}^{\text{II}}(1,2\text{-diaminobenzol})_3]^{2+}$ , das unter anaeroben Bedingungen als Perchlorat gefasst werden kann, lässt sich die Reaktion mit der *Clark*-Elektrode<sup>1)</sup> oxymetrisch verfolgen.



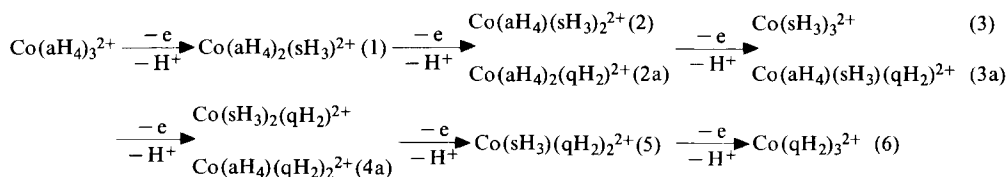
Die blausviolette Lösung von  $[\text{Co}^{\text{II}}(1,2\text{-diaminobenzol})_3]^{2+}$  nimmt unter rascher Aufnahme von 1,25 Mol-Äquiv. O<sub>2</sub> eine tief blauviolette Färbung an. Danach beobachtet man einen langsamen Verbrauch von einem weiteren Mol-Äquiv. O<sub>2</sub>. Unter sehr vorsichtiger Oxygenierung von  $[\text{Co}^{\text{II}}(1,2\text{-diaminobenzol})_3]^{2+}$  in äthanolischer Lösung gelang es, zwei der gebildeten Intermediärkomplexe zu isolieren.

<sup>1)</sup> O<sub>2</sub>-Verbrauch mittels *Beckman* Field Lab Oxygen Analyzer auf 5% genau.

Tabelle 1. *Magnetische Eigenschaften von A, B und C*

Verbindung	Farbe	Magnetisches Moment $\mu_m$ [B.M.]	g-Wert
A	blass rosaviolett	$4,8 \pm 0,2$	$4,18 \pm 0,2$
B	tiefviolett	$4,3 \pm 0,2$	$4,18 \pm 0,2$
C	tiefblau	-	-

Dass es sich bei diesen Komplexverbindungen tatsächlich um Zwischenprodukte der  $\text{Co}^{2+}$  katalysierten Oxydation von 1,2-Diaminobenzol handelt, konnte gezeigt werden, indem nach Auflösen der Festkörper und weiterer  $\text{O}_2$ -Zugabe dasselbe Endprodukt nachgewiesen wurde. Die Ausgangsverbindung soll in der Folge mit A die beiden Intermediärkomplexe mit B und C abgekürzt werden; B und C unterscheiden sich in ihrem magnetischen Verhalten. B zeigt ein magnetisches Moment  $\mu_{\text{eff}} = 4,3$  B.M. und ein ESR.-Signal bei  $g = 4,18$ , das nur bei tiefen Temperaturen (die Messung wurde bei 77 K durchgeführt) beobachtet werden kann. C, dessen Kristalle von genügender Qualität waren, um eine Röntgenbeugungsanalyse durchzuführen, ist diamagnetisch. Die Strukturbestimmung, die im weiteren Teil dieser Arbeit detailliert beschrieben wird, ergab für C ein pentakoordiniertes Komplexkation mit quadratisch pyramidalen Geometrie. Im Gegensatz zu A und B ist kristallines C über Wochen luftstabil. Der Oxydationsprozess kann zunächst schematisch als eine Reihe von sukzessiven Einelektronenoxydationsschritten der individuellen Liganden im mononuklearen Co-Komplex dargestellt werden. Bezeichnet man die drei verschiedenen Oxydationsstufen des Liganden mit  $\text{aH}_4$  (1,2-diaminobenzol),  $\text{sH}_3$  (1,2-benzosemichinondiimid) und  $\text{qH}_2$  (1,2-benzochinondiimid), so ergibt sich folgendes formales Reaktionsschema:



