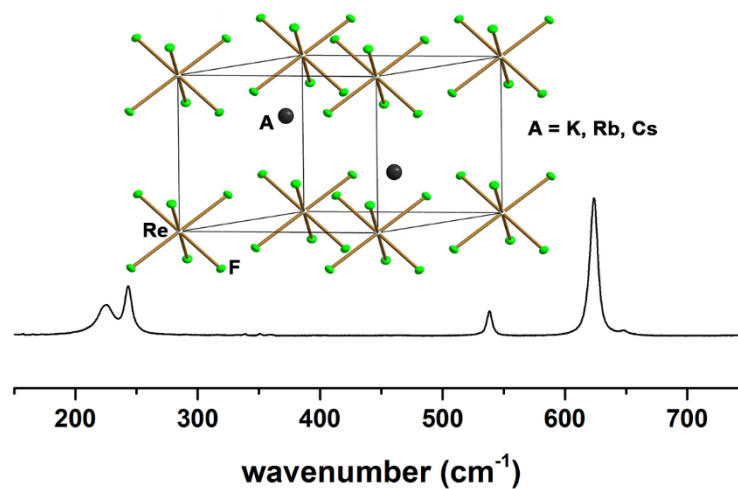


Supporting information

Syntheses, Raman spectroscopy and crystal structures of alkali hexafluoridorhenates(IV) – revisited

James Louis-Jean[†], Samundeeswari Mariappan Balasekaran[†], Dean Smith[‡], Ashkan Salamat[‡], Thang Chien Pham[‡], Frederic Poineau[†]

Synopsis



Geometry.

Anisotropic displacement parameters [\AA^2] for K_2ReF_6						
Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Re1	0.00883(16)	0.00883(16)	0.0082(2)	0.00441(8)	0.00000	0.00000
F1	0.0119(13)	0.0162(10)	0.0117(12)	0.0060(6)	-0.0012(10)	-0.0006(5)
K1	0.0118(5)	0.0118(5)	0.0096(6)	0.0059(2)	0.00000	0.00000

Geometric parameters, bond lengths [Å] and angles [°] for K ₂ ReF ₆			
Re1—F1	1.948(3)	F1—K1 ^{viii}	2.9325(10)
Re1—F1 ⁱ	1.948(3)	F1—K1 ^{vi}	2.946(3)
Re1—F1 ⁱⁱ	1.948(3)	K1—F1 ^{xi}	2.762(3)
Re1—F1 ⁱⁱⁱ	1.948(3)	K1—F1 ^x	2.762(3)
Re1—F1 ^{iv}	1.948(3)	K1—F1 ^{xii}	2.762(3)
Re1—F1 ^v	1.948(3)	K1—F1 ^{xiii}	2.9325(11)
Re1—K1 ⁱ	3.6263(13)	K1—F1 ^{xiv}	2.9325(10)
Re1—K1 ^{vi}	3.6263(13)	K1—F1 ^{iv}	2.9325(11)
Re1—K1 ^{vii}	3.6263(13)	K1—F1 ^{xv}	2.9325(11)
Re1—K1	3.6263(13)	K1—F1 ^{xvi}	2.9325(11)
Re1—K1 ^{viii}	3.6263(13)	K1—F1 ^{xvii}	2.946(3)
Re1—K1 ^{ix}	3.6263(13)	K1—F1 ⁱⁱ	2.946(3)
F1—K1 ^x	2.762(3)	K1—F1 ^{vi}	2.946(3)
F1—K1	2.9325(11)		
F1—Re1—F1 ⁱ	180.000	K1—F1—K1 ^{viii}	168.22(13)
F1—Re1—F1 ⁱⁱ	86.08(12)	Re1—F1—K1 ^{vi}	93.38(11)
F1 ⁱ —Re1—F1 ⁱⁱ	93.92(12)	K1 ^x —F1—K1 ^{vi}	105.55(10)
