

7: Zu einer Lösung des Alkohols **3** (1.0 g, 3.6 mmol) in wasserfreiem Tetrahydrofuran (20 mL) wurde Natriumhydrid (200 mg, 5.0 mmol) gegeben und die Mischung 10 min bei Raumtemperatur gerührt. Dann wurde eine Lösung von *p*-Vinylbenzylchlorid (1.52 g, 10 mmol, 3.0 Äquivalente) hinzugefügt, die Mischung 1 h bei Raumtemperatur gerührt und anschließend 16 h zum Rückfluß erhitzt. Die Reaktionsmischung wurde dann zur Trockene eingedampft, zwischen Dichlormethan (50 mL) und Wasser (50 mL) verteilt und die wässrige Phase mit Dichlormethan (2 × 50 mL) extrahiert. Die vereinigten organischen Phasen wurden getrocknet, zur Trockene eingedampft und mit Flashchromatographie gereinigt, wobei mit einem Hexan/Dichlormethan-Gemisch (1:1) mit zunehmendem Dichlormethan eluiert wird. Das Styrolderivat **7** wurde als schwach gelbliches Öl erhalten. Ausbeute: 71%; ¹H-NMR (CDCl₃): δ = 0.63, 1.01 (jeweils brs, 6 H, CH₃), 1.15–1.55 (m, 12 H, 3 × CH₂ und 2 × CH₃), 3.65 (ABq, J = 6 Hz, 1 H, CHH), 3.95 (ABq, J = 6 Hz, 1 H, CHH), 4.41 (s, 2 H, CH₂), 4.84 (d von d, J = 2 und 6 Hz, 1 H, CHH), 5.20 (d von d, J = 2 und 7 Hz, 1 H, =CHH), 5.71 (d von d, J = 2 und 6 Hz, 1 H, =CHH), 6.66 (d von d, J = 6 und 7 Hz, 1 H, =CH), 7.08 (d, 2 H, ArH), 7.25–7.52 (m, 7 H, ArH); ¹³C-NMR (CDCl₃): δ = 17.17, 20.56, 33.87, 40.48, 59.36, 72.74, 72.83, 85.41, 113.52, 126.04, 127.24, 127.53, 127.82, 127.88, 136.62, 138.14, 141.79; Massenspektrum (EI): m/z 393.

Copolymer **8** von **7** mit Styrol: Eine Lösung des Styrol-TEMPO-Monomers **7** (450 mg, 1.15 mmol), Styrol (2.40 g, 23.0 mmol, 20 Äquivalente) und AIBN (40 mg, 0.23 mmol) in wasserfreiem Tetrahydrofuran (20 mL) wurde 24 h unter Argon zum Rückfluß erhitzt. Die Reaktionsmischung wurde zur Trockene eingedampft, in Dichlormethan (10 mL) wieder aufgelöst, zunächst in Methanol (500 mL) ausgefällt und dann nochmals aus Hexan (500 mL) umgefällt. Das Copolymer **8** wurde als weißes Pulver isoliert. Ausbeute: 72%; M_n = 12000 und PD = 1.80; ¹H-NMR (CDCl₃): δ = 0.65, 0.90–1.70, 3.65, 3.95, 4.30, 4.82, 6.40–7.25 (brm); ¹³C-NMR (CDCl₃): δ = 17.25, 39.0–43.5, 125.3 (br), 127.5 (br), 128.30, 144.7–145.8 (einige Resonanzsignale waren zu schwach, um beobachtet werden zu können).

Herstellung des Ppropopolystyrols **9**: Eine Lösung des polymeren Initiators **8** (200 mg, 0.085 mmol, 10 Äquivalente) in Styrol (1.82 g, 17.5 mmol, 200 Äquivalente) wurde 72 h unter Rühren und unter Argon auf 130 °C erhitzt. Während dieser Zeit wurde die Lösung allmählich viskoser und die klare Reaktionsmischung wurde schließlich fest. Die Reaktionsmischung wurde dann in Dichlormethan (25 mL) gelöst und in Hexan (1 L) ausgefällt, gefolgt von einem nochmaligen Umfällen aus Methanol (1 L). Das Ppropopolystyrol **9** wurde nach dem Trocknen als farbloser Feststoff isoliert. Ausbeute: 80%; M_n = 86000 und PD = 2.01; ¹H-NMR (CDCl₃): δ = 0.90–1.70 (brm), 6.40–7.25; ¹³C-NMR (CDCl₃): δ = 39.0–44.5, 125.0 (br), 127.5 (br), 144.5–146.0.

