

Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Synthese und Charakterisierung von Metallkomplexen der Gruppe 10 in Kombination mit Pincerliganden. Dafür sind unterschiedliche POCHOP-Varianten dargestellt worden, wobei Modifikationen der Phosphorsubstituenten sowie der Linkeratome erfolgten und verschiedene Funktionalisierungen des Ligandenrückgrats durchgeführt wurden. Darauf aufbauend erfolgte die Synthese und Optimierung der Chlorido- und Iodidokomplexe, wobei diverse literaturbekannte Varianten getestet und angepasst wurden. Anschließend erfolgte die Darstellung der Fluoridverbindungen, wobei die Bildung von Bifluoridokomplexen beobachtet werden konnte, welche umfangreich charakterisiert wurden. Die Bestimmung zahlreicher bis dato unbekannter Molekülstrukturen lieferten die Grundlage für einen Vergleich verschiedener DFT-Methoden zur Modellierung der Komplexe.

Ausgehend von den Palladiumiodidokomplexen erfolgten Untersuchungen zum halogen bonding-Verhalten mit Iod im Festkörper über Röntgenstrukturanalysen. Weiterhin wurden temperaturabhängige Titrationsexperimente von fünf Fluoridokomplexen mit Pentafluoriodbenzen zur Bestimmung des Wechselwirkungsverhalten in Lösung durchgeführt. Dies ermöglichte die Berechnung der Enthalpie- und Entropiewerte der halogen bonding-Interaktion.

Abstract

This dissertation reports on the synthesis and characterization of group 10 metal complexes combined with pincer ligands. Therefore various POCHOP ligands were prepared in which modifications of the phosphorus substituents as well as of the linker atoms were carried out. Additionally the ligand backbone was functionalized. This series of frameworks was employed to synthesize the chlorido and iodido complexes using and optimizing procedures known from literature. The following synthesis of the fluoro compounds lead to the formation of bifluoro complexes which were characterized extensively. The determination of various molecular structures gave the opportunity to benchmark different DFT methods.

Furthermore X-ray analysis was used to study halogen bonding experiments in the solid state with the palladium iodido complexes. Carrying out temperature dependend titration experiments on five fluoro complexes and pentafluoroiodobenzene enabled the calculation of the corresponding enthalpy and entropy values.