# Borabenzene Derivatives of Main Group Elements

Von der Fakultät für Mathematik, Informatik und Naturwissenschaften
– Fachbereich 1 –
der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen
zur Erlangung des akademischen Grades eines Doktors
der Naturwissenschaften genehmigte Dissertation

vorgelegt von

Doctor of Engineering
Xiaolai Zheng
aus Zhejiang (VR China)

Berichter: Universitätsprofessor Dr. G. E. Herberich
Universitätsprofessor Dr. G. Heger

Tag der mündlichen Prüfung: 21. Mai 2001

D 82 (Diss. RWTH Aachen)

Berichte aus der Chemie

**Xiaolai Zheng**

# Borabenzene Derivatives of Main Group Elements

D 82 (Diss. RWTH Aachen)

Shaker Verlag
Aachen 2001

Die Deutsche Bibliothek - CIP-Einheitsaufnahme

*Zheng, Xiaolai:*
Borabenzene Derivatives of Main Group Elements /
Xiaolai Zheng. Aachen : Shaker, 2001
(Berichte aus der Chemie)
Zugl.: Aachen, Techn. Hochsch., Diss., 2001
ISBN 3-8265-9027-9



Printed in Germany.

ISBN 3-8265-9027-9
ISSN 0945-070X

Shaker Verlag GmbH • P.O. BOX 1290 • D-52013 Aachen
Phone: 0049/2407/9596-0 • Telefax: 0049/2407/9596-9
Internet: www.shaker.de • eMail: info@shaker.de

Die vorliegende Arbeit entstand in der Zeit von Mai 1998 bis Februar 2001 am Institut für Anorganische Chemie der RWTH Aachen im Arbeitskreis von Herrn Prof. Dr. Gerhard E. Herberich.

Mein Dank gilt:

Meinem geschätzten Lehrer, Herrn Prof. Dr. Gerhard E. Herberich, für die interessante Themenstellung, die ständige Diskussionsbereitschaft und die Gewährung hervorragender Arbeitsbedingungen,

Herrn Prof. Dr. Gernot Heger für die freundliche Übernahme des Korreferates,

Herrn Priv.-Doz. Dr. Ulli Englert für die vielen wertvollen Diskussionen, die hilfreiche Unterstützung und die geduldige Korrektur dieser Arbeit,

Herrn Prof. Dr. Rolf Gleiter und Frau Dr. Isabella Hyla-Kryspin (Universität Heidelberg) für die hilfreichen Diskussionen im Zusammenhang mit den DFT-Rechnungen,

Herrn Toni Gossen und Frau Rachida Boumahrat für die Messung der NMR-Spektren,

Herrn Dr. Hartmut Maisch und Frau Brigitte Scherer für die Messung der MS-Spektren,

allen weiteren Institutsangehörigen, die durch ein gutes Arbeitsklima zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Auszüge aus dieser Arbeit wurden veröffentlicht:

(1) G. E. Herberich, X. Zheng, J. Rosenplänter, U. Englert, *Organometallics* **1999**, *18*, 4747−4752.

(2) X. Zheng, G. E. Herberich, *Organometallics* **2000**, *19*, 3751−3753.

(3) X. Zheng, U. Englert, G. E. Herberich, J. Rosenplänter, *Inorg. Chem.* **2000**, *39*, 5579−5585.

(4) X. Zheng, G. E. Herberich, *Organometallics* **2001**, *20*, im Druck.

(5) X. Zheng, G. E. Herberich, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2001**, eingereicht.

Meiner Familie

# Contents

## Abbreviation

| | |
|---|---|
| bipy | 2,2'-bipyridine |
| br | broad (NMR) |
| $Bu^n$ | normal butyl |
| $Bu^t$ | tert-butyl |
| Cp | cyclopentadienyl |
| Cp* | 1,2,3,4,5-pentamethyl-cyclopentadienyl |
| $\delta$ | chemical shift (NMR) |
| D | Debye |
| d | doublet (NMR) |
| $d_{calcd}$ | calculated density (X-ray) |
| DFT | density funtional theory |
| DMSO | dimethylsulfoxide |
| Et | ethyl |
| GOF | goodness of fit (X-ray) |
| *h* | Planck's constant |
| HOMO | highest occupied molecular orbital |
| Hz | Hertz |
| $I_{rel}$ | relative intensity (MS) |
| K | Kelvin |
| *k* | first-order rate constant (NMR) |
| $\kappa$ | transmission coefficient in the Eyring equation (NMR) |
| $K_B$ | Boltzmann's constant |
| *J* | scalar nuclear spin-spin coupling constant (NMR) |
| $\lambda$ | wave length |
| LDA | lithium diisopropylamide |
| LUMO | lowest unoccupied molecular orbital |
| m | multiplet (NMR) |
| Me | methyl |
| mp | melting point |
| $M_w$ | molecular weight |
| MS | mass spectroscopy |
| *m*/*z* | mass-to-charge ratio (MS) |
| $\mu$ | absorption coefficient (X-ray) |
| NMR | nuclear magnetic resonance |
| $\nu$ | resonance frequency (NMR) |
| Nu | nucleophile |
| Ph | phenyl |
| $Pr^i$ | isopropyl |
| py | pyridine |
| R | discrepancy indices (X-ray) |
| $R^2$ | correlation coefficient |
| *R*/*S* | absolute configuration of a chiral molecule |
| $r_i$ | ionic radius |
| rt | room temperature |
| $\sigma$ | shielding (NMR) |
| s | singlet (NMR) |
| *T* | temperature |
| t | triplet (NMR) |
| THF | tetrahydrofuran |
| THP | tetrahydropyran |
| $T_c$ | coalescence temperature |
| TMEDA | *N*,*N*,*N*',*N*'-tetramethyl-ethylenediamine |
| *V* | volume of unit cell (X-ray) |
| $\omega$ | interplanar angle |
| *Z* | formula units per unit cell (X-ray) |
| $6_1$ | six-fold screw axis |