Eingegangen am 13. Januar,
ergänzte Fassung am 17. März 1995 [Z 7634]

Stichworte: Polymere · Ppropopolymere · Radikalische Polymerisation · Sternpolymere

- [1] J. M. J. Fréchet, *Science* **1994**, *263*, 1710.
- [2] P. F. Rempp, P. J. Lutz in *Comprehensive Polymer Chemistry*, Vol. 7, Pergamon, Oxford, **1988**, Kap. 12.
- [3] P. J. Lutz, G. Beinert, P. F. Rempp, *Macromol. Chem.* **1982**, *183*, 2787.
- [4] H. A. Nguyen, J. P. Kennedy, *Polym. Bull.* **1983**, *10*, 74.
- [5] D. Y. Sogah, W. R. Hertler, O. W. Webster, G. M. Cohen, *Macromolecules* **1987**, *20*, 1473.
- [6] G. C. Eastmond, L. W. Harvey, *Polymer* **1985**, *17*, 275.
- [7] C. J. Hawker, *J. Am. Chem. Soc.* **1994**, *116*, 11185.
- [8] C. J. Hawker, J. L. Hedrick, *Macromolecules* **1995**, *28*, 2993.
- [9] M. K. Georges, R. P. N. Veregin, P. M. Kazmaier, G. K. Hamer, *Macromolecules* **1993**, *26*, 2987; *Trends Polym. Sci. (Trivandrum India)* **1994**, *2*, 66.
- [10] E. Rizzardo, *Chem. Aust.* **1987**, *54*, 32; D. H. Solomon, E. Rizzardo, P. Cacioli (CSIRO), US-A 4 581 429, **1985**.
- [11] Die Zahlenmittel der Molmassen wurden experimentell durch Gelpermeationschromatographie bestimmt, wobei kommerziell erhältliche Polystyrolproben mit enger Molmassenverteilung als Standards benutzt wurden.

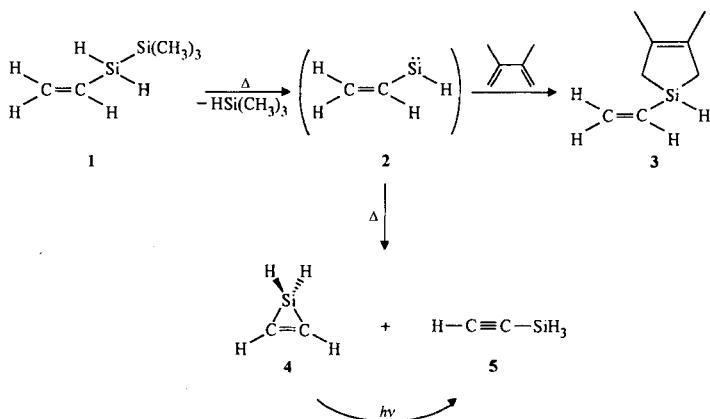
Silacyclopren: Bildung durch Hochvakuum-Blitzpyrolyse und matrixspektroskopische Identifizierung**

Günther Maier*, Harald Pacl und Hans Peter Reisenauer

Professor Manfred Regitz zum 60. Geburtstag gewidmet

1961 berichteten Vol'pin et al. über die Synthese einer Verbindung mit Silacyclopren-Struktur^[1]. Bald konnte jedoch gezeigt werden, daß die Strukturzuordnung falsch und daß das isolierte Produkt ein 1,4-Disilacyclohexa-2,5-dien war^[2]. Daraufhin wurden erneut Versuche zur Herstellung von Silacycloprenen unternommen^[3]. Diese blieben aber erfolglos, bis 1976 Gaspar et al. die erstmalige Herstellung eines substituierten Silacycloprens gelang^[4]. Nur wenig später wurde über die Synthese weiterer Silacyclopene berichtet^[5–7]. Zwei Methoden ermöglichen damals die Erschließung dieser Substanzklasse. Zum einen konnten Silacyclopene durch Addition von substituierten Silandiolen (Silylenen) an disubstituierte Alkine^[4, 5] und zum anderen durch Photolyse von Alkinyldisilanen erhalten werden^[6, 7]. In jüngster Zeit erlebte die Silacyclopren-Chemie einen neuen Aufschwung. So konnten die ersten stabilen, an der Doppelbindung monosubstituierten Silacyclopene hergestellt werden^[8]. In die Nähe der unsubstituierten Stammverbindung kamen Sander et al. mit der Herstellung von 1,1-Dimethylsilacyclopren^[9] durch Photolyse eines Bis(diazomethyl)silans. Auf diese Weise wurde das erste an der Doppelbindung unsubstituierte Silacyclopren erhalten.

