

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung und Zielsetzung	1
2. Fullereene	5
2.1. Strukturprinzipien und Stabilität	5
2.2. Schlegel-Diagramme	9
2.3. Systematische Nummerierung von Fullerenen	10
2.4. Darstellung und Isolierung	11
3. Methoden	13
3.1. Die molekulare Schrödinger-Gleichung	13
3.2. Dichtefunktionalmethoden	14
3.2.1. Theoretische Grundlagen	15
3.2.2. Näherungen für das Austausch-Korrelations-Funktional	17
3.2.3. Technische Aspekte	20
3.2.4. Dispersionskorrektur	25
3.2.5. DFTB-Methode	26
3.3. Wellenfunktionsmethoden	28
3.3.1. Hartree-Fock-Verfahren und Elektronenkorrelation	28
3.3.2. Møller-Plesset-Störungstheorie	29
3.3.3. Coupled-Cluster-Verfahren	30
3.3.4. Basissatzkonvergenz und R12-Methoden	32
3.3.5. Technische Aspekte	34
4. Benchmark-Rechnungen an Benzol und Naphthalin	37
4.1. Methoden	37
4.2. Relative Energien	39
4.3. Hydrierungsenergien	46
5. Bestimmung der Additionsmuster besonders stabiler Fullerenhydride	51
5.1. Empirische Regeln	52
5.2. Systematische Hydrierung von Fullerenen	52
5.3. Test an C ₆₀	56

I

6. Hydrierung von C_{58}	63
6.1. Relevante C_{58} -Isomere: $C_{58}-C_s$ und $C_{58}-C_{3v}$	63
6.2. Hydrierung von $C_{58}-C_s$	65
6.2.1. Additionsmuster in Reaktionsweg 1	67
6.2.2. Additionsmuster in Reaktionsweg 2	68
6.2.3. Vergleich mit experimentell isoliertem $C_{58}F_{18}$	72
6.3. Hydrierung von $C_{58}-C_{3v}$	72
6.3.1. Additionsmuster in Reaktionsweg 1	74
6.3.2. Additionsmuster in Reaktionsweg 2	75
6.4. Ergebnisse	78
7. Hydrierung von C_{50}	79
7.1. Relevante C_{50} -Isomere: $C_{50}-D_{5h}$ und $C_{50}-D_3$	79
7.2. Hydrierung von $C_{50}-D_{5h}$	81
7.3. Hydrierung von $C_{50}-D_3$	84
7.4. Ergebnisse	88
8. $C_{60}-C_{2v}$ – das stabilste non-IPR-Isomer von C_{60}	91
8.1. Stone-Wales-Umlagerung von $C_{60}-I_h$	92
8.2. Hydrierung von $C_{60}-C_{2v}$	93
8.2.1. Additionsmuster	95
8.2.2. Vergleich mit experimentell isoliertem $C_{60}Cl_8$	96
8.3. Aggregation von $C_{60}-C_{2v}$	96
8.3.1. Strukturen und Bindungsenergien	97
8.3.2. Photoelektronenspektren	101
8.4. Ergebnisse	103
9. Zusammenfassung	105
A. Basissätze	107
B. Tabellen zu Kapitel 4	109
C. Schlegel-Diagramme	115