

Die Dissertation „Nitronylnitroxid- und Iminonitroxid Radikale als Bausteine für molekulare Magnete“ befasst sich mit der Planung, Synthese und Charakterisierung stabiler Radikale. Diese wurden als spintragende Untereinheiten in molekularen Magneten eingesetzt. Die Planung und Synthese der in dieser Arbeit vorliegenden Nitronylnitroxide und Iminonitroxide wurde unter dem Gesichtspunkt der Ausnutzung nichtkovalenter Wechselwirkungen, insbesondere Wasserstoffbrückenbindungen, zur Lenkung der räumlichen Struktur der spintragenden Einheiten durchgeführt. Dieses Prinzip bewirkt bei grosser räumlicher Nähe der Spinträger starke Wechselwirkungen der ungepaarten Spins und somit starke intermolekulare magnetische Kopplungen. Die Charakterisierung der neuen Radikale erfolgte insbesondere mithilfe der ESR-Spektroskopie, SQUID-Magnetometrie und Röntgenstrukturanalyse. Zum besseren Verständnis von intermolekularen magnetischen Austauschwechselwirkungen sollten Cokristalle mit Nitronylnitroxid-Radikalen erzeugt werden. Es wurden eine Vielzahl von Partnern für Cokristallisationen in unterschiedlichen Lösungsmitteln ausprobiert. In keinem Fall konnten für Röntgenstrukturuntersuchungen geeignete Cokristalle erhalten werden.

Hochspinsysteme sind von besonderen Interesse, da sie neben inter- auch intramolekulare magnetische Wechselwirkungen aufweisen können. Aus diesem Grunde wurden neue Hochspinsysteme auf Nitroxid-Basis synthetisiert und hinsichtlich ihres Grundzustandes untersucht. Eine Verteilung der Spindichte und Abschätzung der Grundzustandsenergien erfolgte mithilfe von DFT-Rechnungen. Es wurde eine effiziente Synthese für das unsubstituierte Bisnitronylnitroxid ausgearbeitet und der Grundzustand durch SQUID-Messungen bestimmt. Das Molekül liegt im Singulett-Grundzustand vor.