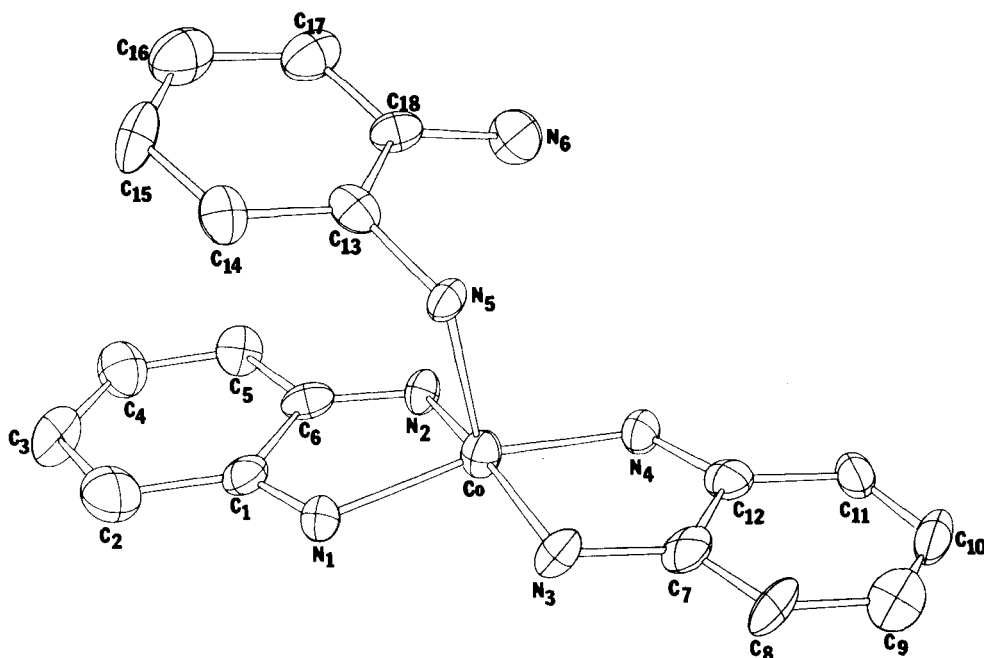
Die Elementaranalysen ergeben sowohl für B als auch für C einfach positiv geladene Komplex-Ionen. Die isolierten Verbindungen müssen dementsprechend einfach deprotonierte Teilchen der Reaktionsstufen (1)–(6) enthalten.

Das magnetische Verhalten von C weist, unter der Voraussetzung, dass es sich um einen mononuklearen Komplex handelt, auf eine Spezies mit *gerader* Elektronenzahl hin. Für C kommen deshalb beispielsweise die Teilchen  $\text{Co}(\text{aH}_4)_2(\text{sH}_2)^+$ ,  $\text{Co}(\text{sH}_3)_2(\text{sH}_2)^+$  oder  $\text{Co}(\text{sH}_2)(\text{qH}_2)_2^+$  in Frage. Die Molekelstruktur zeigt, dass für C mit grosser Wahrscheinlichkeit die Formulierung  $\text{Co}(\text{sH}_2)(\text{qH}_2)_2^+$  zutrifft. *Figur 1* zeigt eine ORTEP-Darstellung des Kations. Die N,C-Abstände (*Tab. 3*) der chinoiden Liganden in der  $\text{N}_4$ -Ebene sind signifikant kürzer als die N,C-Abstände im einfach gebundenen Liganden. Die  $\text{C}_2, \text{C}_3, \text{C}_4, \text{C}_5, \text{C}_8, \text{C}_9$ - und  $\text{C}_{10}, \text{C}_{11}$ -Abstände sind kürzer als die übrigen C,C-Abstände in den chinoiden Liganden und bestätigen den Oxydationszustand des aromatischen Amins. Im

