

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	4
2 Experimenteller Aufbau	7
2.1 Beschreibung der Apparatur	7
2.1.1 Die Ofenkonstruktion	9
3 Dichtefunktionaltheorie	10
3.1 Grundzüge der Dichtefunktionaltheorie (DFT)	10
3.1.1 Funktionale	11
3.1.2 Ablauf einer DFT-Rechnung	13
3.1.3 DFT-Frequenzrechnungen	14
4 Reaktionen von AlF mit den Halogenwasserstoffen HCl und HBr	15
4.1 Einleitung	15
4.2 Darstellung von molekularen HAlFY unter Matrixbedingungen	16
4.3 Experimentelle Ergebnisse	17
4.3.1 AlF + HCl	17
4.3.2 AlF + HBr	21
4.4 Diskussion	24
4.4.1 AlF·HY	24
4.4.2 HAlFCl	28
4.4.3 HAlFBr	31
4.4.4 AlFCl ₂	34
4.4.5 AlFBr ₂	35
4.4.6 AlF ₂ Cl und AlF ₂ Br	37
4.5 Reaktionswege	38
4.6 Zusammenfassung	40

5 Peroxoverbindungen des Aluminiums: $XAlO_2$ und $XAl(\mu-O)_2AlX$	41
5.1 Einleitung	41
5.2 Darstellung von molekularem $XAlO_2$ unter Matrixbedingungen	42
5.3 Experimentelle Ergebnisse	43
5.3.1 $AlF + O_2$	43
5.3.2 $AlCl + O_2$	48
5.3.3 $AlBr + O_2$	52
5.4 Diskussion	55
5.4.1 Singulett $XAlO_2$	58
5.4.2 $XAl(\mu-O)_2AlX$	68
5.4.3 Triplett $XAlO_2$	74
5.4.4 Singulett $XAlOO$	76
5.4.5 $Al(\mu-X)_2AlO_2$	78
5.4.6 $XAlOOAlX$	79
5.5 Reaktionswege	82
5.6 Zusammenfassung	85
6 Bis-Superoxoverbindungen des Aluminiums: $FAlO_4$, $ClAlO_4$ und $BrAlO_4$	88
6.1 Einleitung	88
6.2 Darstellung von $XAlO_4$ unter Matrixbedingungen	88
6.3 Experimentelle Ergebnisse	89
6.3.1 $AlF + 2 O_2$	89
6.3.2 $AlCl + 2 O_2$	91
6.3.3 $AlBr + 2 O_2$	92
6.4 Diskussion	94
6.4.1 Triplett $XAl(O_2)_2$	95
6.4.2 Singulett $XAl(O_2)_2$	107
6.4.3 $XAl(\mu-(O_2))_2AlX$	109
6.4.4 $O_2Al(\mu-X)_2AlO_2$	112
6.4.5 $(XAlO)_4$ Heterokuban	114
6.5 Reaktionswege	116
6.6 Zusammenfassung	123

7 Aluminiumpentafluorid: Mehr als ein ‚hypothetisches‘ Molekül ?	124
7.1 Einleitung	124
7.2 Darstellung von AlF_5 unter Matrixbedingungen	125
7.3 Experimentelle Ergebnisse	126
7.4 Diskussion	128
7.4.1 AlF_3	129
7.4.2 $\text{AlF}_3 \cdot \text{N}_2$	132
7.4.3 $\text{AlF}_3 \cdot \text{FH}$	135
7.4.4 AlF_5	137
7.4.5 $[\text{Ar}_n\text{F}]^+ [\text{AlF}_4]^-$; n = 1; 6	143
7.5 Zusammenfassung	146
8 Zusammenfassung und Ausblick	148
9 Anhang	155
9.1 Abkürzungsverzeichnis und Gesamtenergien	155
9.2 Publikationsliste	157
10 Literaturverzeichnis	158