

Struktur und elektronische Eigenschaften von Biradikaloiden



Universität Stuttgart
Institut für Theoretische Chemie

Projektart
B.Sc. / M.Sc.

Betreuer:
Alexander Waigum*

Prüfer:
Prof. Dr. Andreas Köhn

*waigum@theochem.uni-stuttgart.de

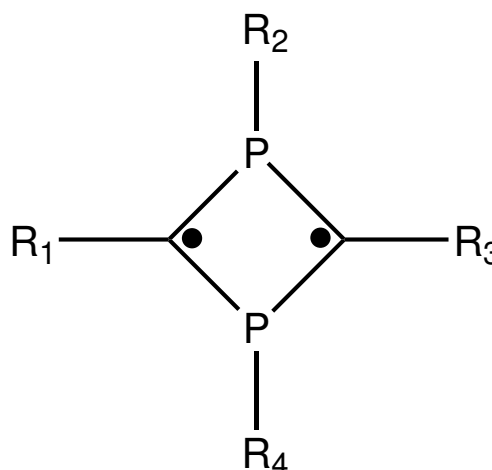
Stichworte: Radikale \diamond Geometrieoptimierung \diamond Coupled-Cluster-Theorie

Motivation

Biradikale treten als oft nur kurzlebige Intermediate von Reaktionen auf, bei welchen Bindungen homolytisch gebrochen werden. Die experimentelle Untersuchung dieser Moleküle ist dadurch oft schwierig. Durch spezielle, sterisch anspruchsvolle Liganden gelingt es aber auch, hinreichend stabile Moleküle mit Biradikal-Charakter zu synthetisieren, z.B. die sogenannten Niecke-Biradikaloiden (siehe Abbildung). Die Beschreibung der elektronischen Struktur dieser Verbindungen ist eine Herausforderung für quantenchemische Methoden und ein ideales Testfeld für die in unserer Gruppe entwickelten Methoden.

Thema

Im Laufe dieses Projektes werden Sie verschiedene einfache Modellsysteme mit dem unten gezeigten Grundgerüst modellieren und z.B. deren Struktur (Wie stark pyramidal ist der Phosphor?) und elektronische Eigenschaften (Wie stabil ist das Triplett gegenüber einem Singulett? Bildet sich eine transannulare Bindung aus?) untersuchen. Dazu wenden Sie zunächst verschiedene Standard-Methoden (Dichtefunktionaltheorie) an und überprüfen deren Genauigkeit punktuell mit Coupled-Cluster-Theorie. Für einige Fälle werden Sie hierbei die in unserem Arbeitskreis entwickelten Multireferenz-Coupled-Cluster-Methoden benötigen, deren Anwendung Sie ebenfalls erlernen werden.



Grundstruktur eines Niecke-Biradikaloids.