

$wR^2 = 0.107$, max. Restelektronendichte 0.34 (-0.25) $e\text{\AA}^{-3}$, Flack-Parameter $0.02(2)$, Wasserstoffatome berechnet und als reitende Atome verfeinert. c) Röntgenstrukturanalyse von **ent-9d** ($\text{C}_{19}\text{H}_{31}\text{NO}_2\text{SSi}$), $M_r = 365.60$, $0.70 \times 0.50 \times 0.20 \text{ mm}^3$, $a = 11.501(2)$, $b = 7.914(2)$, $c = 11.599(2) \text{ \AA}$, $\beta = 96.21(2)$, $V = 1045.9(4) \text{ \AA}^3$, $\rho_{\text{hoe}} = 1.161 \text{ g cm}^{-3}$, $\mu = 19.98 \text{ cm}^{-1}$, empirische Absorptionskorrektur via φ -Scan-Daten ($0.831 \leq C \leq 0.999$), $Z = 2$, monoklin, Raumgruppe $P2_1$ (Nr. 4), $\lambda = 1.54178 \text{ \AA}$, $T = 223 \text{ K}$, $\omega/2\theta$ -Scans, 4574 gemessene Reflexe ($\pm h, -k, \pm l$), $\sin \theta/\lambda = 0.62 \text{ \AA}^{-1}$, 2294 unabhängige und 1964 beobachtete Reflexe mit $I \geq 2\sigma(I)$, 225 verfeinerte Parameter, $R = 0.065$, $wR^2 = 0.147$, max. Restelektronendichte 0.60 (-0.44) $e\text{\AA}^{-3}$, Flack-Parameter $\sim 0.01(3)$, Wasserstoffatome berechnet und als reitende Atome verfeinert. d) Alle Datensätze wurden auf einem Enraf-Nonius-CAD4-Diffraktometer gemessen. Folgende Programme wurden verwendet: MolEN zur Datenreduktion, SHELLS-86 zur Strukturlösung, SHELLXL-93 zur Strukturverfeinierung. Die kristallographischen Daten (ohne Strukturfaktoren) der in dieser Veröffentlichung beschriebenen Strukturen wurden als „supplementary publication no. CCDC-100446“ beim Cambridge Crystallographic Data Centre hinterlegt. Kopien der Daten können kostenlos bei folgender Adresse in Großbritannien angefordert werden: The Director, CCDC, 12 Union Road, Cambridge CB21EZ (Telefax: Int. + 1223/336-033; E-mail: deposit@chemcrys.cam.ac.uk).

[13] Die Reproduzierung dieser Ergebnisse erfordert salzfrees *sec*-Butyllithium und hochreines, vor allem disulfidfreies **7**; anderenfalls sind die Ausbeuten und Enantiomerenüberschüsse vermindert.
 [14] Ein Experiment, bei dem das Ionenpaar (*S*)-**8** 1 h auf -2°C bis 0°C erwärmt wurde, lieferte nach dem Abfangen mit Chlorameisensäuremethylester das Produkt **ent-9b** in 58proz. Ausbeute mit 73% ee. Längere Reaktionszeiten bei 0°C sind nicht sinnvoll, da starke Zersetzung eintritt.

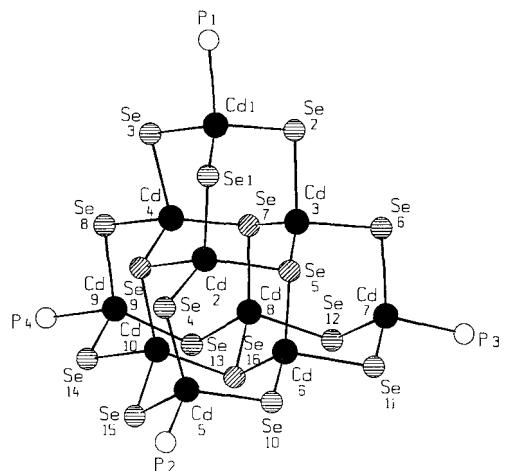


Abb. 1. Molekülstruktur von **1** im Kristall. Die Phenylringe der SePh^- -Liganden ($\text{Se}1, \text{Se}2, \text{Se}3, \text{Se}4, \text{Se}6, \text{Se}8, \text{Se}10, \text{Se}11, \text{Se}12, \text{Se}13, \text{Se}14$ und $\text{Se}15$ (○)) sind nicht abgebildet. $\text{Se}5, \text{Se}7, \text{Se}9$ und $\text{Se}16$ (●) tragen keine Phenylgruppe.