Wir berichten hier über die erstmalige Herstellung des lange gesuchten Grundkörpers, des unsubstituierten Silacycloprens **4**. Gleichzeitig wird ein neuer Weg zu dieser Substanzklasse aufgezeigt. Silacyclopren **4** entsteht bei der Hochvakuum-



Blitzpyrolyse von 1,1,1-Trimethyl-2-vinyldisilan **1** durch Abspaltung von Trimethylsilan. Die Methode der pyrolytischen Trimethylsilan-Abspaltung zur Bildung reaktiver Spezies wurde von uns bereits bei der Herstellung von 1-Silacycloprenyleniden sowie weiterer C₂H₂Si-Isomere erfolgreich angewendet^[10]. Die Vorstufe **1** ist aus 1,1,1-Trimethyl-2-phenyldisilan^[11] erhältlich:

[*] Prof. Dr. G. Maier, Dipl.-Chem. H. Pacl, Dr. H. P. Reisenauer
Institut für Organische Chemie der Universität
Heinrich-Buff-Ring 58, D-35392 Gießen
Telefax: Int. + 641/702-5712

[**] Hetero-π-Systeme, 21. Mitteilung. Diese Arbeit wurde vom Fonds der Chemischen Industrie und von der Deutschen Forschungsgemeinschaft unterstützt. – 20. Mitteilung: [10].

dessen Reaktion mit Trifluormethansulfonsäure (Pentan, 1 h, 0 °C) liefert das entsprechende Triflat; mit Vinylmagnesiumchlorid in THF entsteht daraus **1**, das sich umkondensieren und durch präparative Gaschromatographie (Siliconphase OV 101, 175 °C) in 70% Ausbeute rein isolieren läßt^[12].

Mit einer Gasmischung aus dem Disilan **1** und Argon (1:1000) wurde eine Hochvakuum-Blitzpyrolyse durchgeführt (Quarzrohr: Durchmesser 8 mm, Heizzone 5 cm; ca. 10⁻³ mbar; 650 °C). Die Reaktionsprodukte wurden direkt nach Verlassen der heißen Zone auf ein 10 K kaltes CsI-Fenster kondensiert. Anschließend untersuchte man die matrixisolierten Produkte IR- und UV/Vis-spektroskopisch. Dabei wurden neben Trimethylsilan, Acetylen und wenig Ethylen die C₂H₄Si-Isomere Ethinylsilan **5** und Silacyclopren **4** (Tabelle 1) nach-

Tabelle 1. IR-Daten von Silacyclopren **4** (experimentelle (Ar-Matrix, 10 K) sowie berechnete (MP2/6-31G**) und korrigierte Wellenzahlen [cm⁻¹]; integrierte Intensitäten (relativ zur stärksten Bande) in Klammern.

