

## Kurzzusammenfassung

Die Isolierung und NMR-spektroskopische Charakterisierung von (Phenylethynyl)xenon(II)-trifluormethansulfonat und (Phenylethynyl)xenon(II)methansulfonat gelang bei tiefen Temperaturen. (Phenylethynyl)xenon(II)methansulfonat stellt die erste isolierte halogenfreie (Organo)xenon-Verbindung dar. Die Isolierung der Verbindungen erfolgte in Form von Pulvern, welche oberhalb von  $-20\text{ }^{\circ}\text{C}$  explodieren, und in organischen Lösungsmitteln schlecht löslich sind. Beide Verbindungen wurden durch  $^1\text{H}$ -NMR- bzw.  $^{19}\text{F}$ -NMR,  $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ -NMR und  $^{129}\text{Xe}$ -NMR-Spektroskopie charakterisiert.

Der gesamte Satz an NMR-Daten des Molekülfragmentes  $-\text{C}\equiv\text{CXeF}$  für die thermisch sehr unbeständigen Verbindungen (1-Hexinyl)xenon(II)fluorid und (Propinyl)xenon(II)fluorid wurde durch 2D- $^{19}\text{F}$ - $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ -HMQC-NMR-Spektren bestimmt und der zweifelsfreie Beweis für das Vorhandensein dieses Fragmentes in den dargestellten Verbindungen erbracht. Das Vorzeichen der  $^1\text{J}(^{13}\text{C}-^{129}\text{Xe})$ -Kopplung konnte für beide Verbindungen bestimmt werden.

Die thermische Stabilität von (Phenylethynyl)- und (1-Hexinyl)xenon(II)fluorid in Lösung wurde NMR-spektroskopisch untersucht und es wurde experimentell belegt, daß (Phenylethynyl)xenon(II)fluorid die stabilere Neutralverbindung ist.

Durch Umsetzungen von  $\text{XeF}_2$  mit Bis(trimethylsilyl)diinen, die zwischen den Alkinylfunktionen durch aliphatische oder aromatische Reste substituiert waren, konnten Hinweise erhalten werden, daß die Synthese von (Alkynyl)xenon(II)-Verbindungen mit mehreren (Alkynyl)xenon(II)-Liganden möglich ist.

Die NMR-spektroskopische Untersuchung der Umsetzung von (Trimethyl)(phenylethynyl)silan mit  $[(\text{CH}_3)_4\text{N}]\text{F}$  ergab in den  $^{19}\text{F}$ -NMR-Spektren Hinweise auf die Bildung eines hypervalenten (Phenylethynyl)fluorosilicates. Die Detektion von Signalen für dieses Silicat im  $^{29}\text{Si}$ -NMR-Spektrum gelang nicht.

Die Untersuchung alternativer Synthesewege zur Darstellung von (Alkynyl)xenon(II)-Verbindungen durch Umsetzung von  $\text{XeF}_2$  mit Metall(alkynyliden) (Na, Zn, Hg) führte nicht zum gewünschten Erfolg.

Die Darstellung von (Alkynyl)xenon(II)fluoriden, welche an der Kohlenstoff-Kohlenstoff-Dreifachbindung einen NMR-aktiven Kern tragen (z.B.  $^{31}\text{P}$ ) gelang im Falle des Phosphors nicht, da die als Edukte verwendeten (Trimethylsilylethynyl)phosphane auch bei tiefer Temperatur nicht oxidationsstabil gegenüber  $\text{XeF}_2$  waren.

Die Darstellung von (Perfluoralkyl)- und (Alkyl)xenon(II)verbindungen durch Umsetzung von  $\text{XeF}_2$  mit (Trimethyl)(perfluoralkyl)- bzw. (Trimethyl)(alkyl)silanen gelang nicht.

Die Umsetzung von (Trimethyl)(phenylethynyl)silan mit  $\text{XeF}_2$  in Gegenwart von CsF in Dichlormethan/Propionitril ergab NMR-spektroskopische Hinweise auf die Bildung einer Verbindung mit einem F-Xe-N-Fragment.

Erste Übertragungsreaktionen mit den isolierten (Phenylethynyl)xenon(II)-Verbindungen an organischen Molekülen verliefen unspezifisch.

Die Berechnung von optimierten Strukturen und Schwingungsspektren von (Alkynyl)xenon(II)-Verbindungen mit mehreren hundert Basisfunktionen auf PC-basierten Systemen unter Verwendung von DFT-Methoden mit dem Basissatz cc-pVTZ-PP ist in einem zeitlich akzeptablen Rahmen durchführbar. Ein umfassender Vergleich berechneter Daten mit experimentellen Daten ist aufgrund der geringen Datenbasis an experimentellen Ergebnissen noch nicht möglich.