

Reaktionen des metalloiden Clusteranions $\{\text{Ge}_9[\text{Si}(\text{SiMe}_3)_3]_3\}^-$ in der Gasphase

Dr. Christian Schenk Karlsruhe (D), PD Dr. Andreas Schnepf Karlsruhe (D)

PD Dr. Andreas Schnepf, Institut für Anorganische Chemie, Gebäude 30.45, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), 76128 Karlsruhe

Das Clusteranion $\{\text{Ge}_9[\text{Si}(\text{SiMe}_3)_3]_3\}^-$ **1**^[1] wird mithilfe der Elektrospraymethode unzersetzt in die Gasphase überführt.^[2] Anschließend werden in einem FT-ICR-Massenspektrometer (*Fourier-Transformation-Ionen-Cyclotron*) seine Fragmentierung nach resonanter Anregung und sein Oxidationsverhalten gegenüber O_2 und Cl_2 untersucht.^[3]

Die Fragmentierungsversuche von **1** ergeben, anders als bei früheren off-resonanten Untersuchungen, hauptsächlich die Produktspezies Ge_9^- . Außerdem lassen sich mit der hier verwendeten on-resonanten Technik die Dissoziationsenergien für die Abspaltung der Neutralfragmente bestimmen. Besonderes Augenmerk gilt der Untersuchung des ersten Schrittes, bei dem in einer konzertierten Reaktion das sterisch überfrachtete $\text{Si}_2(\text{SiMe}_3)_6$ entsteht.

Gegenüber elementarem Sauerstoff ist gasförmiges **1** im Gegensatz zur kristallinen Clusterverbindung $\mathbf{1}\cdot\text{Li}(\text{THF})_4$ inert. Die Analogie zu den jüngst publizierten spinverbotenen Reaktionen zwischen Al_{13}^- und O_2 weist auf die generelle Bedeutung des Spinerhaltungssatzes bei Gasphasenreaktionen größerer Clustermoleküle hin.^[4]

Die spontane Oxidation von **1** mit Cl_2 verläuft über unterschiedliche Reaktionskanäle. DFT Rechnungen erlauben einen ersten Einblick in die komplexen primären Oxidationsschritte.

Literatur:

- [1] A. Schnepf, *Angew. Chem.* **2003**, *115*, 2728 – 2729; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2003** *42*, 2624 – 2625.
- [2] J. B. Fenn, *Angew. Chem.* **2003**, *115*, 3999-4024; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2003**, *42*, 3871 – 3894.
- [3] C. Schenk, F. Henke, M. Neumaier, M. Olzmann, H. Schnöckel, A. Schnepf, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2010**, *636*, 1173–1182.
- [4] R. Burgert, H. Schnöckel, A. Grubisic, X. Li, S. T. Stokes, G. F. Ganteför, B. Kiran, P. Jena, K. H. Bowen, *SCIENCE*, **2008**, *319*, 438 – 442.