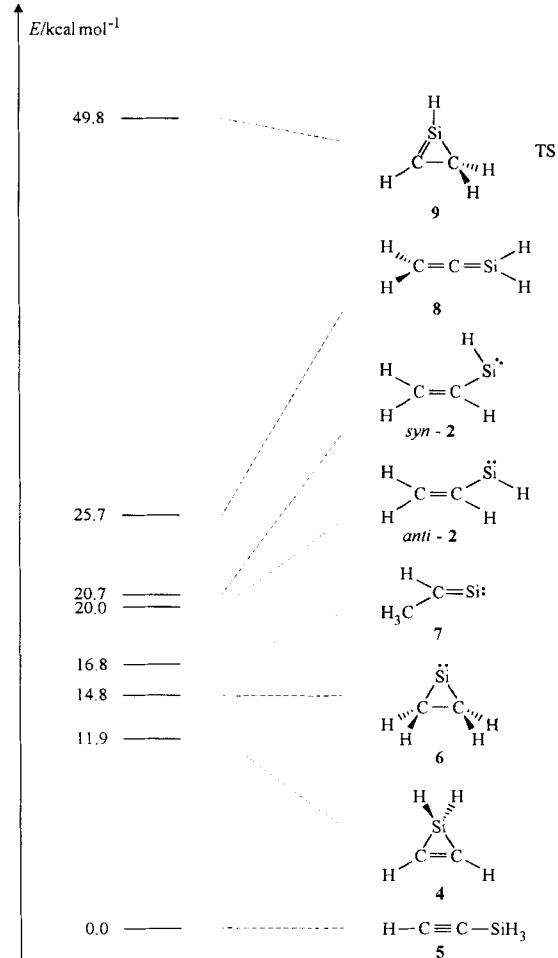
Schwingung	Zuordnung	D-Verbindung	$\tilde{\nu}_{\text{ber.}}$	$\tilde{\nu}_{\text{korr.}} \text{ [a]}$	$\tilde{\nu}_{\text{exp.}}$
ν_1 [b]	a_1 [b]	CH str [b]	3304.7(3)	3061.2(5)	
ν_{12}	b_2	CH str	3281.7(3)	3041.6(8)	
ν_9	b_1	SiH str	2345.3(100) [c]	2176.3(68)	
		[1-D]4	2341.8	2171.5 [d]	2171.7
		[2-D]4	2345.2	2176.2	2175.7
ν_2	a_1	SiH str	2338.4(57)	2166.7(97)	
		[1-D]4	1686.8	1564.1 [d]	1582.2
		[2-D]4	2338.2	2166.5	2166.8
ν_3	a_1	CC str	1544.1(10)	1467.2(25)	
		[1-D]4	1541.5	1464.7	1464.1
		[2-D]4	1513.5	1438.1	1441.3
ν_{13}	b_2	CH def	1169.9(11)	1105.1(21)	
		[1-D]4	1168.4	1103.7	1103.4
		[2-D]4	1120.0	1057.9	1058.4
ν_4	a_1	SiH ₂ def	1053.4(66)	975.9(100)	
		[2-D]4	1046.7	969.7	969.6
ν_7	a_2	CH/SiH def	959.7(0)	—	
ν_5	a_1	CH def	957.5(4)	900.6(4)	
ν_6	a_1	SiC str	805.7(7)	778.5(18)	
ν_{14}	b_2	SiC str	[1-D]4 802.7	775.6	773.4
		[1-D]4 721.3	721.3(24)	707.4(35)	
		[1-D]4 721.3	707.4	707.1	
ν_{10}	b_1	SiH/CH def	717.5(76)	695.1(51)	
ν_{15}	b_2	SiH ₂ def	706.7(24)	655.4(25)	
ν_8	a_2	SiH/CH def	605.6(0)	—	
ν_{11}	b_1	SiH/CH def	589.8(9)	589.2(11)	

[a] $\tilde{\nu}_{\text{korr.}} = \tilde{\nu}_{\text{exp.}}(\mathbf{4})/\tilde{\nu}_{\text{ber.}}(\mathbf{4}) \times \tilde{\nu}_{\text{ber.}}(\text{Isotopomer})$. [b] Die Angaben in diesen Spalten beziehen sich nur auf das nichtmarkierte Silacyclopren **4**. [c] Absolute Intensität 182 km mol⁻¹. [d] Als Bezuggröße diente das arithmetische Mittel der beiden SiH-Streckschwingungen.

gewiesen. Vinylsilandiyl **2** wurde nicht auf dem Matrixträger abgeschieden, obwohl man dessen Bildung wegen der Struktur der Vorstufe **1** erwartete. Allerdings ist **2** das bei der Pyrolyse gebildete Primärprodukt, denn bei einer Copyrolyse von **1** mit 2,3-Dimethylbutadien (Quarzrohr: Länge 33 cm, Heizzone 25 cm, Durchmesser 15 mm, gefüllt mit Quarz-Raschig-Ringen; 450 °C; Stickstoff als Trägergas) läßt sich Silacyclopenten **3** in 50% Ausbeute als Abfangprodukt von **2** erhalten^[13]. Abfangprodukte anderer C₂H₄Si-Isomere lassen sich nicht nachweisen. Offenbar werden unter den Bedingungen einer Hochvakuum-Blitzpyrolyse **4** und **5** aus dem Vinylsilandiyl **2** gebildet; vermutlich entsteht **5** dabei nicht direkt aus **2**, sondern über das aus **2** gebildete Silacyclopren **4**.

