

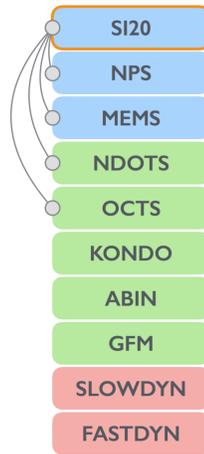
Funktionalisierte Silafullerane als Bausteine für Nanofestkörper

M. Wagner, M. C. Holthausen

Ziele

- ❖ Aufbau $[\text{Si}_{20}]$ -Fulleran-basierter **Nanonetzwerke**
- ❖ Aufklärung des **Bildungsmechanismus** von $[\text{Si}_{32}\text{Cl}_{45}]^-$ mittels Experiment und quantenchemischer Untersuchung
- ❖ Synthese alternativer **$[\text{Si}_n]$ -Cluster** ($n > 20$)
- ❖ Variation des endohedralen **Gastatoms**
- ❖ Einführung von Spin- und Ladungsträgern
- ❖ Physikalische **Charakterisierung** der funktionalisierten $[\text{Si}_n]$ -Einheiten

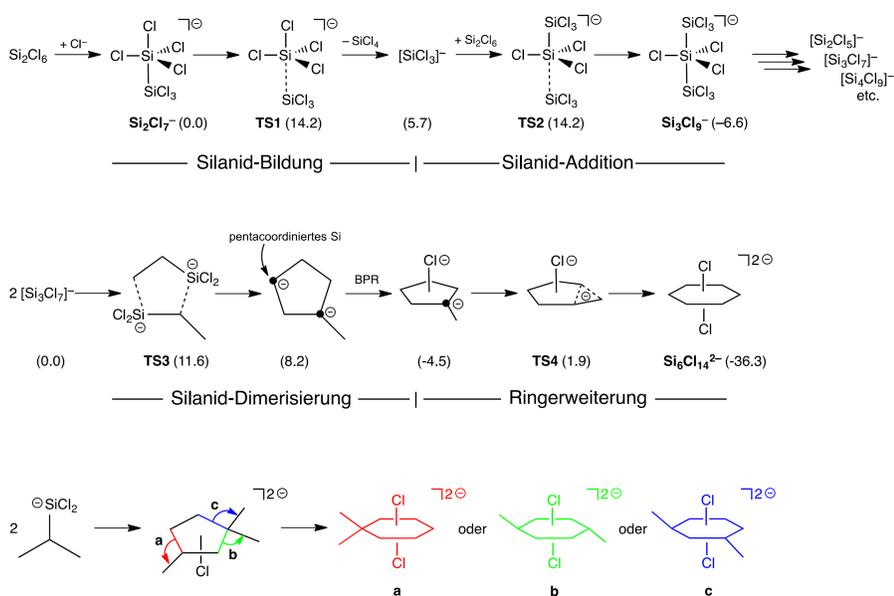
Einbettung & Perspektiven



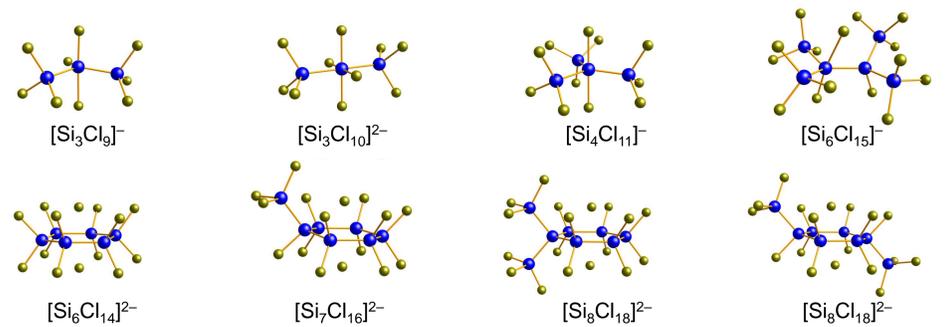
- ❖ Gezielte Beeinflussung magnetischer, mechanischer, optischer und thermoelektrischer Eigenschaften der Nanonetzwerke
- ❖ $[\text{Si}_{20}]$ -Fullerane als:
 - ❖ Halbleiter
 - ❖ Supraleiter (nach p-Dotierung)?
 - ❖ Elektronische Bauelemente?