F1—Re1—F1 ⁱⁱⁱ	93.92(12)	K1—F1—K1 ^{vi}	94.27(6)
F1 ⁱ —Re1—F1 ⁱⁱⁱ	86.08(12)	K1 ^{viii} —F1—K1 ^{vi}	94.27(6)
F1 ⁱⁱ —Re1—F1 ⁱⁱⁱ	180.00(19)	F1 ^{xi} —K1—F1 ^x	65.46(11)
F1—Re1—F1 ^{iv}	93.92(12)	F1 ^{xi} —K1—F1 ^{xii}	65.46(11)
F1 ⁱ —Re1—F1 ^{iv}	86.08(12)	F1 ^x —K1—F1 ^{xii}	65.46(11)
F1 ⁱⁱ —Re1—F1 ^{iv}	86.08(12)	F1 ^{xi} —K1—F1 ^{xiii}	62.44(10)
F1 ⁱⁱⁱ —Re1—F1 ^{iv}	93.92(12)	F1 ^x —K1—F1 ^{xiii}	127.81(6)
F1—Re1—F1 ^v	86.08(12)	F1 ^{xii} —K1—F1 ^{xiii}	95.05(6)
F1 ⁱ —Re1—F1 ^v	93.92(12)	F1 ^{xi} —K1—F1 ^{xiv}	62.44(10)
F1 ⁱⁱ —Re1—F1 ^v	93.92(12)	F1 ^x —K1—F1 ^{xiv}	95.05(6)
F1 ⁱⁱⁱ —Re1—F1 ^v	86.08(12)	F1 ^{xii} —K1—F1 ^{xiv}	127.81(6)
F1 ^{iv} —Re1—F1 ^v	180.00(7)	F1 ^{xiii} —K1—F1 ^{xiv}	58.10(11)
F1—Re1—K1 ⁱ	126.206(14)	F1 ^{xi} —K1—F1 ^{iv}	95.05(6)
F1 ⁱ —Re1—K1 ⁱ	53.794(14)	F1 ^x —K1—F1 ^{iv}	127.81(6)
F1 ⁱⁱ —Re1—K1 ⁱ	125.81(9)	F1 ^{xii} —K1—F1 ^{iv}	62.44(10)
F1 ⁱⁱⁱ —Re1—K1 ⁱ	54.19(9)	F1 ^{xiii} —K1—F1 ^{iv}	61.22(12)
F1 ^{iv} —Re1—K1 ⁱ	126.205(14)	F1 ^{xiv} —K1—F1 ^{iv}	118.98(2)
F1 ^v —Re1—K1 ⁱ	53.795(14)	F1 ^{xi} —K1—F1 ^{xv}	95.05(6)
F1—Re1—K1 ^{vi}	54.19(9)	F1 ^x —K1—F1 ^{xv}	62.44(10)
F1 ⁱ —Re1—K1 ^{vi}	125.81(9)	F1 ^{xii} —K1—F1 ^{xv}	127.81(6)
F1 ⁱⁱ —Re1—K1 ^{vi}	53.794(14)	F1 ^{xiii} —K1—F1 ^{xv}	118.98(2)
F1 ⁱⁱⁱ —Re1—K1 ^{vi}	126.206(14)	F1 ^{xiv} —K1—F1 ^{xv}	61.22(12)
F1 ^{iv} —Re1—K1 ^{vi}	126.205(14)	F1 ^{iv} —K1—F1 ^{xv}	168.22(13)
F1 ^v —Re1—K1 ^{vi}	53.795(14)	F1 ^{xi} —K1—F1 ^{xvi}	127.81(6)