Tabelle 2. Lage- und Temperaturparameter der schwereren Atome  
 Die Temperaturfaktoren haben die Form  $T = \exp\{-2\pi^2(U_{11}h^2a^* + \dots + 2U_{23}klb^*c^*)\}$

Atom	x	y	z	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
Kation									
Co	0,5635(1)	0,3927(1)	0,9716(1)	0,0391(1)	0,0547(1)	0,0374(1)	-0,0003(1)	0,0043(1)	-0,0064(1)
N(1)	0,4385(7)	0,4096(6)	0,9823(7)	0,0460(6)	0,0496(7)	0,0389(6)	0,0085(5)	0,0110(5)	0,0004(5)
N(2)	0,5809(7)	0,3926(6)	1,0929(6)	0,0333(5)	0,0511(6)	0,0372(5)	-0,0001(5)	0,0063(4)	-0,0032(5)
N(3)	0,5508(8)	0,4166(6)	0,8501(7)	0,0489(6)	0,0614(6)	0,0380(6)	0,0038(5)	0,0014(5)	-0,0183(5)
N(4)	0,6899(7)	0,4078(6)	0,9685(7)	0,0492(6)	0,0535(6)	0,0372(5)	0,0048(5)	-0,0024(5)	-0,0021(5)
N(5)	0,5477(7)	0,2814(6)	0,9484(6)	0,0537(6)	0,0845(6)	0,0314(6)	0,0034(4)	0,0214(5)	-0,0062(5)
N(6)	0,6864(8)	0,2423(7)	1,0871(8)	0,0414(6)	0,0808(7)	0,0660(7)	0,0096(6)	-0,0176(5)	-0,0040(5)
C(1)	0,4199(9)	0,4012(7)	1,0627(9)	0,0447(7)	0,0307(7)	0,0489(7)	0,0028(6)	0,0040(5)	-0,0068(5)
C(2)	0,3281(9)	0,4013(7)	1,0924(9)	0,0660(7)	0,0664(7)	0,1030(8)	-0,0220(7)	0,0167(6)	0,0036(6)
C(3)	0,3241(9)	0,3900(9)	1,1811(9)	0,0778(8)	0,0608(7)	0,0548(7)	-0,0185(7)	0,0443(6)	-0,0078(7)
C(4)	0,4082(9)	0,3778(9)	1,2402(9)	0,0621(8)	0,0782(8)	0,0603(8)	-0,0231(7)	0,0201(7)	-0,0091(7)
C(5)	0,4926(9)	0,3793(8)	1,2172(9)	0,0623(7)	0,0564(7)	0,0397(7)	-0,0047(7)	0,0017(6)	0,0016(6)
C(6)	0,5035(9)	0,3906(7)	1,1283(8)	0,0445(7)	0,0378(6)	0,0435(7)	-0,0071(6)	-0,0001(6)	-0,0040(6)
C(7)	0,6329(9)	0,4252(7)	0,8197(9)	0,0631(7)	0,0337(6)	0,0579(7)	-0,0018(6)	0,0057(6)	-0,0164(6)
C(8)	0,6453(9)	0,4361(8)	0,7307(9)	0,0831(8)	0,0592(7)	0,0383(7)	0,0059(6)	0,0202(6)	-0,0172(7)
C(9)	0,7330(9)	0,4480(8)	0,7153(9)	0,0777(8)	0,0643(8)	0,0539(7)	-0,0114(6)	0,0241(7)	-0,0116(7)
C(10)	0,8125(9)	0,4482(8)	0,7816(9)	0,0736(8)	0,0544(8)	0,0790(8)	0,0001(7)	0,0427(7)	-0,0064(7)
C(11)	0,8033(9)	0,4351(8)	0,8674(9)	0,0441(7)	0,0430(7)	0,1024(9)	-0,0040(7)	0,0158(7)	-0,0019(6)
C(12)	0,7126(9)	0,4222(7)	0,8897(9)	0,0463(7)	0,0370(6)	0,0517(7)	-0,0066(6)	0,0034(6)	-0,0068(5)
C(13)	0,5238(9)	0,2390(7)	1,0232(8)	0,0474(6)	0,0428(7)	0,0480(7)	-0,0105(6)	0,0039(5)	-0,0027(5)
C(14)	0,4313(9)	0,2247(8)	1,0290(9)	0,0501(7)	0,0665(7)	0,0550(7)	-0,0126(7)	0,0089(6)	-0,0010(7)
C(15)	0,4094(9)	0,1905(9)	1,1015(9)	0,0738(8)	0,0735(8)	0,0835(8)	0,0154(7)	0,0360(7)	-0,0266(7)
C(16)	0,4784(9)	0,1685(9)	1,1672(9)	0,1096(9)	0,0781(8)	0,0552(8)	0,0077(7)	0,0329(8)	-0,0108(8)
C(17)	0,5693(9)	0,1845(9)	1,1611(9)	0,0860(8)	0,0691(8)	0,0531(7)	0,0093(7)	0,0133(7)	0,0058(7)
C(18)	0,5957(9)	0,2204(7)	1,0910(8)	0,0533(7)	0,0469(7)	0,0264(6)	0,0128(5)	0,0087(5)	0,0069(6)

