

# Inhaltsverzeichnis

<b>Inhaltsverzeichnis</b>	v
<b>I Einführung und Theorie</b>	<b>1</b>
<b>1 Einleitung</b>	<b>3</b>
1.1 Übergangsmetalle und ihre Verwendung . . . . .	4
1.2 Übergangsmetallcluster . . . . .	4
1.2.1 Halogen- und Carbonylmetallcluster . . . . .	4
1.2.2 Interstitiell stabilisierte Metallcluster, Goldcluster und das Superatomkonzept . . . . .	6
1.3 Übergangsmetallkomplexe . . . . .	7
1.3.1 Ursprünge der Koordinationsverbindungen . . . . .	7
1.3.2 (cAAC)-Liganden . . . . .	8
1.4 Übergangsmetallverbindungen der Fischer-Gruppe . . . . .	9
<b>2 Theoretische Grundlagen</b>	<b>13</b>
2.1 Die Schrödinger-Gleichung . . . . .	14
2.2 Der Hartree-Fock-Ansatz . . . . .	18
2.3 Dichtefunktionaltheorie (DFT) . . . . .	23
2.3.1 Grundlagen . . . . .	24
2.3.2 Hohenberg-Kohn-Theoreme . . . . .	24
2.3.3 Kohn-Sham-Ansatz . . . . .	25
2.3.4 Funktionale . . . . .	26
2.4 Dispersionskorrekturen . . . . .	28

## INHALTSVERZEICHNIS

2.5	Relativistik . . . . .	29
2.6	Basissätze . . . . .	31
2.7	Geometrieoptimierung . . . . .	33
2.8	Schwingungsfrequenzen und thermodynamische Korrekturen	34
2.9	Bindungsanalyse . . . . .	35
2.9.1	Natural Bond Orbitals-Analyse (NBO) . . . . .	35
2.9.2	Atoms in Molecules (AIM) . . . . .	37
2.9.3	Energiedekompositionsanalyse (EDA) . . . . .	38
<b>3</b>	<b>Verwendete Methoden</b>	<b>41</b>
<b>II</b>	<b>Ergebnisse und Diskussion</b>	<b>45</b>
<b>4</b>	<b>Münzmetallcluster mit interstitiellen Gruppe-10-Atomen</b>	<b>47</b>
4.1	Einleitung und Synthese . . . . .	48
4.2	Pt@Au <sub>12</sub> , Pd@Au <sub>12</sub> und Ni@Au <sub>12</sub> . . . . .	49
4.2.1	Geometrien . . . . .	49
4.2.2	Einordnung der Bindungssituation . . . . .	52
4.2.3	Bindungsanalysen . . . . .	55
4.3	Ni@Au <sub>9</sub> Al und Ni@Au <sub>7</sub> Al <sub>2</sub> . . . . .	65
4.3.1	Geometrien . . . . .	65
4.3.2	Bindungsanalysen . . . . .	67
4.4	Mo@Au <sub>8</sub> Ga <sub>4</sub> . . . . .	74
4.4.1	Geometrien . . . . .	74
4.4.2	Bindungsanalysen . . . . .	74
4.5	Pt@X <sub>12</sub> , Pd@X <sub>12</sub> und Ni@X <sub>12</sub> (X = Au/Ag/Cu) . . . . .	81
4.5.1	Geometrien . . . . .	81
4.5.2	Bindungsanalysen . . . . .	82
4.5.3	Einfluss von Dispersionskorrekturen . . . . .	90
4.6	Fazit . . . . .	91
<b>5</b>	<b>Organozinkreiche Rutheniumkomplexe &amp; Homologe</b>	<b>95</b>
5.1	Einleitung und Synthese . . . . .	96
5.2	[Cp <sup>*</sup> Ru(ZnCp <sup>*</sup> ) <sub>3</sub> (ZnMe)(ZnCl)] und [Ru(ZnCp <sup>*</sup> ) <sub>4</sub> (ZnMe) <sub>6</sub> ] . . . .	97

## INHALTSVERZEICHNIS

5.2.1	Geometrien . . . . .	97
5.2.2	Einordnung der Bindungssituation . . . . .	99
5.2.3	Bindungsanalysen . . . . .	100
5.3	[Cp* M(YMe) <sub>5</sub> ] und [M(YMe) <sub>10</sub> ] (M = Fe–Os ; Y = Zn–Hg) . . . .	111
5.3.1	Geometrien . . . . .	112
5.3.2	Bindungsanalysen . . . . .	114
5.4	Fazit . . . . .	127
<b>6</b>	<b>(cAAC)-stabilisierte Münzmetall(0)-Komplexe</b>	<b>129</b>
6.1	Einleitung und Synthese . . . . .	130
6.2	Geometrien . . . . .	133
6.3	Bindungsanalysen . . . . .	137
6.3.1	Visualisierung der Spindichte . . . . .	137
6.3.2	NBO-Analyse . . . . .	138
6.3.3	Topologische Analyse der Elektronendichte . . . . .	139
6.3.4	EDA-NOCV . . . . .	140
6.3.5	Grenzorbitalbetrachtung . . . . .	150
6.3.6	Einfluss von relativistischen Effekten . . . . .	154
6.4	Fazit . . . . .	157
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>159</b>
<b>8</b>	<b>Summary</b>	<b>163</b>
<b>III</b>	<b>Literatur und Anhang</b>	<b>167</b>
<b>A</b>	<b>Anhang</b>	<b>169</b>
	Literaturverzeichnis	193
	Abbildungsverzeichnis	195
	Tabellenverzeichnis	199
	Curriculum Vitae	203
<b>B</b>	<b>Nachwort</b>	<b>207</b>