K1 ⁱ —Re1—K1 ^{vi}	107.11(3)	F1 ^x —K1—F1 ^{xvi}	62.44(10)
F1—Re1—K1 ^{vii}	125.81(9)	F1 ^{xii} —K1—F1 ^{xvi}	95.05(6)
F1 ⁱ —Re1—K1 ^{vii}	54.19(9)	F1 ^{xiii} —K1—F1 ^{xvi}	168.22(13)
F1 ⁱⁱ —Re1—K1 ^{vii}	126.206(14)	F1 ^{xiv} —K1—F1 ^{xvi}	118.98(2)
F1 ⁱⁱⁱ —Re1—K1 ^{vii}	53.794(14)	F1 ^{iv} —K1—F1 ^{xvi}	118.98(2)
F1 ^{iv} —Re1—K1 ^{vii}	53.795(14)	F1 ^{xv} —K1—F1 ^{xvi}	58.10(11)
F1 ^v —Re1—K1 ^{vii}	126.205(14)	F1 ^{xi} —K1—F1	127.81(6)
K1 ⁱ —Re1—K1 ^{vii}	72.89(3)	F1 ^x —K1—F1	95.05(6)
K1 ^{vi} —Re1—K1 ^{vii}	180.000	F1 ^{xii} —K1—F1	62.44(10)
F1—Re1—K1	53.794(14)	F1 ^{xiii} —K1—F1	118.98(2)
F1 ⁱ —Re1—K1	126.206(14)	F1 ^{xiv} —K1—F1	168.22(13)
F1 ⁱⁱ —Re1—K1	54.19(9)	F1 ^{iv} —K1—F1	58.09(11)
F1 ⁱⁱⁱ —Re1—K1	125.81(9)	F1 ^{xv} —K1—F1	118.98(2)
F1 ^{iv} —Re1—K1	53.794(14)	F1 ^{xvi} —K1—F1	61.22(11)
F1 ^v —Re1—K1	126.206(14)	F1 ^{xi} —K1—F1 ^{xvii}	105.55(10)
K1 ⁱ —Re1—K1	180.000	F1 ^x —K1—F1 ^{xvii}	144.70(4)
K1 ^{vi} —Re1—K1	72.89(3)	F1 ^{xii} —K1—F1 ^{xvii}	144.70(4)
K1 ^{vii} —Re1—K1	107.11(3)	F1 ^{xiii} —K1—F1 ^{xvii}	53.8(1)
F1—Re1—K1 ^{viii}	53.795(14)	F1 ^{xiv} —K1—F1 ^{xvii}	53.8(1)
F1 ⁱ —Re1—K1 ^{viii}	126.205(14)	F1 ^{iv} —K1—F1 ^{xvii}	85.73(6)
F1 ⁱⁱ —Re1—K1 ^{viii}	126.206(14)	F1 ^{xv} —K1—F1 ^{xvii}	85.73(6)
F1 ⁱⁱⁱ —Re1—K1 ^{viii}	53.794(14)	F1 ^{xvi} —K1—F1 ^{xvii}	114.69(6)
F1 ^{iv} —Re1—K1 ^{viii}	125.81(9)	F1—K1—F1 ^{xvii}	114.69(6)
F1 ^v —Re1—K1 ^{viii}	54.19(9)	F1 ^{xi} —K1—F1 ⁱⁱ	144.70(4)
K1 ⁱ —Re1—K1 ^{viii}	72.90(3)	F1 ^x —K1—F1 ⁱⁱ	144.70(4)
K1 ^{vi} —Re1—K1 ^{viii}	72.90(3)	F1 ^{xii} —K1—F1 ⁱⁱ	105.55(10)
K1 ^{vii} —Re1—K1 ^{viii}	107.10(3)	F1 ^{xiii} —K1—F1 ⁱⁱ	85.73(6)
K1—Re1—K1 ^{viii}	107.10(3)	F1 ^{xiv} —K1—F1 ⁱⁱ	114.69(6)
F1—Re1—K1 ^{ix}	126.205(14)	F1 ^{iv} —K1—F1 ⁱⁱ	53.8(1)
F1 ⁱ —Re1—K1 ^{ix}	53.795(14)	F1 ^{xv} —K1—F1 ⁱⁱ	114.69(6)
F1 ⁱⁱ —Re1—K1 ^{ix}	53.794(14)	F1 ^{xvi} —K1—F1 ⁱⁱ	85.73(6)
F1 ⁱⁱⁱ —Re1—K1 ^{ix}	126.206(14)	F1—K1—F1 ⁱⁱ	53.8(1)
F1 ^{iv} —Re1—K1 ^{ix}	54.19(9)	F1 ^{xvii} —K1—F1 ⁱⁱ	60.91(10)
F1 ^v —Re1—K1 ^{ix}	125.81(9)	F1 ^{xi} —K1—F1 ^{vi}	144.70(4)
K1 ⁱ —Re1—K1 ^{ix}	107.10(3)	F1 ^x —K1—F1 ^{vi}	105.55(10)
K1 ^{vi} —Re1—K1 ^{ix}	107.10(3)	F1 ^{xii} —K1—F1 ^{vi}	144.70(4)
K1 ^{vii} —Re1—K1 ^{ix}	72.90(3)	F1 ^{xiii} —K1—F1 ^{vi}	114.69(6)
K1—Re1—K1 ^{ix}	72.90(3)	F1 ^{xiv} —K1—F1 ^{vi}	85.73(6)
K1 ^{viii} —Re1—K1 ^{ix}	180.000	F1 ^{iv} —K1—F1 ^{vi}	114.69(6)
Re1—F1—K1 ^x	161.08(14)	F1 ^{xv} —K1—F1 ^{vi}	53.8(1)
Re1—F1—K1	93.79(6)	F1 ^{xvi} —K1—F1 ^{vi}	53.8(1)
K1 ^x —F1—K1	84.95(6)	F1—K1—F1 ^{vi}	85.73(6)
Re1—F1—K1 ^{viii}	93.79(6)	F1 ^{xvii} —K1—F1 ^{vi}	60.91(10)
K1 ^x —F1—K1 ^{viii}	84.95(6)	F1 ⁱⁱ —K1—F1 ^{vi}	60.91(10)