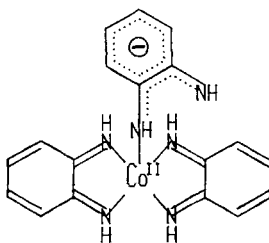




Ringsystem des einzähnig gebundenen Liganden liegen alle C,C-Abstände in der gleichen Grössenordnung. Im planaren  $\text{Ni}[\text{C}_6\text{H}_4(\text{NH}_2)_2]$ , dessen Struktur von *Hall & Soderberg* [1] bestimmt worden ist, liegen ähnliche Verhältnisse vor wie in C, wobei aber die chinoiden Eigenschaften der Liganden in den Abständen im Co-Komplex stärker zum Ausdruck kommen.

Der Diamagnetismus ist mit der Zuordnung  $\text{C} = \text{Co}(\text{sH}_2)(\text{qH}_2)_2^+$  ebenfalls vereinbar. Stellt man C als einen 5fach koordinierten Co(II) low-spin-Komplex dar (Fig. 2), so ist nach *Daul et al.* [2] zu erwarten, dass das ungepaarte Elektron der  $d^7$ -Konfiguration das  $d_{z^2}$ -Orbital besetzt. Da der axial koordinierte Ligand  $\text{sH}_2^-$  im vorliegenden Fall selbst eine radikalische Oxydationsstufe darstellt, kann Spinpaarung eintreten, was zum Diamagnetismus führt.

Lässt man für Kobalt die Möglichkeit weiterer Oxydationsstufen ausser +II in diesen Komplexen offen, so wäre für C grundsätzlich auch die Formulierung  $\text{Co}(\text{I})(\text{aH}_4)(\text{qH}_2)_2^+$  denkbar. Aufgrund der Elementaranalyse kann nicht eindeutig zwischen den beiden Möglichkeiten (48 bzw. 50 H-Atome/Molekel) entschieden werden; eine Abklärung mit Hilfe eines PMR.-Spektrums gelingt infolge der



grossen Instabilität von C in Lösung nicht. Die Formulierung mit Co(I) als Zentralatom ist hingegen aus folgenden Gründen wesentlich unwahrscheinlicher als Co(II)(sH<sub>2</sub>)(qH<sub>2</sub>)<sub>2</sub><sup>+</sup>: a) Co(I) dürfte als low-spin-d<sup>8</sup>-Komplex nur eine äusserst geringe Tendenz zur Koordination 5 aufweisen; b) es ist unwahrscheinlich, dass die tiefe Oxydationsstufe +I für Co in einem Komplex auftritt, der Liganden in einer hohen Oxydationsstufe (qH<sub>2</sub>) enthält; c) die Oxydationsstufen in Co(I)(aH<sub>4</sub>)(qH<sub>2</sub>)<sub>2</sub><sup>+</sup> sind weniger ausgeglichen als in Co(II)(sH<sub>2</sub>)(qH<sub>2</sub>)<sub>2</sub><sup>+</sup>.