Zur Aufklärung des Reaktionsgeschehens und zur Identifizierung der außer **5** gebildeten C₂H₄Si-Spezies haben wir für die C₂H₄Si-Isomere **2** und **4–9** auf ab-initio-MP2/6-31G**-Niveau

veau^[14] eine Geometrieoptimierung und eine Berechnung ihrer Schwingungsspektren durchgeführt. Die so erhaltenen Energien der C₂H₄Si-Isomere steigen in der Reihe Ethinylsilan **5** (globales Minimum) < Silacyclopren **4** < 1-Silacyclopropyliden **6** < Ethyliidensilandiyl **7** < anti- < syn-Vinylsilandiyl **2** < 1-Silaallen **8** an. Besonders auffällig ist, daß die Energie



Schema 1. Auf MP2/6-31G**-Niveau unter Berücksichtigung der Nullpunktsschwingungsenergie berechnete relative Energien E [kcal mol⁻¹] der C₂H₄Si-Isomere **2**, **4–8** (Energieminima) und **9** (Übergangszustand TS).

niveaus aller betrachteten Isomere recht nahe beisammen liegen. Verglichen mit älteren Rechnungen^[15], bei denen Frequenzrechnungen fehlen, ist vor allem der relativ hohe Energieinhalt von **2** bemerkenswert. Wie nach den Rechnungen erwartet, werden in der Tat nur die beiden energieärmsten Isomere, **4** und **5**, bei der Pyrolyse gebildet.

Eine gute Übereinstimmung zwischen experimentellem und berechnetem IR-Spektrum ergibt sich nur für Silacyclopren **4** (Abb. 1, Tabelle 1)^[16]. So findet man im Einklang mit der Rechnung zwei Banden für die CH-Streckschwingungen (3061.2 und 3041.6 cm⁻¹), zwei für die SiH-Streckschwingungen (2176.3 und 2166.7 cm⁻¹) und eine für die CC-Streckschwingung (1467.2 cm⁻¹). Auch das Muster der übrigen acht tieferliegenden Absorptionen entspricht dem berechneten. Besonders auffällig ist die intensitätsstarke Bande für die SiH₂-Deformationsschwingung bei 975.9 cm⁻¹. Bestrahlt man **4** mit Licht der Wellenlänge $\lambda = 254$ nm, findet die selektive Umlagerung zu **5** statt, obwohl **4** kein UV-Maximum oberhalb von 250 nm aufweist. Entsprechend verhält sich 1,1-Dimethylsilacyclopren^[9]. Ethinylsilan **5** ist photostabil.

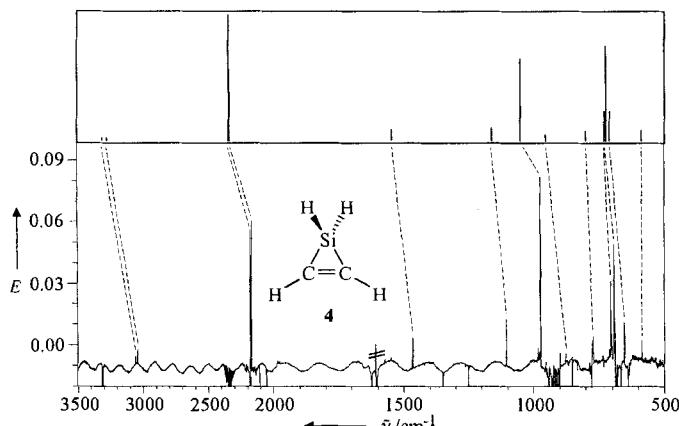
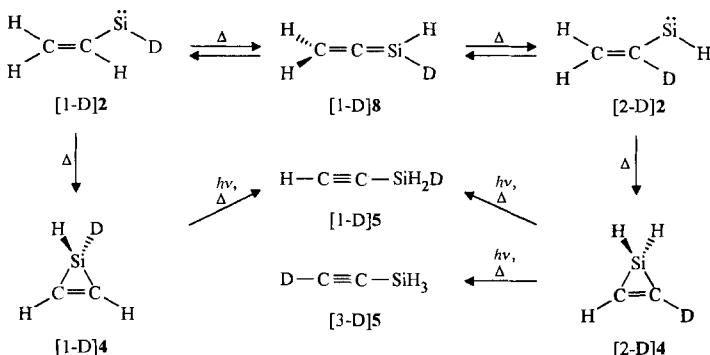


Abb. 1. Vergleich des experimentellen (unten) und des berechneten IR-Spektrums (MP2/6-31G**, oben) von Silacyclop propane 4. Das experimentelle Spektrum (Ar-Matrix, 10 K) ist das zur Photoreaktion **4** → **5** gehörende Differenzspektrum. Die durchgestrichene Bande führt von Wasser her.