Symmetry codes: (i) $-x, -y, -z$; (ii) $x-y, x, -z$; (iii) $-x+y, -x, z$; (iv) $-y, x-y, z$; (v) $y, -x+y, -z$; (vi) $1-x, 1-y, -z$; (vii) $-1+x, -1+y, z$; (viii) $x, -1+y, z$; (ix) $-x, 1-y, -z$; (x) $1-x, 1-y, 1-z$; (xi) $y, 1-x+y, 1-z$; (xii) $x-y, x, 1-z$; (xiii) $-x+y, 1-x, z$; (xiv) $x, 1+y, z$; (xv) $1-y, 1+x-y, z$; (xvi) $1-x+y, 1-x, z$; (xvii) $y, 1-x+y, -z$.

Geometry.

Anisotropic displacement parameters [\AA^2] for Rb_2ReF_6						
Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Re1	0.0133(6)	0.0133(6)	0.0205(8)	0.0066(3)	0.00000	0.00000
F1	0.015(4)	0.017(3)	0.012(3)	0.0077(19)	0.001(3)	0.0007(14)
Rb1	0.0131(8)	0.0131(8)	0.0152(12)	0.0065(4)	0.00000	0.00000

Geometric parameters, bond lengths [\AA] and angles [$^\circ$] for Rb_2ReF_6			
Re1—F1 ⁱ	1.945(7)	F1—Rb1 ^{viii}	3.0181(11)
Re1—F1 ⁱⁱ	1.945(7)	F1—Rb1 ^{vi}	3.058(7)
Re1—F1 ⁱⁱⁱ	1.945(7)	Rb1—F1 ^{xi}	2.907(7)
Re1—F1 ^{iv}	1.945(7)	Rb1—F1 ^x	2.907(7)
Re1—F1 ^v	1.945(7)	Rb1—F1 ^{xii}	2.907(7)
Re1—F1	1.945(7)	Rb1—F1 ^{xiii}	3.0181(11)
Re1—Rb1 ⁱ	3.733(1)	Rb1—F1 ^{xiv}	3.0181(11)
Re1—Rb1 ^{vi}	3.7330(11)	Rb1—F1 ^v	3.0181(11)
Re1—Rb1 ^{vii}	3.7330(11)	Rb1—F1 ^{xv}	3.0181(11)
Re1—Rb1	3.733(1)	Rb1—F1 ^{xvi}	3.0181(11)
Re1—Rb1 ^{viii}	3.7330(11)	Rb1—F1 ^{xvii}	3.058(7)
Re1—Rb1 ^{ix}	3.7330(11)	Rb1—F1 ⁱⁱ	3.058(7)
F1—Rb1 ^x	2.907(7)	Rb1—F1 ^{vi}	3.058(7)
F1—Rb1	3.0181(11)		
F1 ⁱ —Re1—F1 ⁱⁱ	93.5(3)	Rb1—F1—Rb1 ^{viii}	166.2(3)
F1 ⁱ —Re1—F1 ⁱⁱⁱ	86.5(3)	Re1—F1—Rb1 ^{vi}	93.9(2)
F1 ⁱⁱ —Re1—F1 ⁱⁱⁱ	180.0(3)	Rb1 ^x —F1—Rb1 ^{vi}	104.5(2)
F1 ⁱ —Re1—F1 ^{iv}	93.5(3)	Rb1—F1—Rb1 ^{vi}	94.26(14)
F1 ⁱⁱ —Re1—F1 ^{iv}	93.5(3)	Rb1 ^{viii} —F1—Rb1 ^{vi}	94.26(14)
F1 ⁱⁱⁱ —Re1—F1 ^{iv}	86.5(3)	F1 ^{xi} —Rb1—F1 ^x	65.8(2)
F1 ⁱ —Re1—F1 ^v	86.5(3)	F1 ^{xi} —Rb1—F1 ^{xii}	65.8(2)
F1 ⁱⁱ —Re1—F1 ^v	86.5(3)	F1 ^x —Rb1—F1 ^{xii}	65.8(2)
F1 ⁱⁱⁱ —Re1—F1 ^v	93.5(3)	F1 ^{xi} —Rb1—F1 ^{xiii}	62.7(2)
F1 ^{iv} —Re1—F1 ^v	180.000	F1 ^x —Rb1—F1 ^{xiii}	128.31(8)
F1 ⁱ —Re1—F1	180.000	F1 ^{xii} —Rb1—F1 ^{xiii}	96.30(14)
F1 ⁱⁱ —Re1—F1	86.5(3)	F1 ^{xi} —Rb1—F1 ^{xiv}	62.7(2)

