

## Ringsystemen mit extrem elektronegativ substituierten Boratomen

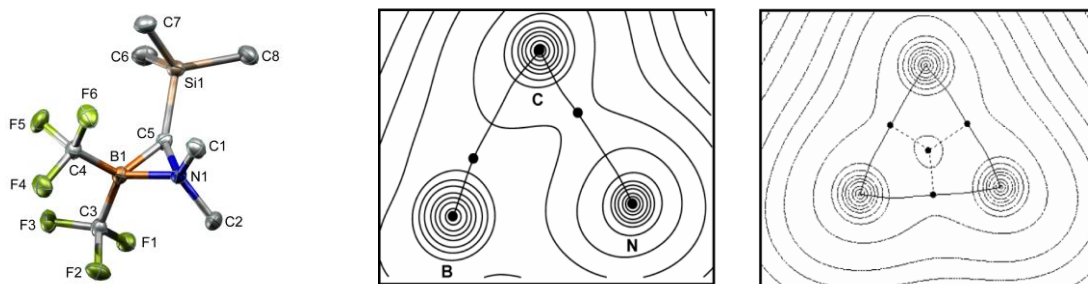
Winkelhaus D., Bielefeld/D

Prof. Dr. Norbert W. Mitzel, Universität Bielefeld, Lehrstuhl für Anorganische Chemie und Strukturchemie, Universitätsstraße 25, 33615 Bielefeld

Die „Atoms in Molecules-Theorie“ (AIM) von R. W. F. Bader beschreibt Bindungsverhältnisse unter anderem mit Kriterien wie Bindungspfade, bindungskritischen Punkte, sowie ring- und käfigkritische Punkte.<sup>[1]</sup> Besonders die Beschreibung von dativen Bindungen (closed shell interaction) konnte durch dieses Konzept wesentlich bereichert werden.<sup>[2]</sup>

In unserer Gruppe wurden verschiedene geminale Systeme untersucht, in denen ungewöhnliche Ladungsdichtetopologien auftreten.<sup>[3]</sup> Hydroxylaminosilane ( $X_3Si-O-NR_2$ )<sup>[4]</sup> liegen meist als Dreiringe mit kurzen Si...N-Abständen vor. Deren Elektronendichte-Topologien zeigen aber weder bindungskritische Punkte zwischen Si- und N-Atomen noch ringkritische Punkte. Diese Diskrepanz wirft die Frage auf, ob Dreiringssysteme mit dativen Bindungen prinzipiell von den einfachen Kriterien wie Bindungspfade nicht richtig erfasst werden.

Zur detaillierteren Untersuchung haben wir die Verbindung  $(F_3C)_2BCH(SiMe_3)NMe_2$ <sup>[6]</sup> synthetisiert, ihre Struktur bestimmt, die Elektronendichte berechnet und deren Topologie analysiert. Trotz der kurzen B-N-Bindung (ca. 1.6 Å) werden weder Bindungspfade noch bindungskritische Punkte gefunden. Im isoelektronischen und identisch substituierten Cyclopropan sind dagegen die erwarteten Topologieeigenschaften für die C-C-Bindung zu finden.



**Abbildung 1:** Kristallstruktur und Funktionsdiagramm der Elektronendichte in der B-C-N-Ebene von  $(F_3C)_2B-CH(SiMe_3)-NMe_2$  und dem Cyclopropan-System  $(F_3C)_2C-CH_2-CMe_2$ .

[1] R. F. W. Bader, *Atoms in Molecules: A Quantum Theory*, Clarendon Press, Oxford, **1990**.

[2] N. Kocher, J. Henn, B. Gostevskii, D. Kost, I. Kalikhman, B. Engels, D. Stalke, *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, *126*, 5563.

[3] a) N. W. Mitzel, U. Losehand, *Angew. Chem.* **1997**, *109*, 2897; b) U. Losehand, N. W. Mitzel, *Inorg. Chem.* **1998**, *37*, 3175.

[4] a) N. W. Mitzel, U. Losehand, *J. Am. Chem. Soc.* **1998**, *120*, 7320; b) N. W. Mitzel, U. Losehand, A. Wu, D. Cremer, D. W. H. Rankin, *J. Am. Chem. Soc.* **2000**, *122*, 4471.

[6] A. Ansorge, D. J. Brauer, H. Bürger, T. G. Pawelke, *Angew. Chem.* **1993**, 429.