

Masterpraktikum Organische Chemie

Density Functional Theory und Coupled Cluster Untersuchung der Diels-Alder Reaktion von 2,3-Dichlorcyclopenta-1,3-dien mit 2,5-Dioxo-2,5-dihydrofuran-3-carbonitril

Vorgelegt von:

Noel Marks

Studiengang: M.Sc. Chemie

Zusammenfassung

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetur id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Diels-Alder Reaktion	1
2	Methoden und Modelle	3
3	Auswertung	4
4	Auswertung	5
5	Fehlerrechnung	6
6	Anhang	7
7	Literaturverzeichnis	8

1 Einleitung

In dieser Studie wird [...] Dichtefunktionaltheorie und Coupled Cluster verglichen.¹

1.1 Diels-Alder Reaktion

Die Diels-Alder-Reaktion ist eine [...] in der synthetischen organischen Chemie.^[1]

Elektronischer Hamilton-Operator (Gleichung (1))

$$\hat{H}_{\text{el}} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha=1}^M \frac{Z_{\alpha}}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_{\alpha}|} + \sum_{i>j}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (1)$$

$$\tilde{\Psi}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(\mathbf{r}_1) & \dots & \phi_1(\mathbf{r}_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_N(\mathbf{r}_1) & \dots & \phi_N(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix} \quad (2)$$

So kann man im Text auf die Abbildung verweisen: Abbildung 1

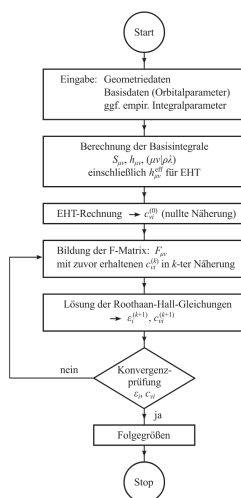


Abbildung 1: Eine graphische Darstellung der SCF Methode.^[2]

• Orbitale vom Gaußschen Typ (GTOs):

$$\chi_{\mu}(\mathbf{r}) = N x^l y^m z^n e^{-\alpha \|\mathbf{r}-\mathbf{R}\|^2} \quad (1)$$

- N : Normierungskonstante
 α : Exponent (radialer Zerfall)^[3]
 (l, m, n) : Drehimpulsquantenzahlen
 \mathbf{R} : Kernkoordinate (X, Y, Z)

¹Eine Fussnotiz kommt hier hin Nicolaou u. a. [1]

• **Slater-Type Orbitals (STOs):**

$$e^{-\zeta\|\mathbf{r}-\mathbf{R}\|}$$

+ Bessere Approximation der Atomorbitale

- Rechenintensive Integralberechnung

→ Nur für spezielle Anwendungen/Referenzrechnungen

[2–4]

Auf diese kann man wie Abbildungen verweisen: **Tabelle 1**

Tabelle 1: Die gemessenen Winkel und Abstände der optimierten Geometrien. Die farbigen Atome zeigen die zwischen denen die jeweilige Größe gemessen wurde. Die blauen Atome sind von dem 2,5-Dioxo-2,5-dihydrofuran-3-carbonitril und die grünen sind von dem 2,3-Dichlorcyclopenta-1,3-dien.

	Diederwinkel / °	Winkel / °	intramolekulare Distanz / Å	
	O=C – C(CN) – CH – C=O	HC – CH ₂ – CH	NC – C – CH	HC – CH
Präkomplex	179.635	103.941	3.171	3.159
Übergangszustand	175.785	99.973	2.309	2.038
Produkt	177.903	93.887	1.590	1.570

Tabelle 2: Die berechneten Energiedifferenzen in kJ mol⁻¹.

	DFT	DFT + ZPE	CC	CC + ZPE
	kJ mol ⁻¹			
Edukte - Präkomplex (Assoziationsenergie)	-37.24	-34.02	-32.39	-29.17
Edukte - Übergangszustand (Aktivierungsenergie)	16.40	23.07	20.78	27.45
Edukte - Produkt (thermodynamische Energie^a)	-90.75	-72.57	-135.71	-117.52

^a Auch als Reaktionsenthalpie ΔH bekannt, wird aber im weiteren Verlauf mit ΔE bezeichnet

2 Methoden und Modelle

3 Auswertung

4 Auswertung

5 Fehlerrechnung

6 Anhang

7 Literaturverzeichnis

- [1] K. C. Nicolaou, S. A. Snyder, T. Montagnon, G. Vassilikogiannakis, *Angewandte Chemie International Edition* **2002**, 41, 1668–1698.
- [2] L. Zülicke in *Molekulare Theoretische Chemie: Eine Einführung*, Springer Fachmedien Wiesbaden, Wiesbaden, **2015**, S. 781–863.
- [3] J. Reinhold in *Quantentheorie der Moleküle: Eine Einführung*, Springer Fachmedien Wiesbaden, Wiesbaden, **2015**, S. 223–284.
- [4] A. Szabo, N. S. Ostlund, *Modern quantum chemistry : introduction to advanced electronic structure theory*, Unabridged, unaltered republ. of the 1. ed., rev., New York, 1989, Dover, Mineola, NY, **1996**.