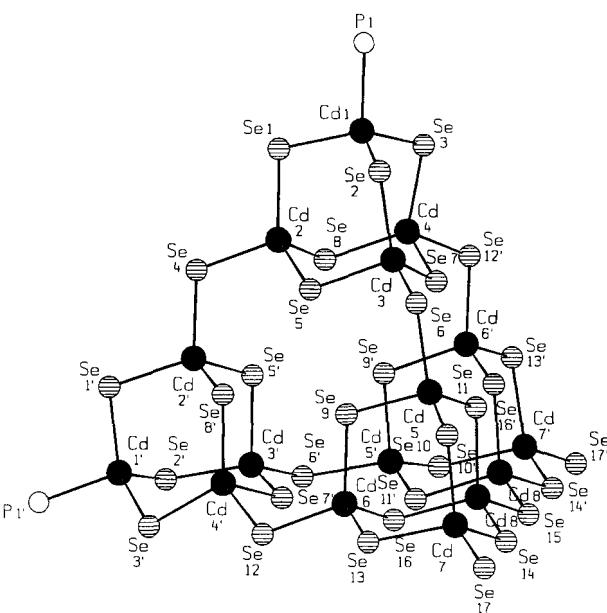
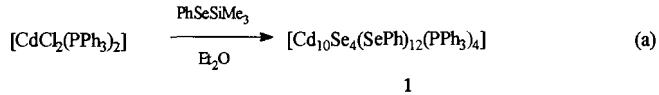


Abb. 2. Molekülstruktur von **2** im Kristall [12]. Aus Gründen der Übersichtlichkeit wurde auf die Abbildung der Phenylgruppen verzichtet.

1 entsteht bei der Umsetzung von $[\text{CdCl}_2(\text{PPh}_3)_2]$ mit PhSeSiMe_3 (in Diethylether) in Form farbloser Kristalle [Gl. (a)].



1 kristallisiert in der triklinen Raumgruppe $P\bar{1}$. Der Kern des Clusters wird aus vier miteinander verbundenen adamantanologen Käfigen gebildet. Er stellt damit einen Ausschnitt aus der Sphalerit-Struktur dar, die auch im CdSe auftritt. [9] Der $[\text{Cd}_{10}\text{Se}_{16}\text{P}_4]$ -Clusterkern bildet ein Tetraeder mit einer durchschnittlichen Kantenlänge von etwa 1.3 nm. Die Cd-Atome sind verzerrt tetraedrisch von den Se-Atomen der $\mu_2\text{-SePh}^-$ ($\text{Se}1, \text{Se}2, \text{Se}3, \text{Se}4, \text{Se}6, \text{Se}8, \text{Se}10, \text{Se}11, \text{Se}12, \text{Se}13, \text{Se}14$ und $\text{Se}15$)- und der $\mu_3\text{-Se}^{2-}$ ($\text{Se}5, \text{Se}7, \text{Se}9$ und $\text{Se}16$)-Liganden umgeben.

Darstellung und Struktur von $[\text{Cd}_{10}\text{Se}_4(\text{SePh})_{12}(\text{PPh}_3)_4]$ und $[\text{Cd}_{16}(\text{SePh})_{32}(\text{PPh}_3)_2]$ **