Ergänzend zu der Wasserstoff- haben wir auch die Deuterium-Vorstufe [2,2-D₂]**1** untersucht. Diese ist aus 1,1-Dibrom-2,2,2-trimethyl-1-phenyldisilan^[11b] durch Reduktion mit LiAlD₄ und anschließende Umsetzung mit Trifluormethansulfonsäure und Vinylmagnesiumchlorid in der beschriebenen Weise zugänglich. Die Hochvakuum-Blitzpyrolyse von [2,2-D₂]**1** führte zu zwei wichtigen Erkenntnissen: Zum einen bestätigen die festgestellten Bandenverschiebungen (siehe Tabelle 1) die Richtigkeit der getroffenen Strukturzuordnung von **4**; zum anderen geben die Befunde Einblick in den Mechanismus der Reaktion. Bei der Pyrolyse von [2,2-D₂]**1** entstehen die Silacyclop propane-Isotopomere [1-D]4 und [2-D]4 etwa im Verhältnis 1:1 sowie die beiden Ethinylsilan-Isotopomere [1-D]5 und [3-D]5, wobei ersteres überwiegt.

Zur Erklärung dieser Ergebnisse schlagen wir folgenden Mechanismus vor: Wie der Abfangversuch belegt, entsteht bei der Pyrolyse zunächst das Vinylsilandiyyl [1-D]2. Dieses kann über die 1-Silaalan-Zwischenstufe [1-D]8 im Gleichgewicht mit seinem Isotopomer [2-D]2 stehen. Aus [1-D]2 und [2-D]2 werden dann zu gleichen Teilen die energetisch günstigeren Silacyclop propane-Isotopomere [1-D]4 und [2-D]4 gebildet.



Die Umwandlung **2** → **4** könnte durch die Addition des Silandiyizentrums an die C-C-Doppelbindung eingeleitet werden. Diese Reaktion entspräche der gängigen Bildung von Cyclopropanen aus Vinylcarbenen. In unserem Fall müßte unter dieser Voraussetzung zunächst das 1-Silacyclop-1-en **9** entstehen, gefolgt von einer 1,2-H-Verschiebung. Die Struktur von **9** ist nach den Berechnungen allerdings kein Energieminimum, sondern ein Übergangszustand mit einer relativen Energie von

49.8 kcal mol⁻¹. Die Bildung von **4** aus **2** kann prinzipiell aber auch ganz anders verlaufen: durch Einschiebung des Silandiyizentrums in die C-H-Bindung der olefinischen CH₂-Gruppe von **2**.

Die Silacyclop propane [1-D]4 und [2-D]4 werden unter den Pyrolysebedingungen bereits teilweise zu den Ethinylsilan-Isotopomeren [1-D]5 und [3-D]5 geöffnet, womit das globale Minimum erreicht ist. Die gleiche Ringspaltung kann auch photochemisch induziert werden.

Eingegangen am 6. März 1995 [Z 7765]

