

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Theorie	4
2.1. Hartree-Fock-Methode	4
2.2. Dichtefunktionaltheorie	8
2.2.1. Die RI-J-Näherung	10
2.3. Geometrieoptimierung	12
2.3.1. Optimierung in verschiedenen Koordinatenräumen	13
2.4. Kraftfeld-Methoden	15
2.4.1. Kraftfelder bei Übergangsmetall-Verbindungen	16
2.4.2. Das Kraftfeldprogramm UFF	17
2.4.3. Das Charge Equilibration Modell (QEq)	21
2.4.4. Genauigkeit des UFF-Kraftfelds	24
3. Einfluß von H^{UFF} auf die Konvergenz der Geometrieoptimierungen	26
3.1. Beschleunigungsfaktoren A , B und der Gütefaktor R_G	27
3.2. Substanzklassen	28
3.2.1. n-Alkane C_nH_{2n+2}	28
3.2.2. Hauptgruppenelement-Verbindungen (HP)	29
3.2.3. Polycyclische Kohlenwasserstoffe (PAH)	31
3.2.4. Übergangsmetall-Verbindungen (ÜM)	32
3.2.5. Diskussion der Ergebnisse	34
4. C-H- und C-CH₃-Bindungsenergien in PAHs	37
4.1. Aufbau der Modell PAHs und untersuchte Elementarreaktionen	37
4.2. Rechenmethode und deren Genauigkeit	38
4.3. Ergebnisse und Diskussion	39
4.4. Geometrien	42
5. Zusammenfassung	46
A. Nomenklatur	48
B. Hauptgruppenelement-Verbindungen (HP)	49
B.1. Strukturen der Moleküle	49
B.2. Anzahl der Geometriezyklen	53
B.3. Reduktionsfaktor R_G	55
B.4. Beschleunigungsfaktoren \bar{A} , B	56

Inhaltsverzeichnis

C. Polycyclische aromatische Kohlenwasserstoffe (PAH)	57
C.1. Strukturen der Moleküle	57
C.2. Anzahl der Geometriezyklen	59
C.3. Reduktionsfaktor R_G	60
C.4. Beschleunigungsfaktoren \bar{A} , B	60
D. Übergangsmetallverbindungen (ÜM)	61
D.1. Strukturen der Moleküle	61
D.2. Anzahl der Geometriezyklen	63
D.3. Reduktionsfaktor R_G	64
D.4. Beschleunigungsfaktoren \bar{A} , B	64
E. UFF-Implementierung in TURBOMOLE	65
E.1. Realisierung	65
E.1.1. Block \$uff in der TURBOMOLE control-Datei	66
E.1.2. Aufbau einer Topologie-Datei	67
E.2. Modifizierung der Hesse-Matrix	69
E.3. Struktur des Programms UFF	70
Literaturverzeichnis	74
Danksagung	78
Lebenslauf	79