F1 ⁱⁱⁱ —Re1—F1	93.5(3)	F1 ^x —Rb1—F1 ^{xiv}	96.30(14)
F1 ^{iv} —Re1—F1	86.5(3)	F1 ^{xii} —Rb1—F1 ^{xiv}	128.31(8)
F1 ^v —Re1—F1	93.5(3)	F1 ^{xiii} —Rb1—F1 ^{xiv}	56.0(3)
F1 ⁱ —Re1—Rb1 ⁱ	53.64(2)	F1 ^{xi} —Rb1—F1 ^v	96.30(14)
F1 ⁱⁱ —Re1—Rb1 ⁱ	125.2(2)	F1 ^x —Rb1—F1 ^v	128.31(8)
F1 ⁱⁱⁱ —Re1—Rb1 ⁱ	54.8(2)	F1 ^{xii} —Rb1—F1 ^v	62.7(2)
F1 ^{iv} —Re1—Rb1 ⁱ	53.64(2)	F1 ^{xiii} —Rb1—F1 ^v	63.1(3)
F1 ^v —Re1—Rb1 ⁱ	126.36(2)	F1 ^{xiv} —Rb1—F1 ^v	118.68(6)
F1—Re1—Rb1 ⁱ	126.36(2)	F1 ^{xi} —Rb1—F1 ^{xv}	96.30(14)
F1 ⁱ —Re1—Rb1 ^{vi}	125.2(2)	F1 ^x —Rb1—F1 ^{xv}	62.7(2)
F1 ⁱⁱ —Re1—Rb1 ^{vi}	53.64(2)	F1 ^{xii} —Rb1—F1 ^{xv}	128.31(8)
F1 ⁱⁱⁱ —Re1—Rb1 ^{vi}	126.36(2)	F1 ^{xiii} —Rb1—F1 ^{xv}	118.68(5)
F1 ^{iv} —Re1—Rb1 ^{vi}	53.64(2)	F1 ^{xiv} —Rb1—F1 ^{xv}	63.1(3)
F1 ^v —Re1—Rb1 ^{vi}	126.36(2)	F1 ^v —Rb1—F1 ^{xv}	166.2(3)
F1—Re1—Rb1 ^{vi}	54.8(2)	F1 ^{xi} —Rb1—F1 ^{xvi}	128.31(8)
Rb1 ⁱ —Re1—Rb1 ^{vi}	106.77(3)	F1 ^x —Rb1—F1 ^{xvi}	62.7(2)
F1 ⁱ —Re1—Rb1 ^{vii}	54.8(2)	F1 ^{xii} —Rb1—F1 ^{xvi}	96.30(14)
F1 ⁱⁱ —Re1—Rb1 ^{vii}	126.36(2)	F1 ^{xiii} —Rb1—F1 ^{xvi}	166.2(3)
F1 ⁱⁱⁱ —Re1—Rb1 ^{vii}	53.64(2)	F1 ^{xiv} —Rb1—F1 ^{xvi}	118.68(6)
F1 ^{iv} —Re1—Rb1 ^{vii}	126.36(2)	F1 ^v —Rb1—F1 ^{xvi}	118.68(5)
F1 ^v —Re1—Rb1 ^{vii}	53.64(2)	F1 ^{xv} —Rb1—F1 ^{xvi}	56.0(3)
F1—Re1—Rb1 ^{vii}	125.2(2)	F1 ^{xi} —Rb1—F1	128.31(8)
Rb1 ⁱ —Re1—Rb1 ^{vii}	73.23(3)	F1 ^x —Rb1—F1	96.30(14)
Rb1 ^{vi} —Re1—Rb1 ^{vii}	180.000	F1 ^{xii} —Rb1—F1	62.7(2)
F1 ⁱ —Re1—Rb1	126.36(2)	F1 ^{xiii} —Rb1—F1	118.68(6)
F1 ⁱⁱ —Re1—Rb1	54.8(2)	F1 ^{xiv} —Rb1—F1	166.2(3)
F1 ⁱⁱⁱ —Re1—Rb1	125.2(2)	F1 ^v —Rb1—F1	56.0(3)
F1 ^{iv} —Re1—Rb1	126.36(2)	F1 ^{xv} —Rb1—F1	118.68(5)
F1 ^v —Re1—Rb1	53.64(2)	F1 ^{xvi} —Rb1—F1	63.1(3)
F1—Re1—Rb1	53.64(2)	F1 ^{xi} —Rb1—F1 ^{xvii}	104.5(2)
Rb1 ⁱ —Re1—Rb1	180.000	F1 ^x —Rb1—F1 ^{xvii}	144.30(9)
Rb1 ^{vi} —Re1—Rb1	73.23(3)	F1 ^{xii} —Rb1—F1 ^{xvii}	144.30(9)
Rb1 ^{vii} —Re1—Rb1	106.77(3)	F1 ^{xiii} —Rb1—F1 ^{xvii}	52.0(2)
F1 ⁱ —Re1—Rb1 ^{viii}	126.36(2)	F1 ^{xiv} —Rb1—F1 ^{xvii}	52.0(2)
F1 ⁱⁱ —Re1—Rb1 ^{viii}	126.36(2)	F1 ^v —Rb1—F1 ^{xvii}	85.74(14)
F1 ⁱⁱⁱ —Re1—Rb1 ^{viii}	53.64(2)	F1 ^{xv} —Rb1—F1 ^{xvii}	85.74(14)
F1 ^{iv} —Re1—Rb1 ^{viii}	54.8(2)	F1 ^{xvi} —Rb1—F1 ^{xvii}	114.25(9)
F1 ^v —Re1—Rb1 ^{viii}	125.2(2)	F1—Rb1—F1 ^{xvii}	114.25(9)
F1—Re1—Rb1 ^{viii}	53.64(2)	F1 ^{xi} —Rb1—F1 ⁱⁱ	144.30(9)
Rb1 ⁱ —Re1—Rb1 ^{viii}	73.23(3)	F1 ^x —Rb1—F1 ⁱⁱ	144.30(9)
Rb1 ^{vi} —Re1—Rb1 ^{viii}	73.23(3)	F1 ^{xii} —Rb1—F1 ⁱⁱ	104.5(2)
Rb1 ^{vii} —Re1—Rb1 ^{viii}	106.77(3)	F1 ^{xiii} —Rb1—F1 ⁱⁱ	85.74(14)
Rb1—Re1—Rb1 ^{viii}	106.77(3)	F1 ^{xiv} —Rb1—F1 ⁱⁱ	114.25(9)
F1 ⁱ —Re1—Rb1 ^{ix}	53.64(2)	F1 ^v —Rb1—F1 ⁱⁱ	52.0(2)