Im Gegensatz zu C weist das magnetische Verhalten von B auf ein Oxydationsprodukt von A hin, das sich um eine *gerade* Anzahl Elektronen von letzterem unterscheidet. Es kommen deshalb die folgenden Zuordnungen in Frage: Co(aH<sub>4</sub>)(sH<sub>3</sub>)(sH<sub>2</sub>)<sup>+</sup> Co(sH<sub>3</sub>)(sH<sub>2</sub>)(qH<sub>2</sub>)<sup>+</sup> oder aber auch Co(aH<sub>3</sub>)(qH<sub>2</sub>)<sub>2</sub><sup>+</sup>. Die Elementaranalyse (21 H bzw. 22 H pro Co) weist auf eines der Produkte, die einer 4-Elektronenoxydation von A entsprechen, hin. Das magnetische Verhalten ist mit Co(aH<sub>3</sub>)(qH<sub>2</sub>)<sub>2</sub><sup>+</sup> leichter verständlich als mit dem vom stöchiometrischen Standpunkte aus identischen Co(sH<sub>3</sub>)(sH<sub>2</sub>)(qH<sub>2</sub>)<sup>+</sup>. Eine definitive Zuordnung kann aber wohl erst anhand einer Röntgenstrukturanalyse erfolgen.

Wir danken Herrn Prof. Dr. A. von Zelewsky (Universität de Fribourg) für ein beratendes Gespräch und für die Durchsicht des Manuskriptes. Der Ciba-Geigy AG (Dr. W. Padowetz) sei für die Verbrennungsanalysen gedankt. M. Zehnder dankt dem Schweizerischen Nationalfonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung (Projekt Nr. 2.180-0.78) für finanzielle Unterstützung und Prof. Dr. S. Fallab für die Problemstellung.

#### Experimenteller Teil

*Herstellung von [Co(1,2-diaminobenzol)<sub>3</sub>](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> · C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH (A).* Eine Lösung von 3 g 1,2-Diaminobenzol in 50 ml 50proz. Äthanol wird in einem *Glove-Bag* mit N<sub>2</sub> luftfrei gespült. Unter mechanischem Rühren wird 1,5 g Co(ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> · 6 H<sub>2</sub>O eingetragen. Danach wird die Lösung im *Glove-Bag* filtriert und das Filtrat in einem verschlossenen Kölbchen bei 0° belassen. Innerhalb 1 Std. entsteht [Co(1,2-diaminobenzol)<sub>3</sub>](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> · C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH als blass rosaviolette, feines Kristallisat. Dieses wird im *Glove Bag* abgesaugt und getrocknet. Die Verbindung verfärbt sich an der Luft braun.

C <sub>20</sub> H <sub>30</sub> Cl <sub>2</sub> CoN <sub>6</sub> O <sub>9</sub>	Ber. C 38,23	H 4,81	Cl 11,28	N 13,37%
(614,29)	Gef. „ 39,65	„ 4,56	„ 11,29	„ 13,41%

*Herstellung von [Co(1,2-diaminobenzol)(1,2-hydrobenzosemichinondiimid)(1,2-benzosemichinondiimid)]ClO<sub>4</sub> (B)<sup>2</sup>.* In einem *Glove-Bag* wird 1 g A in 50 ml luftfrei gespültes Äthanol eingetragen. Die filtrierte Lösung wird während 30 Sek. einem mässigen O<sub>2</sub>-Strom ausgesetzt, worauf sofort eine tiefviolette Färbung eintritt, und anschliessend mit der Lösung von 1 g festem NaClO<sub>4</sub> · H<sub>2</sub>O in der minimalen Menge H<sub>2</sub>O versetzt. Im gut verschlossenen Kolben entstehen innert Minuten bei -10° dunkelviolette feine Kristalle, die unter anaeroben Bedingungen abgesaugt und getrocknet werden.

