

# Molekulare Graphenoide mit Pentagon-Heptagon-Defekten



Universität Stuttgart

Institut für Theoretische Chemie

## Projekttyp

B. Sc. / Praktikum / M. Sc.

## Betreuer:

Robert Töws

## Prüfer:

Prof. Andreas Köhn

**Schlüsselwörter:** Molekulare Graphenoide  $\diamond$  Pentagon-Heptagon-Defekte  $\diamond$  Elektrische Felder

## Motivation

Molekulare Graphenoide sind planare, vollständig konjugierte Moleküle, die als Fragmente des hexagonalen Graphen-Gitters betrachtet werden können. Defekte sind dabei Abweichungen in der chemischen Struktur von der entsprechenden Referenz. Im Fall eines Pentagon-Heptagon-Defekts wird formal ein Hexagon-Paar durch ein Pentagon-Heptagon-Paar ersetzt. Cyclohepta[def]fluorene ist hierfür ein einfaches Beispiel, s. Abbildung 1(a). In Analogie zum bekannten Azulen-Molekül bewirkt dieser Defekt ein erhebliches Dipolmoment im Singulett-Zustand. Zudem besteht eine Konkurrenz zwischen diesem Zustand und einem Triplett-Zustand bzgl. des elektronischen Grundzustandes, vgl. Abbildung 1(b).

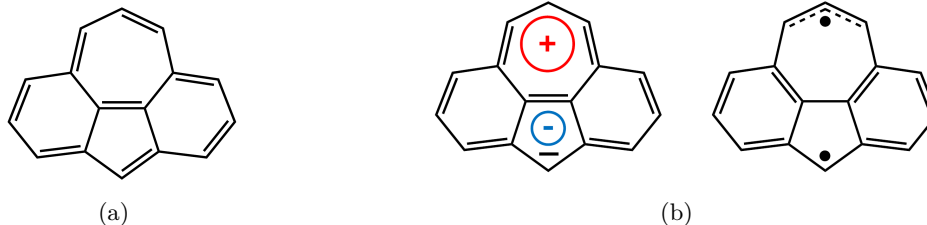


Abbildung 1: Strukturformel von Cyclohepta[def]fluorene (a) und graphische Darstellung von Singulett- und Triplett-Zustand (b).

Die Kontrolle der elektronischen Struktur in Molekülen durch äußere elektrische Felder ist Gegenstand aktueller Forschung und potenziell relevant für innovative technologische Ansätze. Dabei kann Cyclohepta[def]fluoren als prototypisches System dienen um ein grundlegendes Verständnis relevanter Effekte zu entwickeln.

## Thema

Dieses Forschungsprojekt befasst sich mit dem Einfluss äußerer elektrischer Felder auf die Elektronenstruktur von Cyclohepta[def]fluoren und verwandten molekularen Graphenoiden. Insbesondere soll der Einfluss auf die Gleichgewichtsgeometrien von elektronischem Grundzustand und tiefliegenden angeregten Zuständen untersucht werden. Zu diesem Zweck erfolgt die Anwendung von zeitabhängiger Dichtefunktionaltheorie sowie Multireferenz-Störungstheorie zweiter Ordnung. Abhängig vom jeweiligen Zeitrahmen können zusätzliche Aspekte behandelt werden, z. B. die Dynamik angeregter Zustände unter Berücksichtigung relativistischer Effekte.