Stand der Forschung & Eigene Vorarbeiten

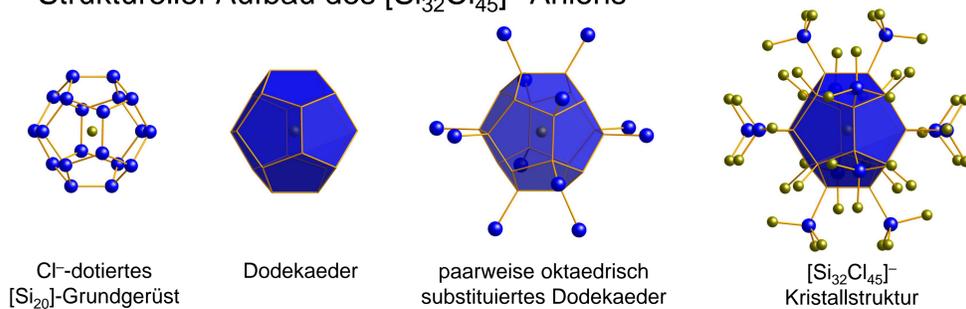
- ❖ Chlorid-induzierte Aufbaureaktion von Cyclohexasilanen aus Si_2Cl_6 ,^[1-5] quantenchemische Untersuchung des Mechanismus:



- ❖ Kristallstrukturen perchlorierter Oligosilane



- ❖ Struktureller Aufbau des $[\text{Si}_{32}\text{Cl}_{45}]^-$ -Anions



Arbeitsprogramm

- ❖ **Jahr 1:** Optimierung der Ausbeute des $[\text{Si}_{32}\text{Cl}_{45}]^-$ -Anions; Aufklärung des $[\text{Si}_{20}]$ -Aufbaumechanismus; Synthese weiterer $[\text{Si}_n]$ -Cluster

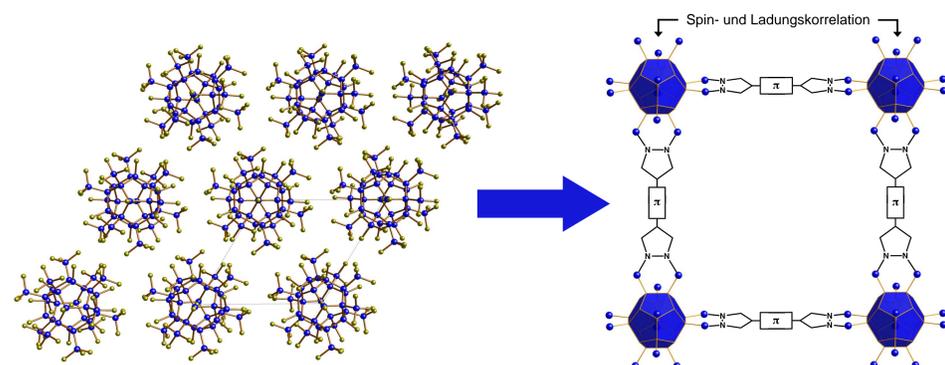


- ❖ **Jahr 2:** Physikalische Untersuchung der makromolekularen Eigenschaften der $[\text{Si}_{32}\text{Cl}_{45}]^-$ -Einkristalle; Design geeigneter Brückenelemente; Variation der Kationen; theoriegestützte Optimierung der supramolekularen Strukturen; Synthese der $[\text{Si}_{20}]$ -Nanonetzwerke



Beispiele für kovalente Verbrückungsstrategien.

- ❖ **Jahr 3+4:** Einführung von Spin- und Ladungsträgern durch Variation des endohedral gebundenen Gastatoms; Untersuchung von Korrelationseffekten im Netzwerk



Aufbau von Nanonetzwerken aus $[\text{Si}_{20}]$ -Fulleran-Einheiten. Links: Kristallpackung der Anionen von $[\text{nBu}_4\text{N}][\text{Si}_{32}\text{Cl}_{45}]^-$; Rechts: Beispiel für ein kovalent gebundenes Netzwerk aus $[\text{Si}_{20}]$ -Fullerenen und schematischen Brückenelementen.

[1] M. Wagner, M. C. Holthausen et al., *Chem.-Eur. J.* **2011**, *17*, 4715.
 [2] M. Wagner, M. C. Holthausen et al., *Inorg. Chem.* **2012**, *51*, 8599.
 [3] M. Wagner, M. C. Holthausen et al., *Chem. Eur. J.* **2014**, *20*, 9234–9239.
 [4] M. C. Holthausen, M. Wagner et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, *54*, 5429–5433.
 [5] M. Wagner et al., *Inorg. Chem.* **2015**, *54*, 9611–9618.