

Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät

Institut für Chemie

Fachgebiet: *Chemie*

Betreuer: Prof. Dr. Axel Schulz

Jan Rosenboom

(e-mail:) jan.rosenboom@uni-rostock.de/jan.rosenboom@gmx.de

Titel Ihrer Arbeit

„Phosphorus-centered radicals and biradicals“

Deutsche Zusammenfassung

Diese Arbeit beschäftigt sich mit der Synthese, Reaktivität und spektroskopischen Eigenschaften von P-zentrierten Mono- und Biradikalen. Mit der Addition von Aldehyden an das Biradikal [$^*P(\mu\text{-N}Ter)_2P^*$] wurde zunächst ein klassischer konzertierter Reaktionsmechanismus untersucht. Im Gegensatz dazu zeigte sich in der Reaktion von [$^*P(\mu\text{-N}Ter)_2P^*$] mit Bromalkanen radikalische Reaktivität, was zur Synthese des phosphorzentrierten Monoradikals [$^*P(\mu\text{-N}Ter)_2PEt$] führte. Dieses Monoradikal wurde mittels EPR-Spektroskopie als Intermediat im radikalischen Mechanismus nachgewiesen. Schließlich gelang die Verbrückung zweier Biradikaleinheiten und die Synthese eines phosphorzentrierten Disbiradikals, dessen elektronische Struktur durch EPR-Experimente und quantenchemische Berechnungen untersucht wurde.

Englische Zusammenfassung

This work deals with the synthesis, reactivity and spectroscopic properties of P-centered mono- and biradicals. With the addition of aldehydes to the biradical [$^*P(\mu\text{-N}Ter)_2P^*$], a classical concerted reaction mechanism was initially investigated. In contrast, the reaction of [$^*P(\mu\text{-N}Ter)_2P^*$] with bromoalkanes showed radical reactivity, which led to the synthesis of the phosphorus-centered monoradical [$^*P(\mu\text{-N}Ter)_2PEt$]. This monoradical was detected by EPR spectroscopy as an intermediate in the radical mechanism. Finally, two biradical units were successfully linked and a phosphorus-centered disbiradical was synthesized, whose electronic structure was investigated by EPR experiments and quantum chemical calculations.