

# Tantalchlorid-Phosphorsulfid-Addukte: $(TaCl_5)_2(\beta\text{-P}_4S_4)$ und $(TaCl_5)(\alpha\text{-P}_4S_5)$

Diana Hoppe, Arno Pfitzner\*

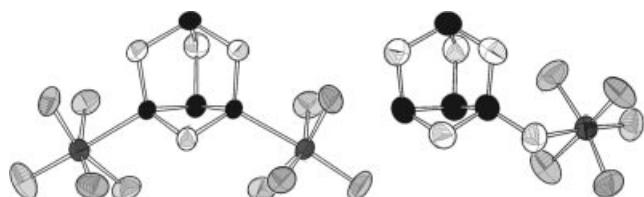
Institut für Anorganische Chemie, Universität Regensburg,  
Universitätsstr. 31, D-93040 Regensburg

**Keywords:** adduct compound; phosphorus sulfide; tantalum pentachloride

Ausgehend von den Phosphorchalkogenid-Niobchlorid-Adduktverbindungen  $(NbCl_5)_2(\beta\text{-P}_4S_4)$  und  $(NbCl_5)(P_4Se_3)$  [1] wurde die Verbindungsbildung weiterer Phosphorsulfidkäfige mit  $Nb_2Cl_{10}$  und  $Ta_2Cl_{10}$  untersucht.

Dazu wurden zunächst verschiedene Phosphorsulfide zusammen mit  $Ta_2Cl_{10}$  bei Raumtemperatur unter Schutzgas mit  $CS_2$  versetzt. Nach mehreren Tagen bildeten sich grüngelbe, säulenförmige sowie gelbe, tafelige Kristalle. Aus der Strukturbestimmung an Einkristallen geht hervor, dass es sich dabei um die zu  $(NbCl_5)_2(\beta\text{-P}_4S_4)$  [1] isotype Molekülverbindung  $(TaCl_5)_2(\beta\text{-P}_4S_4)$  bzw. um das bisher unbekannte  $(TaCl_5)(\alpha\text{-P}_4S_5)$  handelt. Beide sind Addukte aus den entsprechenden Phosphorsulfidkäfigen [1, 2] und zwei bzw. einem  $TaCl_5$ -Molekül. Im Fall des  $\beta\text{-P}_4S_4$ -Käfigs koordinieren die freien Elektronenpaare der Phosphoratome an Tantal (Abb. 1 links). Im Unterschied dazu wird für  $\alpha\text{-P}_4S_5$  die Koordination an Tantal durch das vorhandene terminale Schwefelatom realisiert (Abb. 1 rechts).

$(TaCl_5)_2(\beta\text{-P}_4S_4)$  kristallisiert in der Raumgruppe  $P2_1/n$  mit den Gitterparametern  $a = 6.304(2) \text{ \AA}$ ,  $b = 13.071(3) \text{ \AA}$ ,  $c = 26.552(6) \text{ \AA}$ ,  $\beta = 93.74(3)^\circ$ ,  $V = 2183(1) \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 4$  [ $R_1 = 2.7\%$ ,  $wR_2 = 4.0\%$ , alle Daten].  $(TaCl_5)(\alpha\text{-P}_4S_5)$  kristallisiert in der Raumgruppe  $P\bar{1}$  mit den Gitterparametern  $a = 6.523(2) \text{ \AA}$ ,  $b = 10.210(3) \text{ \AA}$ ,  $c = 12.893(3) \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 97.72(2)^\circ$ ,  $\beta = 104.02(2)^\circ$ ,  $\gamma = 106.04(2)^\circ$ ,  $V = 781.8(8) \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 2$  [ $R_1 = 6.3\%$ ,  $wR_2 = 12.2\%$ , alle Daten].



**Abb. 1** Links:  $(TaCl_5)_2(\beta\text{-P}_4S_4)$ ; rechts:  $(TaCl_5)(\alpha\text{-P}_4S_5)$ . Schwarz: P; weiß: S; dunkelgrau: Ta; hellgrau: Cl. Die Schwingungsellipsoide entsprechen 70% Aufenthaltswahrscheinlichkeit.

[1] H. Nowotnick, K. Stumpf, R. Blachnik, H. Reuter, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **1999**, 625, 693.

[2] S. van Houten, E. H. Wiebenga, *Acta Crystallogr.* **1957**, 10, 156.