Silke Behrens, Marco Bettenhausen,
 Andreas Eichhöfer und Dieter Fenske*

Die Herstellung von Nanoclustern und Kolloiden von II-VI-Verbindungen ist aufgrund ihrer größenabhängigen optischen und elektronischen Eigenschaften von Interesse. Wenn der Durchmesser der Teilchen den excitonischen Bohr-Radius des Materials unterschreitet, werden Größenquantisierungseffekte und ein im Vergleich zum Festkörper vergrößerter Bandabstand beobachtet.^[1,2,3] Physikalische Messungen an Clustermolekülen definierter Größe können daher zu einer exakten Interpretation der beobachteten Effekte beitragen. Dance und Mitarbeiter konnten bereits eine Reihe von Cadmiumchalkogenid-Clustern synthetisieren.^[4] Vor kurzem gelang uns durch Umsetzung von $[\text{CdCl}_2(\text{PPh}_3)_2]$ mit PhSeSiMe_3 unter Halogensilan-Abspaltung die Synthese des größten in seiner Struktur gesicherten Cadmiumselenid-Clusters $[\text{Cd}_{32}\text{Se}_{14}(\text{SePh})_{36}(\text{PPh}_3)_4]$.^[5] Diese Verbindung ist isostrukturell zu den von Herron und Weller charakterisierten Schwefel-Derivaten.^[6,7] Weitere Untersuchungen unter Anwendung dieses Syntheseprinzips führten nun zur Synthese und zur kristallstrukturanalytischen Charakterisierung der Cluster $[\text{Cd}_{10}\text{Se}_4(\text{SePh})_{12}(\text{PPh}_3)_4]$ (**1**) und $[\text{Cd}_{16}(\text{SePh})_{32}(\text{PPh}_3)_2]$ (**2**) (Abb. 1, Abb. 2).^[8]

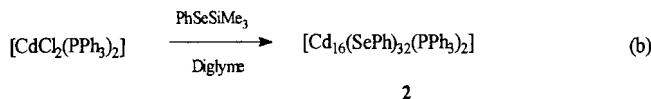
[*] Prof. Dr. D. Fenske, Dipl.-Chem. S. Behrens,
 Dipl.-Chem. M. Bettenhausen, Dr. A. Eichhöfer
 Institut für Anorganische Chemie der Universität
 Engesserstraße, Gebäude-Nr. 30.45, D-76128 Karlsruhe
 Telefax: Int. + 721/661921
 E-mail: behrens@achim6.chemie.uni-karlsruhe.de

[**] Diese Arbeit wurde innerhalb des SFB195 von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) und dem Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie (BMBF) unterstützt.

Se16)-Liganden sowie den P-Atomen der PPh_3 -Liganden koordiniert (Se–Cd–Se 95.56(7)–130.23(7) $^\circ$, Se–Cd–P 100.88(11)–115.70(12) $^\circ$). Die Cd–Se-Bindungslängen liegen zwischen 256.9(2) und 275.0(2) pm. Bei Cd_8Se (Zinkblende) beträgt die Cd–Se-Bindungslänge im Festkörper 262 pm.^[9] Die kürzeren Abstände (256.9(2)–261.3(2) pm) entsprechen dabei den Bindungen der $\mu_3\text{-Se}^{2-}$ -Liganden zu den Cd-Atomen. An die vier äußeren Cd-Atome (Cd1, Cd5, Cd7 und Cd9) sind die PPh_3 -Liganden koordiniert.

Die Struktur ist somit analog der Struktur des von Dance und Mitarbeitern charakterisierten $[\text{Cd}_{10}\text{Se}_{16}(\text{SePh})_{16}]^{4-}$, wobei an Stelle der PPh_3 -Liganden endständige SePh^- -Liganden koordinieren. Während es sich hierbei um ein Clusteranion handelt, liegt **1** als neutrale Verbindung vor.

Bei der Reaktion von $[\text{CdCl}_2(\text{PPh}_3)_2]$ mit PhSeSiMe_3 in Diglyme erhält man zunächst eine farblose Lösung, aus der nach kurzer Zeit farblose Kristalle von **2** gebildet werden [Gl. (b)].



Im Gegensatz zu **1** sind in **2** vier adamantanaloge $[\text{Cd}_4\text{Se}_6]$ -Käfige nicht direkt aneinanderkondensiert, sondern über SePh^- -Liganden zu einem $[\text{Cd}_{16}\text{Se}_{30}]$ -Gerüst verbrückt. Zwei terminale SePh^- -Liganden (Se17, Se17') koordinieren an Cd7 und Cd7'. Zusätzlich binden zwei PPh_3 -Liganden (P1, P1') an Cd1 und Cd1'. Alle sechzehn Cd-Atome sind verzerrt tetraedrisch von den Se-Atomen der $\mu_2\text{-SePh}^-$ (Se1–Se16)– sowie den P-Atomen der PPh_3 -Liganden umgeben (Se–Cd–Se 96.63(8)–122.83(6) $^\circ$, Se–Cd–P 105.41(9)–106.62(9) $^\circ$). Die Cd–Se-Bindungslängen liegen im Bereich von 249.4(3) bis 279.6(4) pm.