F1 ⁱⁱ —Re1—Rb1 ^{ix}	53.64(2)	F1 ^{xv} —Rb1—F1 ⁱⁱ	114.25(9)
F1 ⁱⁱⁱ —Re1—Rb1 ^{ix}	126.36(2)	F1 ^{xvi} —Rb1—F1 ⁱⁱ	85.74(14)
F1 ^{iv} —Re1—Rb1 ^{ix}	125.2(2)	F1—Rb1—F1 ⁱⁱ	52.0(2)
F1 ^v —Re1—Rb1 ^{ix}	54.8(2)	F1 ^{xvii} —Rb1—F1 ⁱⁱ	62.2(2)
F1—Re1—Rb1 ^{ix}	126.36(2)	F1 ^{xi} —Rb1—F1 ^{vi}	144.30(9)
Rb1 ⁱ —Re1—Rb1 ^{ix}	106.77(3)	F1 ^x —Rb1—F1 ^{vi}	104.5(2)
Rb1 ^{vi} —Re1—Rb1 ^{ix}	106.77(3)	F1 ^{xii} —Rb1—F1 ^{vi}	144.30(9)
Rb1 ^{vii} —Re1—Rb1 ^{ix}	73.23(3)	F1 ^{xiii} —Rb1—F1 ^{vi}	114.25(9)
Rb1—Re1—Rb1 ^{ix}	73.23(3)	F1 ^{xiv} —Rb1—F1 ^{vi}	85.74(14)
Rb1 ^{viii} —Re1—Rb1 ^{ix}	180.000	F1 ^v —Rb1—F1 ^{vi}	114.25(9)
Re1—F1—Rb1 ^x	161.6(3)	F1 ^{xv} —Rb1—F1 ^{vi}	52.0(2)
Re1—F1—Rb1	95.10(14)	F1 ^{xvi} —Rb1—F1 ^{vi}	52.0(2)
Rb1 ^x —F1—Rb1	83.70(14)	F1—Rb1—F1 ^{vi}	85.74(14)
Re1—F1—Rb1 ^{viii}	95.10(14)	F1 ^{xvii} —Rb1—F1 ^{vi}	62.2(2)
Rb1 ^x —F1—Rb1 ^{viii}	83.70(14)	F1 ⁱⁱ —Rb1—F1 ^{vi}	62.2(2)

Symmetry codes: (i) -x, -y, -z; (ii) x-y, x, -z; (iii) -x+y, -x, z; (iv) y, -x+y, -z; (v) -y, x-y, z; (vi) 1-x, 1-y, -z; (vii) -1+x, -1+y, z; (viii) x, -1+y, z; (ix) -x, 1-y, -z; (x) 1-x, 1-y, 1-z; (xi) y, 1-x+y, 1-z; (xii) x-y, x, 1-z; (xiii) -x+y, 1-x, z; (xiv) x, 1+y, z; (xv) 1-y, 1+x-y, z; (xvi) 1-x+y, 1-x, z; (xvii) y, 1-x+y, -z.

Geometry.

Anisotropic displacement parameters [\AA^2] for Cs ₂ ReF ₆						
Atom	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₁₂	U ₁₃	U ₂₃
Re1	0.00483(16)	0.00483(16)	0.0032(2)	0.00241(8)	0.00000	0.00000
F1	0.0088(8)	0.0107(6)	0.0075(9)	0.0044(4)	-0.0023(6)	-0.0012(3)
Cs1	0.00661(16)	0.00661(16)	0.0052(2)	0.00331(8)	0.00000	0.00000

Geometric parameters, bond lengths [\AA] and angles [$^\circ$] for Cs ₂ ReF ₆			
Re1—F1 ⁱ	1.9594(18)	F1—Cs1 ^{viii}	3.1655(6)
Re1—F1 ⁱⁱ	1.9594(18)	F1—Cs1 ^{vi}	3.224(2)