C <sub>18</sub> H <sub>21</sub> ClCoN <sub>6</sub> O <sub>4</sub>	Ber. C 45,06	H 4,41	Cl 7,38	N 17,51%
(479,79)	Gef. „ 44,89	„ 4,54	„ 7,46	„ 17,34%

B kann auch als Tetraphenylborat isoliert werden.

*Herstellung von [Co(1,2-benzosemichinondiimid)(1,2-benzochinondiimid)<sub>2</sub>][B(C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>)<sub>4</sub>] · 5 H<sub>2</sub>O (C).* Die Lösung von 1 g A in 50 ml Äthanol wird auf -5° gekühlt und mit O<sub>2</sub> gespült. Die tiefviolette Färbung, die sofort eintritt, zeigt die Bildung von B an. Unter mechanischem Rühren wird weiter O<sub>2</sub> über die Lösung geblasen, bis eine tiefblaue Farbe zu beobachten ist (5 Min.). Danach wird die Lösung mit 1,6 g Na[B(C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>)<sub>4</sub>] in 30 ml H<sub>2</sub>O versetzt, filtriert und in einem gut verschlossenen Kölbchen bei -5° aufbewahrt. Innert 1 Std. entsteht C in gut ausgebildeten, nadelförmigen Kristallen, die abgesaugt und an der Luft getrocknet werden.

C <sub>42</sub> H <sub>48</sub> BCoN <sub>6</sub> O <sub>5</sub> (786,63)	Ber. C 64,13	H 6,15	N 10,68%	Gef. C 63,96	H 6,15	N 9,85%
---	--------------	--------	----------	--------------	--------	---------

2) Der Oxydationszustand der aromatischen Aminliganden kann nicht mit Sicherheit angegeben werden.

C kann auch als Perchlorat isoliert werden.

*Magnetische Messungen.* Die ESR.-Messungen erfolgten an Pulverproben mit Mengen von 20-60 mg pro empfindliches Volumen von 100 mm<sup>3</sup> bei 77 und 300 K. Die Suszeptibilitäten wurden bei 300 K nach der Methode von *Gouy* bestimmt; die Eichung erfolgte mit H<sub>2</sub>O bzw. mit Hg[Co(CNS)<sub>4</sub>]. Die Resultate wurden nach *Pascal* auf Diamagnetismus korrigiert und in magnetische Momente umgerechnet; deren Werte für A, B und C sowie die zugehörigen ESR.-Resultate sind in *Tabelle 1* zusammengestellt.