Da die Phenylgruppen der SePh^- -Liganden auf der Clusteroberfläche liegen, entsteht im Zentrum des Clusters ein Hohlraum von etwa 420 pm. Ein Blick auf das Kalottenmodell von **2** (Abbildung 3) zeigt, daß dieser Hohlraum von außen vollständig durch die Phenylringe der SePh^- -Liganden abgeschirmt ist. Dieser Hohlraum könnte für den interstitiel-

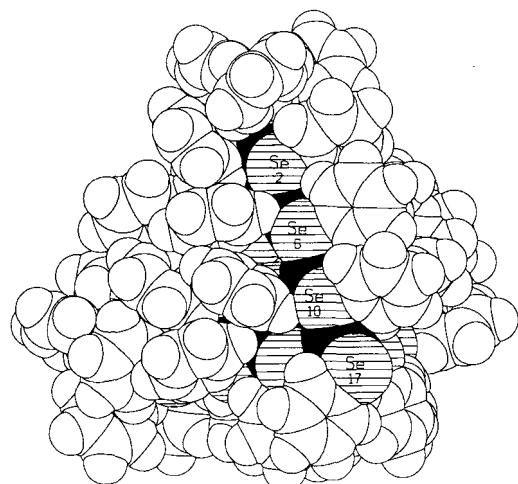


Abb. 3. Kalottenmodell von **2**; die Blickrichtung entspricht dabei der Orientierung in Abbildung 2. Die Wasserstoffatome wurden mit Hilfe des Programms SCHAALK92 ergänzt [13].

len Einbau weiterer Übergangsmetall-Ionen genutzt werden. Die bisher durchgeführten Versuche führten jedoch nicht zum

Erfolg. Der Einbau eines weiteren $[\text{SeCd}_4]$ -Tetraeders in diesen Hohlraum würde unter Abspaltung von zwölf Phenylringen an den SePh^- -Liganden zu einem aus zehn adamantanartigen Käfigen gebildeten $[\text{Cd}_{20}\text{Se}_{13}(\text{SePh})_{20}(\text{PPh}_3)_2]^{6-}$ -Cluster führen. Vermutlich ist jedoch die Bildung eines solchen Clusters aufgrund der hohen Ladung nicht begünstigt.

In **2** bildet der $[\text{Cd}_{16}\text{Se}_{32}\text{P}_2]$ -Clusterkern ein Tetraeder mit einer durchschnittlichen Kantenlänge von 1.7 nm. Dieses äußere Tetraeder läßt sich in vier eckenverknüpfte Tetraeder unterteilen, die die adamantanalogen Cd_4Se_6 -Käfige umschließen. Solche eckenverknüpfte Tetraeder findet man auch als Strukturprinzip bei nichtmolekularen Strukturen wie $\text{Cd}(\text{SPh})_2$.^[10]

Bemerkenswert ist in diesem Zusammenhang, daß Dance et al. bereits durch ^{113}Cd - und ^{13}C -NMR-spektroskopische Untersuchungen die mögliche Existenz eines strukturell analog aufgebauten $[\text{Cd}_{16}(\text{SPh})_{32}(\text{DMF})_2]$ postuliert hatten.^[11]

Die größtenabhängigen Absorptionsspektren von **1** und **2** sind Thema weiterer Untersuchungen.

Zur Zeit werden in unserer Arbeitsgruppe die hier dargestellten Arbeiten auf das System Hg–Te ausgeweitet. Bei der Umsetzung von HgCl_2 mit PtBu_3 und PhTeSiMe_3 werden gelbe Kristalle erhalten. Erste Untersuchungen an diesen Kristallen mittels Einkristallröntgenstrukturanalyse weisen auf eine zu **2** analoge Verbindung $[\text{Hg}_{16}(\text{TePh})_{32}(\text{PtBu}_3)_2]$ hin (Kristallstrukturdaten: kubisch, Raumgruppe $Fdd\bar{d}$, $a = 3113.1(7)$ pm, $b = 5862.6(26)$ pm, $c = 6640.9(25)$ pm).

