

Diketonáto-szilol komplexek előállítása és analitikai vizsgálata

Preparation and analytical studies of diketonato-silole complexes

SZATHMÁRI Balázs¹, Dr. KELEMEN Zsolt¹,
Dr. HOLCZBAUER Tamás², Dr. KOVÁCS Ilona¹

¹Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem,
Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék
1111 Budapest, Szent Gellért tér 4. Ch. épület

Tel: +36-1-463-4056; Fax: 463-3408; szakt-admin@mail.bme.hu; iaachem.bme.hu

²Természettudományi Kutatóközpont, Szerves Kémia Intézet és Kémiai Krisztallográfiai Laboratórium
1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2. épület

Tel: +36-1-382-6513; service@chemcryst.hu; chemcryst.hu

ABSTRACT

The silicon tends to form compounds with coordination number higher than four (five, six, or even seven), which show interesting structural properties. Ligands commonly used in silicon coordination chemistry are bidentate 1,3-diketones, also known as β -diketonate ligands. Previously, a large number of siloles substituted at the 2,3,4,5 position have been prepared and the properties of these compounds have been studied in the Department of Inorganic and Analytical Chemistry. In the course of my work, I investigated the coordination possibilities of silicon in compounds of siloles with β -diketonate ligands. For this purpose, new, previously unknown compounds were prepared by the reaction of monochloro- or dichlorosilole and acetylacetone or dibenzoylmethane. The structures of the obtained compounds were characterized by ¹H-, ¹³C-, ²⁹Si-, various correlation and low temperature NMR spectroscopic measurements, IR spectroscopy and single crystal X-ray diffraction measurements. The preparative work was supplemented with quantum chemical calculations, which were used to map the possible mechanism of the reactions.

Keywords: organosilicon chemistry, coordination chemistry, hypercoordinated silicon compounds, Schlenk-technique

ÖSSZEFOGLALÓ

A szilícium hajlamos négyesnél magasabb ötös, hatos, illetve akár hetes koordinációjú vegyületek kialakítására, amelyek érdekes szerkezeti tulajdonságokat mutatnak. A szilícium koordinációs kémiában elterjedten használt ligandumok a kétfogú 1,3-diketonok, vagy másnéven β -diketonáto ligandumok. Korábban a Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszéken már számos, a 2,3,4,5 helyzetben is szubsztituált szilolt állítottak elő, és vizsgálták ezen vegyületek tulajdonságait. Munkám során a szilícium koordinációs lehetőségeit vizsgáltam szilolok β -diketonáto ligandumokkal alkotott vegyületeiben. Ehhez monoklór-, illetve diklór-szilol és acetyl-aceton, illetve dibenzoil-metán reakciójával új, korábban még nem ismert vegyületeket állítottam elő. Az előállított vegyületek szerkezetét ¹H-, ¹³C-, ²⁹Si-, különböző korrelációs és alacsony hőmérsékletű NMR spektroszkópiai mérésekkel, IR spektroszkópiával és egykristály röntgendiffrakciós mérésekkel karakterizáltuk. A gyakorlati munkát kvantumkémiai számításokkal egészítettük ki, amelyek segítségével feltérképeztük a reakciók lehetséges mechanizmusát.

Kulcsszavak: koordinációs kémia, szilíciumorganikus kémia, Schlenk-technika, hypercoordinated silicon compounds