

# SrSi<sub>6</sub>N<sub>8</sub> – ein reduziertes Nitridosilicat mit Si–Si-Bindungen

H. A. Höpfe, F. Stadler, O. Oeckler, W. Schnick

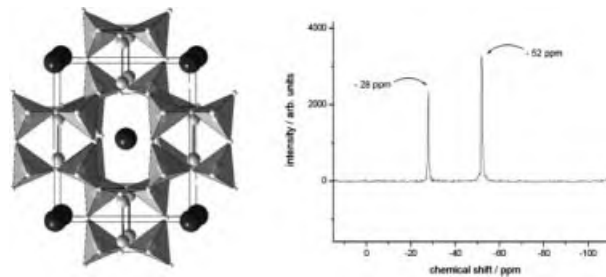
Department Chemie und Biochemie, Lehrstuhl für Anorganische Festkörperchemie, Ludwig-Maximilians-Universität München, Butenandtstraße 5-13 (D), D-81377 München

**Keywords:** Nitridosilicates; <sup>29</sup>Si-NMR; Reduced Compounds

Oxo- und Nitridosilicate zeichnen sich normalerweise durch Si/X-Anionenverbände ecken- oder kantenverknüpfter SiX<sub>4</sub>-Tetraeder (X = O, N) aus, in denen die Si- und X-Atome streng alternierend auftreten [1, 2].

Durch Umsetzung von Sr mit Si(NH)<sub>2</sub> im Hochfrequenzofen bei etwa 1650 °C haben wir nun ein neues Nitridosilicat mit der Summenformel SrSi<sub>6</sub>N<sub>8</sub> synthetisiert. Die Einkristall-Röntgenstrukturanalyse (*Imm*2 (Nr. 44), *a* = 785.5(2), *b* = 926.0(2), *c* = 480.1(1) pm, *Z* = 2, *R*<sub>1</sub> = 0.0239, *wR*<sub>2</sub> = 0.0487) ergab zwei kristallographisch unterscheidbare Si-Atome, von denen eines (Wyckoff-Lage 8*e*) im Zentrum eines SiN<sub>4</sub>-Tetraeders liegt, während das andere (Wyckoff-Lage 4*d*) von drei N und einem Si koordiniert ist (Abb. 1, links). Es bilden sich somit Disilan-analoge N<sub>3</sub>Si–SiN<sub>3</sub>-Einheiten mit einer Bindungslänge Si–Si von 235.9(2) pm. Die N<sub>3</sub>Si–SiN<sub>3</sub>-Einheiten sind über sämtliche N-Atome mit benachbarten SiN<sub>4</sub>-Tetraedern verknüpft [3].

Im <sup>29</sup>Si-MAS-NMR-Spektrum von SrSi<sub>6</sub>N<sub>8</sub> wurden zwei scharfe Resonanzen beobachtet, deren integrierte Intensitäten (Verhältnis 1 : 2) genau den beiden Wyckoff-Positionen 4*d* und 8*e* entsprechen. Ihre chemischen Verschiebungen (–28 und –52 ppm) sind typisch für die kristallographisch identifizierten Koordinationen (Abb. 1 rechts).



**Abb. 1** links: Kristallstruktur von SrSi<sub>6</sub>N<sub>8</sub>, Blick entlang [001] (Sr dunkelgrau, Si hellgrau, N weiß); rechts: <sup>29</sup>Si-NMR-Spektrum von SrSi<sub>6</sub>N<sub>8</sub>.

Mit BaSi<sub>6</sub>N<sub>8</sub>O konnten wir zudem ein zu SrSi<sub>6</sub>N<sub>8</sub> homöotypes Oxonitridosilicat darstellen und charakterisieren (*Imm*2 (Nr. 44), *a* = 806.3(2), *b* = 966.5(2), *c* = 483.1(1) pm, *Z* = 2, *R*<sub>1</sub> = 0.0628, *wR*<sub>2</sub> = 0.0791), dessen [Si<sub>6</sub>N<sub>8</sub>O]<sup>2-</sup>-Gerüst durch Insertion je eines O-Atoms in jede Si–Si-Bindung von SrSi<sub>6</sub>N<sub>8</sub> verstanden werden kann.

[1] F. Liebau, *Structural Chemistry of Silicates*, Springer, Berlin, 1985.

[2] H. Huppertz, W. Schnick, *Chem. Eur. J.* **1997**, 3, 679.

[3] H. A. Höpfe, F. Stadler, O. Oeckler, P. Kroll, W. Schnick, Veröffentlichung in Vorbereitung.

DOI: 10.1002/zaac.200470073