Experimentelles

Vorschrift zur Darstellung von **1** und **2** (alle Schritte werden in Stickstoffatmosphäre und in absolutierten Lösungsmitteln durchgeführt).

1: 0.68 g (0.96 mmol) $[\text{CdCl}_2(\text{PPh}_3)_2]$ werden in 50 mL Diethylether mit 0.96 mL (3.8 mmol) PhSeSiMe_3 versetzt. Nach wenigen Stunden erhält man farblose Plättchen von **1** und einen gelben Niederschlag unbekannter Zusammensetzung. (Ausbeute: 15 %)

2: 0.77 g (1.08 mmol) $[\text{CdCl}_2(\text{PPh}_3)_2]$ werden in 100 mL Diglyme suspendiert. Nach der Zugabe von 0.54 mL (2.18 mmol) PhSeSiMe_3 erhält man eine farblose Lösung, aus der die Verbindung **2** in Form farbloser Nadeln kristallisiert. (Ausbeute: 40 %)

Eingegangen am 14. Juli 1997 [Z10679]

Stichwörter: Cadmium • Cluster • Nanostrukturen • Selen • Strukturaufklärung

- [1] C. J. Murphy, *J. Cluster Science* **1996**, 7, 341.
- [2] C. B. Murray, D. J. Norris, M. G. Bawendi, *J. Am. Chem. Soc.* **1993**, 115, 8706.
- [3] H. Weller, *Angew. Chem.* **1993**, 105, 43; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1993**, 32, 41.
- [4] I. G. Dance, K. Fisher in *Progress in Inorganic Chemistry*, Bd. 41, (Hrsg.: K. D. Karlin), **1994**.
- [5] S. Behrens, M. Bettenhausen, A. C. Deveson, A. Eichhöfer, D. Fenske, A. Lohde, U. Woggon, *Angew. Chem.* **1996**, 108, 2361; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1996**, 35, 2215.
- [6] N. Herron, J. C. Calabrese, W. E. Farneth, Y. Wang, *Science* **1993**, 259, 1426.
- [7] T. Voßmeier, G. Reck, B. Schulz, L. Katsikas, H. Weller, *J. Am. Chem. Soc.* **1995**, 117, 12881.
- [8] Daten zur Röntgenstrukturanalyse: STOE IPDS und STOE IPDS mit SIEMENS Rotating Anode, MoK_{α} , 200 K.
Datensammlung und Verfeinerung von **1** und **2**:
1: Gitterkonstanten: $a = 1940.4(6)$ pm, $b = 2053.9(4)$ pm, $c = 2327.1(6)$ pm, $\alpha = 75.42(2)^\circ$, $\beta = 65.63(2)^\circ$, $\gamma = 76.40(2)^\circ$, $V = 8085(4) \cdot 10^6$ pm 3 ; Raumgruppe $P\bar{1}$ (Nr. 2), $Z = 2$, $\mu(\text{MoK}_{\alpha}) = 4.973$ mm $^{-1}$, $2\theta_{\max} = 45^\circ$; 3535 Reflexe, davon 19957 unabhängige Reflexe, 13395 mit $I > 2\sigma(I)$, 867 Parameter (Cd, Se, P anisotrop und C isotrop verfeinert. Die Lagen der Wasserstoffatome wurden berechnet.), $R_1 = 0.0793$, $wR_2 = 0.2005$, Max. Restelektronendichte 1.502 e $^{-3}$. Ein Lösungsmittelmolekül (Diethylether) konnte pro asymmetrischer Einheit in der Einheitszelle an der Position $\text{Mo}_{\text{K}_{\alpha}}$ positioniert werden.

trischer Einheit verfeinert werden.