*Kristallographische Untersuchung von C.* Kristalle von C<sub>2</sub>H<sub>48</sub>BCoN<sub>6</sub>O<sub>5</sub> sind monoklin, Raumgruppe *P*2<sub>1</sub>/*n*, Gitterkonstanten *a* = 14,493(5), *b* = 18,341(7), *c* = 15,492(5) Å, *V* = 4056,10 Å<sup>3</sup>, *D*<sub>gef.</sub> = 1,290, *D*<sub>ber.</sub> = 1,289 g/cm<sup>3</sup> für *Z* = 4. Die Vermessung der Reflexintensitäten erfolgte auf einem *Philips*-PW-1100 Diffraktometer im  $\theta/2\theta$ -Betrieb mit graphitmonochromatisierter MoK $\alpha$ -Strahlung ( $\lambda$  = 0,71069 Å). Ausser einer Absorptionskorrektur wurden alle üblichen Korrekturen angebracht. Zu den nachfolgenden Berechnungen wurden von den im  $\theta$ -Bereich von 2 bis 26° erfassten 5014 unabhängigen Reflexen alle 2866 Reflexe mit (*I*<sub>0</sub>) > 1,5σ(*I*<sub>0</sub>) berücksichtigt. Die Strukturbestimmung erfolgte mit Hilfe der *Patterson*-Methode. Die Atomformfaktoren für Neutralatome und die Werte für die anomale Dispersion stammen von *Cromer et al.* [3], die Formfaktoren für H wurden von [4] übernommen. Die fünf Molekeln Kristallwasser sind teilweise fehlgeordnet, so dass für eines davon halbgesezte Stellungen eingeführt wurden. In einer abschliessenden Differenzfouriersynthese liessen sich die Protonen von Kation und Anion lokalisieren, wobei aber nur diejenigen des Kations berücksichtigt wurden. Diesen wurde ein gemeinsamer isotroper Temperaturfaktor *U* = 0,05 Å<sup>2</sup> zugeordnet. Der abschliessende *R*-Index betrug 0,088 ( $R = \sum |F_0| - |F_c| / \sum |F_0|$ ), wobei noch Restelektronendichtemaxima von 1,4 e/Å<sup>3</sup> verblieben, die den Protonen des Anions entsprechen; das Rauschen betrug 0,7 e/Å<sup>3</sup>. Die verwendeten Rechenprogramme stammen von *Sheldrick* (SHELX-76) [5]. Die Atomparameter sind in *Tabelle 2* zusammengestellt, *Tabelle 3* enthält Abstände und Winkel der schwereren Atome innerhalb des Kations.

Tabelle 3. Abstände und Winkel innerhalb des Kations

Atome	Abstand (Å)	Atome	Abstand (Å)	Atome	Winkel (°)
Co-N(1)	1,871(11)	C(9)-C(10)	1,415(22)	N(1)-Co-N(2)	83,5(5)
Co-N(2)	1,856(10)	C(10)-C(11)	1,379(25)	N(1)-Co-N(3)	96,1(5)
Co-N(3)	1,912(11)	C(11)-C(12)	1,432(20)	N(3)-Co-N(4)	83,1(5)
Co-N(4)	1,862(11)	C(12)-C(7)	1,454(18)	N(2)-Co-N(5)	99,7(4)
Co-N(5)	2,079(10)	N(5)-C(13)	1,482(17)	N(4)-Co-N(5)	103,0(4)
N(1)-C(1)	1,326(18)	N(6)-C(18)	1,395(18)	Co-N(1)-C(1)	114,2(8)
N(2)-C(6)	1,326(17)	C(13)-C(14)	1,382(20)	Co-N(2)-C(6)	115,6(8)
C(1)-C(2)	1,475(20)	C(14)-C(15)	1,367(24)	Co-N(3)-C(7)	114,6(8)
C(2)-C(3)	1,400(22)	C(15)-C(16)	1,370(23)	Co-N(4)-C(12)	116,0(8)
C(3)-C(4)	1,420(20)	C(16)-C(17)	1,368(27)	Co-N(5)-C(13)	114,4(8)
C(4)-C(5)	1,328(22)	C(17)-C(18)	1,374(21)	N(6)-C(18)-C(13)	119,6(12)
C(5)-C(6)	1,426(19)	C(18)-C(13)	1,399(17)		
C(6)-C(1)	1,465(17)				
N(3)-C(7)	1,356(19)				
N(4)-C(12)	1,339(18)				
C(7)-C(8)	1,433(20)				
C(8)-C(9)	1,347(24)				

#### LITERATURVERZEICHNIS

- [1] G. S. Hall & R. H. Soderberg, *Inorg. Chemistry* 7, 2300 (1968).
- [2] C. Daul, C. W. Schläpfer & A. von Zelewsky, *Struct. & Bonding* 36, 129 (1979).
- [3] D. T. Cromer & J. B. Mann, *Acta crystallogr. A* 24, 321 (1968).
- [4] R. F. Stewart, E. R. Davidson & W. T. Simpson, *J. chem. Physics* 42, 3175 (1965).
- [5] G. M. Sheldrick, Göttingen, unveröffentlicht.