Stichworte: Blitzpyrolyse · Gespannte Ringe · Photochemie · Siliciumverbindungen

- [1] a) M. E. Vol'pin, Yu. D. Koreshkov, D. N. Kursanov, *Izv. Akad. SSSR Otd. Khim. Nauk* **1961**, 1355–1356; b) M. E. Vol'pin, Yu. D. Koreshkov, V. G. Dulova, D. N. Kursanov, *Tetrahedron* **1962**, *18*, 107–122.
- [2] a) R. West, R. E. Bailey, *J. Am. Chem. Soc.* **1963**, *85*, 2871–2872; b) F. Johnson, R. S. Gohlke, W. H. Nasutavicius, *J. Organomet. Chem.* **1965**, *3*, 233–244; c) N. G. Bokii, Yu. T. Stuchkov, *Zh. Strukt. Khim.* **1965**, *6*, 751–758. d) Bezuglich einer theoretischen Analyse der Dimerisierung von Silacyclop propane bei höheren Temperaturen siehe E. A. Halevi, R. West, *J. Organomet. Chem.* **1982**, *240*, 129–141.
- [3] W. H. Atwell, D. R. Weyenberg, *Angew. Chem.* **1969**, *81*, 485–493; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1969**, *8*, 469–477.
- [4] R. T. Conlin, P. P. Gaspar, *J. Am. Chem. Soc.* **1976**, *98*, 3715–3716.
- [5] D. Seyerth, D. C. Annarelli, S. C. Vick, *J. Am. Chem. Soc.* **1976**, *98*, 6382–6384.
- [6] M. Ishikawa, T. Fuchikami, M. Kumada, *J. Am. Chem. Soc.* **1977**, *99*, 245–247.
- [7] H. Sakurai, Y. Kamiyama, Y. Nakadaira, *J. Am. Chem. Soc.* **1977**, *99*, 3879–3880.
- [8] J. Belzner, H. Ihmels, *Tetrahedron Lett.* **1993**, *34*, 6541–6544.
- [9] M. Trommer, W. Sander, C. Marquard, *Angew. Chem.* **1994**, *106*, 816–818; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1994**, *33*, 766–769.
- [10] G. Maier, H. P. Reisenauer, H. Pacl, *Angew. Chem.* **1994**, *106*, 1347–1349; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1994**, *33*, 1248–1250.
- [11] a) E. Hengge, G. Bauer, H. Marketz, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **1972**, *394*, 93–100; b) D. Littmann, Dissertation, Universität Gießen, **1985**.
- [12] 1: ¹H-NMR (Kapillare): $\delta = 0.44$ (s, 9 H, Si(CH₃)₃), 3.97 (d, ³J(H,H) = 3.4 Hz, 2 H, SiH), 6.03–6.17 (m, 1 H, =CHSi), 6.21–6.35 (m, 2 H, =CH₂); ¹³C-NMR (Kapillare): $\delta = -0.8$ (Si(CH₃)₃), 129.8 (=CHSi), 135.5 (=CH₂); ²⁹Si-NMR ([D₆]Benzol): $\delta = -63.0$ (SiH₂), -18.2 (Si(CH₃)₃).
- [13] 3: ¹H-NMR (Kapillare): $\delta = 1.65$ –1.74 (m, 2 H, CH₂), 1.80–1.88 (m, 2 H, CH₂), 1.95 (m, 6 H, CH₃), 4.53–4.58 (m, 1 H, SiH), 6.05–6.48 (m, 3 H, HC=CH₂); ¹³C-NMR: $\delta = 19.3$ (CH₃), 21.9 (SiCH₂), 130.7, 134.3, 134.9; ²⁹Si-NMR: $\delta = -12.7$.
- [14] Gaussian 92, Revision B: M. J. Frisch, G. W. Trucks, M. Head-Gordon, P. M. W. Gill, M. W. Wong, J. B. Foresman, B. G. Johnson, H. B. Schlegel, M. A. Robb, E. S. Replogle, R. Komپerts, J. L. Andres, K. Raghavachari, J. S. Binkley, C. Gonzales, R. L. Martin, D. J. Fox, D. J. Defrees, J. Baker, J. P. Stewart, J. A. Pople, Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, **1992**.
- [15] a) M. S. Gordon, R. D. Koob, *J. Am. Chem. Soc.* **1981**, *103*, 2939–2944; b) M. H. Lien, A. C. Hopkinson, *Chem. Phys. Lett.* **1981**, *80*, 114–118; c) J.-C. Barthelat, G. Trinquier, G. Bertrand, *J. Am. Chem. Soc.* **1979**, *101*, 3785–3789; d) K. Krogh-Jespersen, *J. Comput. Chem.* **1982**, *3*, 571–579. e) Siehe auch Berechnungen auf der Triplet-Energiehyperfläche: M.-D. Su, R. D. Amos, N. C. Handy, *J. Am. Chem. Soc.* **1990**, *112*, 1499–1504. f) Zum aromatischen Charakter von Silacyclop propane siehe P. R. Jones, D. D. White, *J. Organomet. Chem.* **1978**, *154*, C33–C36.
- [16] Eine ältere Berechnung des IR-Spektrums von **4**, allerdings ohne Angaben der Intensitäten, findet man bei M. S. Gordon, *J. Am. Chem. Soc.* **1980**, *102*, 7419–7422.