

## Tantalchlorid-Phosphorsulfid-Addukte: (TaCl<sub>5</sub>)<sub>2</sub>( $\beta$ -P<sub>4</sub>S<sub>4</sub>) und (TaCl<sub>5</sub>)( $\alpha$ -P<sub>4</sub>S<sub>5</sub>)

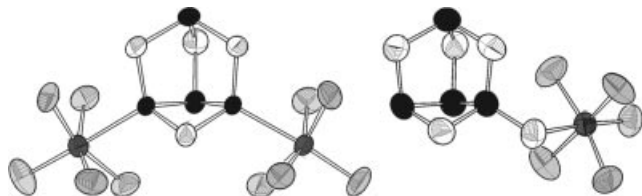
Diana Hoppe, Arno Pfitzner\*

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<sub>5</sub>)<sub>2</sub>( $\beta$ -P<sub>4</sub>S<sub>4</sub>) und (NbCl<sub>5</sub>)(P<sub>4</sub>Se<sub>3</sub>) [1] wurde die Verbindungsbildung weiterer Phosphorsulfidkäfige mit Nb<sub>2</sub>Cl<sub>10</sub> und Ta<sub>2</sub>Cl<sub>10</sub> untersucht.

Dazu wurden zunächst verschiedene Phosphorsulfide zusammen mit Ta<sub>2</sub>Cl<sub>10</sub> bei Raumtemperatur unter Schutzgas mit CS<sub>2</sub> 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<sub>5</sub>)<sub>2</sub>( $\beta$ -P<sub>4</sub>S<sub>4</sub>) [1] isotype Molekülverbindung (TaCl<sub>5</sub>)<sub>2</sub>( $\beta$ -P<sub>4</sub>S<sub>4</sub>) bzw. um das bisher unbekannte (TaCl<sub>5</sub>)( $\alpha$ -P<sub>4</sub>S<sub>5</sub>) handelt. Beide sind Addukte aus den entsprechenden Phosphorsulfidkäfigen [1, 2] und zwei bzw. einem TaCl<sub>5</sub>-Molekül. Im Fall des  $\beta$ -P<sub>4</sub>S<sub>4</sub>-Käfigs koordinieren die freien Elektronenpaare der Phosphoratome an Tantal (Abb. 1 links). Im Unterschied dazu wird für  $\alpha$ -P<sub>4</sub>S<sub>5</sub> die Koordination an Tantal durch das vorhandene terminale Schwefelatom realisiert (Abb. 1 rechts).

(TaCl<sub>5</sub>)<sub>2</sub>( $\beta$ -P<sub>4</sub>S<sub>4</sub>) 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<sub>5</sub>)( $\alpha$ -P<sub>4</sub>S<sub>5</sub>) 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<sub>5</sub>)<sub>2</sub>( $\beta$ -P<sub>4</sub>S<sub>4</sub>); rechts: (TaCl<sub>5</sub>)( $\alpha$ -P<sub>4</sub>S<sub>5</sub>). 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.