2: Gitterkonstanten: $a = 3009.5(6)$ pm, $b = 3359.8(7)$ pm, $c = 3151.5(6)$ pm, $\beta = 114.48(3)^\circ$, $V = 29001(10) \cdot 10^6$ pm³; Raumgruppe $I2/a$ (Nr. 15), $Z = 4$, $\mu(\text{MoK}_\alpha) = 5.213$ mm⁻¹, $2\theta_{\text{max}} = 45^\circ$; 41006 Reflexe, davon 18494 unabhängige Reflexe, 12239 mit $I > 2\sigma(I)$, 520 Parameter (Cd, Se, P anisotrop und C isotrop verfeinert). Die Phenylringe wurden als starre Gruppe mit idealisierter Geometrie verfeinert, $R_1 = 0.0773$, $wR_2 = 0.2310$, Max. Restelektronendichte 2.465 e Å⁻³. Se4, Se14 und Se15, sowie einige der Phenylringe sind zweifach fehlgeordnet. Durch eine Verfeinerung der Struktur in Ia oder $I2$ konnte keine Verbesserung in Bezug auf die Fehlordnung erreicht werden. Auch bei der Untersuchung verschiedener Kristalle trat jeweils diese Fehlordnung auf.

Die kristallographischen Daten (ohne Struktur faktoren) der in dieser Veröffentlichung beschriebenen Strukturen wurden als „supplementary publication no. CCDC-100535“ beim Cambridge Crystallographic Data Centre hinterlegt. Kopien der Daten können kostenlos bei folgender Adresse in Großbritannien angefordert werden: The Director, CCDC, 12 Union Road, GB-Cambridge CB2 1EZ (Telefax: Int. +12 23/3 36 0 33; E-mail: deposit@chemcrys.cam.ac.uk).

- [9] V. M. Goldschmidt in *Geochemische Verteilungsgesetze der Elemente, Bd. 8, Untersuchungen über Bau und Eigenschaften von Krystallen* (Hrsg.: J. Dybwad), Oslo, 1927.
- [10] D. Craig, I. G. Dance, R. Garbutt, *Angew. Chem.* **1986**, 98, 178; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1986**, 25, 165; I. G. Dance, R. G. Garbutt, D. C. Craig, M. L. Scudder, *Inorg. Chem.* **1987**, 26, 4057.
- [11] I. G. Dance, R. G. Garbutt, T. D. Bailey, *Inorg. Chem.* **1990**, 29, 603.
- [12] Se4, Se14, Se14' und Se15 sind zweifach fehlgeordnet. Aus Gründen der Übersichtlichkeit sind hier nur die jeweiligen Schwerpunktskoordinaten abgebildet.
- [13] E. Keller, *SCHAKAL-A FORTRAN Programm for Graphical Representation of Molecular and Crystallographic Models*, Universität Freiburg, 1992.

Strukturelle Evolution vom Festkörper zum Molekül für BaI₂: Synthese und Kristallstrukturanalyse von [BaI₂(μ₂-OH₂)₂]₃∞, [BaI₂(μ₂-OH₂)(OC₃H₆)]₂∞, [BaI₂(THF)₃]₁∞∞ und [BaI₂(THF)₅]·THF**

Katharina M. Fromm*

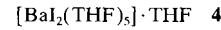
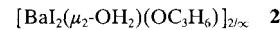
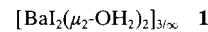
Für Chemiker aller Sparten wird es immer wichtiger, den Bereich zwischen Festkörper und Molekül zu erforschen und zu verstehen. In den letzten Jahren ist deshalb dieses Forschungsgebiet immer mehr in den Mittelpunkt des Interesses gerückt. Umso erstaunlicher ist die Tatsache, daß für recht einfache Substanzklassen, wie binäre Alkali- und Erdalkalimetallhalogenide, kaum Vertreter aus diesem Zwischenbereich bekannt sind.^[1] Es liegt sicher auch an der schwierigen Handhabbarkeit dieser Verbindungen, die ihre Untersuchung bislang weitgehend verhinderten. Hier wird am Beispiel BaI₂ gezeigt, daß sukzessive verschiedene Ausschnitte aus dem Festkörper, stabilisiert durch Donorliganden isoliert werden können.

[*] Dr. K. M. Fromm

Institut für Anorganische Chemie der Universität
Engesserstraße, Geb. 30.45
D-76128 Karlsruhe
Telefax: Int. + 721/608 2718
E-mail: fromm@achibm6.chemie.uni-karlsruhe.de

[**] Den Herren Prof. Dr. D. Fenske und Prof. Dr. J. Strähle danke ich für ihre freundliche Unterstützung. Diese Arbeit wurde von der Deutschen Forschungsgemeinschaft gefördert.

