

3. Zusammenfassung

8a und **8b** sind potentielle Precursor für Isocyanbutadiin. Sie wurden durch Umsetzung von Ethinyl(trimethyl)silylmagesiumbromid mit **2a** bzw. **2b** und anschließender Desilylierung der isolierten Komplexe **7a** und **7b** erhalten. Von beiden Komplexen wurden geeignete Einkristalle erhalten, die eine Röntgenkristallstrukturanalyse bei tiefen Temperaturen ermöglichten. Die Pyrolyseversuche erlaubten lediglich den Nachweis des zum Zielmolekül isomeren Pentadiinnitril.

Die Synthese eines Precursors für Isocyanhexatriin war durch einfache Lithierung von Bis(trimethylsilyl)butadiin mit Butyllithium, Umsetzung mit **2b** und anschließende Desilylierung des isolierten Komplexes **12** möglich. Die geringe Ausbeute an **13** und dessen geringe Stabilität ermöglichten lediglich einen NMR-spektroskopischen Nachweis.

Für das bisher lediglich in einer Argonmatrix erzeugte und durch Infrarotspektroskopie charakterisierte Cyanisocyanacetylen **5** gelang mit **3a** die Darstellung einer geeigneten metallorganischen Vorstufe. **3a** wurde durch Umsetzung von **2a** mit Kaliumcyanid erhalten. Die Pyrolyse lieferte sowohl das "freie" Ethenylisocyanid **4** als auch das Zielmolekül Cyanisocyanacetylen **5**. Das instabile, schnell polymerisierende 3-Chlor-2-fluor-3-isocyanpropennitril **4** konnte anhand der Massen- sowie der ein- und zweidimensionalen ^{19}F - und ^{13}C -NMR-Spektren charakterisiert werden. Die zweifelsfreie experimentelle Charakterisierung der binären Kohlenstoffstickstoffverbindung Cyanisocyanacetylen **5** gelang durch Massenspektren, hochaufgelöste Infrarot-Spektren im Wellenzahlenbereich von $2400 - 2000 \text{ cm}^{-1}$ und vor allem durch die für lineare Moleküle besonders aussagekräftigen Millimeterwellen-Spektren. Die Pyrolyse der an der Nitrilfunktion ^{13}C - und ^{15}N -markierten Komplexe **3c** und **3d** ermöglichte die Ermittlung der Rotationskonstanten von insgesamt 10 Isotopomeren. Unter Verwendung aller bestimmten Rotationskonstanten war die Bestimmung der Grundzustandsstruktur von **5** möglich, die mit $130.6(1) \text{ pm}$ den bisher kürzesten, experimentell bestätigten Isocyanid C-N-Einfachbindungsabstand aufweist.

Die umfangreichen rotationsspektroskopischen Daten könnten in näherer Zukunft einen radioastronomischen Nachweis von **5** im interstellaren Raum ermöglichen und somit helfen, das Bild der interstellaren Chemie zu erweitern.