



Barbara Verena Unterreiner (Autor)

**Untersuchung von Aufbaureaktionen polyzyklischer
aromatischer Kohlenwasserstoffe mit
Dichtefunktionaltheorie: Stationäre Punkte von
Energiehyperflächen**

Barbara Verena Unterreiner

**Untersuchung von Aufbaureaktionen
polyzyklischer aromatischer Kohlenwasserstoffe
mit Dichtefunktionaltheorie:
Stationäre Punkte von Energiehyperflächen**



Cuvillier Verlag Göttingen

<https://cuvillier.de/de/shop/publications/2992>

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	1
2	Methoden der Quantenchemie	5
2.1	Notation	5
2.2	Die Hartree-Fock-Methode	7
2.2.1	Die UHF-Methode	8
2.2.2	Die RHF- und die ROHF-Methode	8
2.2.3	Basissatzentwicklung und Roothaan-Hall-Gleichungen	9
2.3	Møller-Plesset-Störungstheorie (MP2)	9
2.4	Das CC2-Modell	11
2.5	Dichtefunktionaltheorie (DFT)	12
2.5.1	Näherungen für das Austausch-Korrelations-Funktional	15
2.6	Die RI-Näherung	16
2.7	Aufwand der Methoden	17
2.8	Genauigkeit der Methoden	18
2.8.1	Moleküleigenschaften	19
2.9	Basissätze	20
3	Stationäre Punkte von Energiehyperflächen	21
3.1	Charakterisierung stationärer Punkte	22
3.1.1	Suche stationärer Punkte	23
3.2	„Reduced Gradient Following“ (RGF)	25
3.2.1	Einbettung in TURBOMOLE	27
3.2.2	Kommentare zum Programm RGF	28

3.3	„Trust Radius Image“ Minimierung	29
3.3.1	Kommentare zum Programm STATPT	32
4	Reaktionen von PAHs	35
4.1	Nomenklatur der PAHs	35
4.2	C – H- und C – CH ₃ -Bindungsenergien und Strukturen von PAHs	37
4.2.1	Rechenmethoden und deren Genauigkeit	37
4.2.2	Ergebnisse und Diskussion	38
4.2.3	Zusammenfassung	44
4.3	Wasserstoff-Verschiebungen	44
4.3.1	Ergebnisse der Wasserstoff-Verschiebungen	45
4.3.2	Zusammenfassung	47
4.4	Wachstum von PAHs	48
4.4.1	Rechenmethode und deren Genauigkeit	48
4.4.2	Kondensation aromatischer Kohlenwasserstoffe	53
4.4.3	Elementarreaktionen von PAHs mit Acetylen	61
4.4.4	Ergebnisse	62
4.4.5	Zusammenfassung	75
5	Zusammenfassung	79
6	Abkürzungsverzeichnis	81
A	Tabellen zu Abschnitt 4.3	83
B	Tabellen zu Abschnitt 4.4.1	87
C	Tabellen zu Abschnitt 4.4.2.1	93
D	Tabellen zu Abschnitt 4.4.2.2	101
E	Tabellen zu Abschnitt 4.4.2.3	107
F	Tabellen zu Abschnitt 4.4.4.1	117

G Tabellen zu Abschnitt 4.4.4.2	125
H Tabellen zu Abschnitt 4.4.4.3	139
I Tabellen zu Abschnitt 4.4.4.4	149
J Tabellen zu Abschnitt 4.4.4.5	159