Bariumiodid löst sich, im Vergleich zu anderen Alkali- und Erdalkalimetallhalogeniden, gut in organischen N- und O-Donorlösungsmitteln. Die meist gelben Lösungen geben einen Hinweis darauf, daß die Festkörperstruktur weitgehend abgebaut wird. So lassen sich durch Solvatation mit Wasser, Aceton und THF unterschiedliche BaI₂-Addukte isolieren, deren struktureller Aufbau sich jeweils vom Festkörpergitter des reinen BaI₂ ableiten läßt. Sie zeigen einerseits zwar strukturelle Verwandtschaft, bilden jedoch unterschiedliche Aggregate, die durch Solvatation von dreidimensionalen Raumnetzstrukturen, über zweidimensionale Schicht- und eindimensionale Kettenstrukturen, zu molekularen Spezies abgebaut werden. Bei der Solvatation mit Wasser erhält man so die Verbindung **1**, mit Wasser und Aceton **2**. Aus THF kristallisieren die Verbindungen **3** und **4**.



Wasserfreies, weißes Bariumiodid kristallisiert, wie BaCl₂ und BaBr₂ in der PbCl₂-Struktur.^[2] Dabei ist das Bariumatom verzerrt trigonal prismatisch von sechs Iodatomen umgeben. Zusätzlich überdachen drei weitere Halogenliganden die Vierecksflächen des Prismas. Diese drei Iodatome liegen zusammen mit dem Bariumatom annähernd in einer Ebene, so daß am Erdalkalimetallatom in etwa D_{3h} -Symmetrie erreicht wird. Wie stark diese Struktur verzerrt ist, wird deutlich, wenn man die Barium-Iod-Abstände betrachtet, die sich in sieben kürzere (3.38–3.63 Å) und zwei deutlich längere (4.10 Å) unterteilen lassen. Die Iodatome besitzen die Koordinationszahl (KooZ) vier bzw. fünf.

BaI₂ ist an Luft nicht stabil, sondern zeichnet sich durch hygrokopisches Verhalten aus. Die Festkörperstruktur wird abgebaut, und es lagern sich zwei Moleküle Wasser an. Im Zuge dieses Prozesses, der Solvatation von Bariumiodid, kann man die Verbindung [BaI₂(μ₂-H₂O)₂]₃∞ **1** isolieren und strukturell charakterisieren.^[3]

1 bildet ein dreidimensionales Gitter aus, bei dem die Struktureinheit des aus Iodatomen gebildeten, trigonalen Prismas aus der Festkörperstruktur von BaI₂ in entzerrter Form wiederzufinden ist. Diese bariumzentrierten Iodprismen sind über Kanten miteinander verknüpft. Über zwei der Vierecksflächen erfolgt zusätzliche μ₂-Verbrückung durch je zwei Sauerstoffatome. Da über die dritte Vierecksfläche keine Verbrückung stattfindet, entstehen an dieser Stelle Kavitäten im Gitter. Die Koordinationszahl der Bariumatome steigt im Vergleich mit BaI₂ auf zehn, während die für die Iodatome auf drei sinkt.

Aus BaI₂ in Aceton erhält man bei –30°C schwach gelbe Kristalle der Zusammensetzung [BaI₂(μ₂-OH₂)(OC₃H₆)]₂∞ **2**.^[4] Die Darstellung kann zum einen ausgehend von **1** aus abgesetztem Aceton erfolgen, zum anderen aus BaI₂ unter Verwendung von technischem Aceton.

2 bildet eine für Erdalkalimetallhalogenide erstmals beobachtete, zweidimensionale Schichtstruktur aus. Wie im dreidimensional unendlichen Gitter von BaI₂ und **1** findet sich hier ebenfalls das Strukturelement des aus Iodatomen gebildeten trigonalen Prismas wieder. Die bariumzentrierten Iodprismen werden über zwei Kanten der Dreiecksflächen sowie, senkrecht dazu, über zwei gegenüberliegende Kanten