



Gregor Stößer (Autor)

Molekulare Oxide des Aluminiums: spektroskopische und theoretische Untersuchungen



<https://cuvillier.de/de/shop/publications/2697>

Copyright:

Cuvillier Verlag, Inhaberin Annette Jentsch-Cuvillier, Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen,
Germany

Telefon: +49 (0)551 54724-0, E-Mail: info@cuvillier.de, Website: <https://cuvillier.de>

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	4
2	Matrixisolationsspektroskopie	7
2.1	Matrixisolation	7
2.2	Experimenteller Aufbau	8
2.3	Spektroskopische Untersuchungsmethoden	11
2.3.1	Infrarotspektroskopie	12
2.3.2	Ramanspektroskopie	12
2.3.3	UV/VIS-Spektroskopie	14
2.4	Normalkoordinatenanalyse	15
3	Theoretische Methoden	16
3.1	Quantenchemische Verfahren	16
3.1.1	Die Born-Oppenheimer Näherung	17
3.1.2	ab-initio Methoden	18
3.1.2.1	Das Hartree-Fock Verfahren	18
3.1.2.2	Störungstheoretischer Ansatz nach Møller und Plesset	20
3.1.2.3	Configuration Interaction	21
3.1.2.4	Coupled Cluster Theorie	23
3.1.3	Dichtefunktionaltheorie	23
3.1.3.1	Das Theorem von Hohenberg und Kohn	24
3.1.3.2	Die Kohn-Sham Gleichungen	24
3.1.3.3	Die Lokale Dichte Approximation (LDA)	25
3.1.3.4	Becke Lee Yang Paarpotential B3LYP	26
3.1.4	Basisfunktionen	26
3.1.5	Geometrieoptimierung und Schwingungsfrequenzen	27

3.1.6	Die Berechnung thermodynamischer Zustandsgrößen	28
3.1.7	Vergleichende Bewertung der verwendeten quantenchemischen Verfahren	29
4	Die Gasphasenzusammensetzung über Korund	31
4.1	Thermodynamische Berechnungen	32
4.1.1	Grundlagen	32
4.1.2	Aufstellung der Reaktionsgleichungen	33
4.1.3	Implementierung des Programms	33
4.1.4	Ergebnisse	35
4.2	Aluminiumsuboxide	36
4.2.1	Aluminiummonoxid AlO	37
4.2.2	Dialuminiumoxid Al ₂ O	40
4.2.3	Dialuminiumdioxid Al ₂ O ₂	41
4.2.4	Tri- und Tetraaluminiumoxid Al ₃ O und Al ₄ O	44
4.2.5	Al ₃ O ₂	46
4.3	Wolframoxide	48
4.4	Zusammenfassung	49
5	Kleine Aluminiumcluster in Matrix und Gasphase	51
6	Dialuminiumoxid und seine Reaktionsprodukte	56
6.1	Dimeres Al ₂ O, Al ₄ O ₂	56
6.2	Al ₂ O·(O ₂) _n (n=1-4)	59
6.2.1	Al ₂ O ₃	59
6.2.2	Al ₂ O ₅	62
6.2.3	Al ₂ O ₆	62
6.2.4	Al ₂ O ₇ und Al ₂ O ₉	62
6.2.5	Übersicht über die Ergebnisse der Rechnungen	62
6.3	Spektroskopische Ergebnisse	72
6.4	Zusammenfassung	78
7	Produkte der Reaktion von Aluminiumatomen mit Sauerstoff	80
7.1	Einleitung	80
7.2	Experimentelles	80
7.3	Aluminiumdioxid AlO ₂	83

7.4	Al_2O_4	92
7.5	Aluminiumtrioxid AlO_3	94
7.6	Aluminiumtetraoxid AlO_4	99
7.7	Aluminiumpentoxid AlO_5	102
7.8	Zusammenfassung	104
8	Aluminium-Trishyperoxid AlO_6	106
8.1	Einleitung	106
8.2	Berechnete geometrische und elektronische Struktur von AlO_6	108
8.3	Theoretische Behandlung ausgewählter Schwingungsmoden von AlO_6	112
8.4	Darstellung von AlO_6	117
8.5	IR-Untersuchungen an AlO_6	117
8.6	Raman-Untersuchungen an AlO_6	123
8.7	Vergleich der erhaltenen Ergebnisse zu AlO_6 mit bekannten Hyperoxover- bindungen, Skalierung der Rechnungen	127
8.8	Normalkoordinatenanalyse	129
	8.8.1 Vereinfachte Betrachtung für $\text{Al}[\text{O}_2]_3$	130
	8.8.2 Vergleich mit den Aluminiumchloriden AlCl_n ($n=1,2,3$)	131
8.9	Energetische Betrachtungen, Vergleich von Matrix- zu Standardbedingungen	133
8.10	Zusammenfassung	137
9	Zusammenfassung	139
10	Anhang	143
10.1	Verwendete Chemikalien und Arbeitsmittel	143
10.2	Abkürzungsverzeichnis	144
10.3	Numerische Auflistung der in dieser Arbeit diskutierten Verbindungen . . .	145
10.4	Ergebnisse der quantenchemischen Rechnungen	145
	10.4.1 Aktiver Raum der CASSCF-Rechnungen	145
10.5	Kraftkonstanten	148
10.6	Thermodynamische Daten	149
10.7	Publikationsliste	151