Re1—F1 ⁱⁱⁱ	1.9594(18)	Cs1—F1 ^{xi}	3.0955(19)
Re1—F1 ^{iv}	1.9594(18)	Cs1—F1 ^x	3.0955(19)
Re1—F1 ^v	1.9594(18)	Cs1—F1 ^{xii}	3.0955(19)
Re1—F1	1.9594(18)	Cs1—F1 ^{xiii}	3.1655(6)
Re1—Cs1 ⁱ	3.9100(6)	Cs1—F1 ^{xiv}	3.1655(6)
Re1—Cs1 ^{vi}	3.9100(6)	Cs1—F1 ⁱⁱⁱ	3.1655(6)
Re1—Cs1 ^{vii}	3.9100(6)	Cs1—F1 ^{xv}	3.1655(6)
Re1—Cs1	3.9100(6)	Cs1—F1 ^{xvi}	3.1655(6)
Re1—Cs1 ^{viii}	3.9100(6)	Cs1—F1 ^{xvii}	3.224(2)
Re1—Cs1 ^{ix}	3.9100(6)	Cs1—F1 ^{iv}	3.224(2)
F1—Cs1 ^x	3.0955(19)	Cs1—F1 ^{vi}	3.224(2)
F1—Cs1	3.1655(6)		
F1 ⁱ —Re1—F1 ⁱⁱ	93.14(7)	Cs1—F1—Cs1 ^{viii}	163.82(6)
F1 ⁱ —Re1—F1 ⁱⁱⁱ	86.86(7)	Re1—F1—Cs1 ^{vi}	94.78(7)
F1 ⁱⁱ —Re1—F1 ⁱⁱⁱ	180.00(4)	Cs1 ^x —F1—Cs1 ^{vi}	102.55(5)
F1 ⁱ —Re1—F1 ^{iv}	93.14(7)	Cs1—F1—Cs1 ^{vi}	94.07(3)
F1 ⁱⁱ —Re1—F1 ^{iv}	93.14(7)	Cs1 ^{viii} —F1—Cs1 ^{vi}	94.07(3)
F1 ⁱⁱⁱ —Re1—F1 ^{iv}	86.86(7)	F1 ^{xi} —Cs1—F1 ^x	67.11(6)
F1 ⁱ —Re1—F1 ^v	86.86(7)	F1 ^{xi} —Cs1—F1 ^{xii}	67.11(6)
F1 ⁱⁱ —Re1—F1 ^v	86.86(7)	F1 ^x —Cs1—F1 ^{xii}	67.11(6)
F1 ⁱⁱⁱ —Re1—F1 ^v	93.14(7)	F1 ^{xi} —Cs1—F1 ^{xiii}	62.38(6)
F1 ^{iv} —Re1—F1 ^v	180.00(8)	F1 ^x —Cs1—F1 ^{xiii}	129.122(17)
F1 ⁱ —Re1—F1	180.000	F1 ^{xii} —Cs1—F1 ^{xiii}	97.70(3)
F1 ⁱⁱ —Re1—F1	86.86(7)	F1 ^{xi} —Cs1—F1 ^{xiv}	62.38(6)
F1 ⁱⁱⁱ —Re1—F1	93.14(7)	F1 ^x —Cs1—F1 ^{xiv}	97.70(3)
F1 ^{iv} —Re1—F1	86.86(7)	F1 ^{xii} —Cs1—F1 ^{xiv}	129.122(17)
F1 ^v —Re1—F1	93.14(7)	F1 ^{xiii} —Cs1—F1 ^{xiv}	53.43(7)
F1 ⁱ —Re1—Cs1 ⁱ	53.533(6)	F1 ^{xi} —Cs1—F1 ⁱⁱⁱ	97.70(3)
F1 ⁱⁱ —Re1—Cs1 ⁱ	53.533(6)	F1 ^x —Cs1—F1 ⁱⁱⁱ	129.122(17)
F1 ⁱⁱⁱ —Re1—Cs1 ⁱ	126.467(6)	F1 ^{xii} —Cs1—F1 ⁱⁱⁱ	62.38(6)
F1 ^{iv} —Re1—Cs1 ⁱ	124.74(6)	F1 ^{xiii} —Cs1—F1 ⁱⁱⁱ	65.44(7)
F1 ^v —Re1—Cs1 ⁱ	55.26(6)	F1 ^{xiv} —Cs1—F1 ⁱⁱⁱ	118.323(15)
F1—Re1—Cs1 ⁱ	126.467(6)	F1 ^{xi} —Cs1—F1 ^{xv}	97.70(3)
F1 ⁱ —Re1—Cs1 ^{vi}	124.74(6)	F1 ^x —Cs1—F1 ^{xv}	62.38(6)
F1 ⁱⁱ —Re1—Cs1 ^{vi}	53.533(6)	F1 ^{xii} —Cs1—F1 ^{xv}	129.122(17)
F1 ⁱⁱⁱ —Re1—Cs1 ^{vi}	126.467(6)	F1 ^{xiii} —Cs1—F1 ^{xv}	118.323(14)
F1 ^{iv} —Re1—Cs1 ^{vi}	53.532(6)	F1 ^{xiv} —Cs1—F1 ^{xv}	65.44(7)
F1 ^v —Re1—Cs1 ^{vi}	126.468(6)	F1 ⁱⁱⁱ —Cs1—F1 ^{xv}	163.82(6)
F1—Re1—Cs1 ^{vi}	55.26(6)	F1 ^{xi} —Cs1—F1	129.123(17)
Cs1 ⁱ —Re1—Cs1 ^{vi}	106.554(9)	F1 ^x —Cs1—F1	97.70(3)
F1 ⁱ —Re1—Cs1 ^{vii}	55.26(6)	F1 ^{xii} —Cs1—F1	62.38(6)
F1 ⁱⁱ —Re1—Cs1 ^{vii}	126.467(6)	F1 ^{xiii} —Cs1—F1	118.323(15)
F1 ⁱⁱⁱ —Re1—Cs1 ^{vii}	53.533(6)	F1 ^{xiv} —Cs1—F1	163.82(6)
F1 ^{iv} —Re1—Cs1 ^{vii}	126.468(6)	F1 ⁱⁱⁱ —Cs1—F1	53.43(7)
F1 ^v —Re1—Cs1 ^{vii}	53.532(6)	F1 ^{xv} —Cs1—F1	118.323(15)

