

Synthese und Kristallstruktur von $[\text{EMIm}]_2[\text{TiBr}_6]$

Leye, J.-C. und Adam, A., Clausthal-Zellerfeld/D,

Prof. Dr. Arnold Adam, Technische Universität Clausthal, Institut für Anorganische und Analytische Chemie, Paul-Ernst-Str. 4, 38678 Clausthal-Zellerfeld

Homoleptische Halogenidotitanate gehören zu einer wichtigen Gruppe in der Koordinationschemie. Zugänglich sind sie durch die Addition von geeigneten Halogendonoren an Titan tetrahalogeniden. In der Vergangenheit wurde als Halogendonor eine Vielzahl an organischen und anorganischen Komponenten eingesetzt.^[1] Da in letzter Zeit auch ionische Flüssigkeiten immer mehr Einsatz in der Koordinationschemie finden und kürzlich die Synthese von Chloridotitanaten mit $[\text{EMIm}]$ als ionische Flüssigkeitskation publiziert wurde, liegt der Schluss nahe, weitere Halogene einzusetzen.^[2] Zusätzlicher Anreiz sind die bis dato limitierten Informationen bezüglich des kristallografischen Aufbaus von Hexabromidotitanaten.^[3]

$[\text{EMIm}]_2[\text{TiBr}_6]$ kristallisiert in der orthorhombischen Raumgruppe $Aba2$ (Nr. 41) mit vier Formeleinheiten pro Elementarzelle. Die Gitterparameter betragen $a = 9.805(1)$, $b = 14.755(2)$, $c = 15.546(3)$ Å und $V = 2249.1(6)$ Å³. Das Produkt wurde durch die Addition von $[\text{EMIm}]\text{Br}$ zu TiBr_4 in Dichlormethan dargestellt. Nach wenigen Minuten konnte eine Farbänderung ins Rote beobachtet werden. Die Kristallisation erfolgte nach dem Aufkonzentrieren unter Vakuum bei -15 °C. Abbildung 1 zeigt die Elementarzelle entlang der c -Richtung. $[\text{EMIm}]_2[\text{TiBr}_6]$ ist aus parallelen, alternierenden Schichten, bestehend aus den Titanbromid-Polyedern $[\text{TiBr}_6]^{2-}$ und ionischen Flüssigkeitseinheiten $[\text{EMIm}]^+$, aufgebaut. Dieses Koordinationspolyeder des Titans entspricht einem leicht verzerrten Oktaeder mit Bindungslängen von 2.489(1) bis 2.533(8) Å. Die *trans* Br—Ti—Br Winkel liegen mit einer maximalen Abweichung von 0.3 bei 180°. Die *cis* Br—Ti—Br Winkel liegen zwischen 89.8(2) und 90.2(1)°.

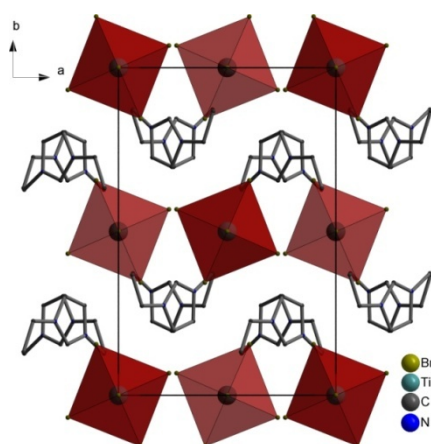


Abb. 1.: Elementarzelle von $[\text{EMIm}]_2[\text{TiBr}_6]$ entlang der c -Richtung

Literatur:

[1] T. J. Kistenmacher, G. D. Stucky, *Inorg. Chem.* **1971**, *10*, 122-132. [2] J.-C. Leye, M. Gjikaj, A. Adam, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2009**, 4837-4843. [3] J. Beck, U. Neisel, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2000**, *626*, 1620-1626