F1—Re1—Cs1 ^{vii}	124.74(6)	F1 ^{xi} —Cs1—F1 ^{xvi}	129.122(17)
Cs1 ⁱ —Re1—Cs1 ^{vii}	73.446(9)	F1 ^x —Cs1—F1 ^{xvi}	62.38(6)
Cs1 ^{vi} —Re1—Cs1 ^{vii}	180.000	F1 ^{xii} —Cs1—F1 ^{xvi}	97.70(3)
F1 ⁱ —Re1—Cs1	126.467(6)	F1 ^{xiii} —Cs1—F1 ^{xvi}	163.82(6)
F1 ⁱⁱ —Re1—Cs1	126.467(6)	F1 ^{xiv} —Cs1—F1 ^{xvi}	118.323(15)
F1 ⁱⁱⁱ —Re1—Cs1	53.533(6)	F1 ⁱⁱⁱ —Cs1—F1 ^{xvi}	118.323(15)
F1 ^{iv} —Re1—Cs1	55.26(6)	F1 ^{xv} —Cs1—F1 ^{xvi}	53.43(7)
F1 ^v —Re1—Cs1	124.74(6)	F1—Cs1—F1 ^{xvi}	65.44(7)
F1—Re1—Cs1	53.533(6)	F1 ^{xi} —Cs1—F1 ^{xvii}	102.55(5)
Cs1 ⁱ —Re1—Cs1	180.000	F1 ^x —Cs1—F1 ^{xvii}	143.51(2)
Cs1 ^{vi} —Re1—Cs1	73.447(8)	F1 ^{xii} —Cs1—F1 ^{xvii}	143.51(2)
Cs1 ^{vii} —Re1—Cs1	106.553(8)	F1 ^{xiii} —Cs1—F1 ^{xvii}	49.86(5)
F1 ⁱ —Re1—Cs1 ^{viii}	126.467(6)	F1 ^{xiv} —Cs1—F1 ^{xvii}	49.86(5)
F1 ⁱⁱ —Re1—Cs1 ^{viii}	55.26(6)	F1 ⁱⁱⁱ —Cs1—F1 ^{xvii}	85.93(3)
F1 ⁱⁱⁱ —Re1—Cs1 ^{viii}	124.74(6)	F1 ^{xv} —Cs1—F1 ^{xvii}	85.93(3)
F1 ^{iv} —Re1—Cs1 ^{viii}	126.467(6)	F1—Cs1—F1 ^{xvii}	113.96(2)
F1 ^v —Re1—Cs1 ^{viii}	53.533(6)	F1 ^{xvi} —Cs1—F1 ^{xvii}	113.96(2)
F1—Re1—Cs1 ^{viii}	53.533(6)	F1 ^{xi} —Cs1—F1 ^{iv}	143.51(2)
Cs1 ⁱ —Re1—Cs1 ^{viii}	73.447(8)	F1 ^x —Cs1—F1 ^{iv}	143.51(2)
Cs1 ^{vi} —Re1—Cs1 ^{viii}	73.447(9)	F1 ^{xii} —Cs1—F1 ^{iv}	102.55(5)
Cs1 ^{vii} —Re1—Cs1 ^{viii}	106.553(9)	F1 ^{xiii} —Cs1—F1 ^{iv}	85.93(3)
Cs1—Re1—Cs1 ^{viii}	106.553(9)	F1 ^{xiv} —Cs1—F1 ^{iv}	113.96(2)
F1 ⁱ —Re1—Cs1 ^{ix}	53.533(6)	F1 ⁱⁱⁱ —Cs1—F1 ^{iv}	49.86(5)
F1 ⁱⁱ —Re1—Cs1 ^{ix}	124.74(6)	F1 ^{xv} —Cs1—F1 ^{iv}	113.96(2)
F1 ⁱⁱⁱ —Re1—Cs1 ^{ix}	55.26(6)	F1—Cs1—F1 ^{iv}	49.86(5)
F1 ^{iv} —Re1—Cs1 ^{ix}	53.533(6)	F1 ^{xvi} —Cs1—F1 ^{iv}	85.93(3)
F1 ^v —Re1—Cs1 ^{ix}	126.467(6)	F1 ^{xvii} —Cs1—F1 ^{iv}	64.10(5)
F1—Re1—Cs1 ^{ix}	126.467(6)	F1 ^{xi} —Cs1—F1 ^{vi}	143.51(2)
Cs1 ⁱ —Re1—Cs1 ^{ix}	106.553(8)	F1 ^x —Cs1—F1 ^{vi}	102.55(5)
Cs1 ^{vi} —Re1—Cs1 ^{ix}	106.553(9)	F1 ^{xii} —Cs1—F1 ^{vi}	143.51(2)
Cs1 ^{vii} —Re1—Cs1 ^{ix}	73.447(9)	F1 ^{xiii} —Cs1—F1 ^{vi}	113.96(2)
Cs1—Re1—Cs1 ^{ix}	73.447(9)	F1 ^{xiv} —Cs1—F1 ^{vi}	85.93(3)
Cs1 ^{viii} —Re1—Cs1 ^{ix}	180.000	F1 ⁱⁱⁱ —Cs1—F1 ^{vi}	113.96(2)
Re1—F1—Cs1 ^x	162.67(9)	F1 ^{xv} —Cs1—F1 ^{vi}	49.86(5)
Re1—F1—Cs1	96.61(3)	F1—Cs1—F1 ^{vi}	85.93(3)
Cs1 ^x —F1—Cs1	82.30(3)	F1 ^{xvi} —Cs1—F1 ^{vi}	49.86(5)
Re1—F1—Cs1 ^{viii}	96.61(3)	F1 ^{xvii} —Cs1—F1 ^{vi}	64.10(5)
Cs1 ^x —F1—Cs1 ^{viii}	82.30(3)	F1 ^{iv} —Cs1—F1 ^{vi}	64.10(5)

Symmetry codes: (i) -x, -y, -z; (ii) y, -x+y, -z; (iii) -y, x-y, z; (iv) x-y, x, -z; (v) -x+y, -x, z; (vi) 1-x, 1-y, -z; (vii) -1+x, -1+y, z; (viii) x, -1+y, z; (ix) -x, 1-y, -z; (x) 1-x, 1-y, 1-z; (xi) y, 1-x+y, 1-z; (xii) x-y, x, 1-z; (xiii) -x+y, 1-x, z; (xiv) x, 1+y, z; (xv) 1-y, 1+x-y, z; (xvi) 1-x+y, 1-x, z; (xvii) y, 1-x+y, -z.