

Diss. Nr. 4283

**I. Modifikation der „Extended Hückel“ Theorie
II. Ab-Initio-Rechnungen mit minimaler Basis
von Gauss-AO-Funktionen**

ABHANDLUNG
zur Erlangung der Würde eines
Doktors der Naturwissenschaften
der
EIDGENÖSSISCHEN TECHNISCHEN
HOCHSCHULE ZÜRICH

vorgelegt von
HAROLD FRANK BAUMANN
dipl. Naturwissenschaftler ETH
geboren am 12. Juli 1941
von Bern

Angenommen auf Antrag von
Prof. Dr. E. Heilbronner, Referent
Prof. Dr. W. Simon, Korreferent

1968
Bamberg
aku-Fotodruck

III. ZUSAMMENFASSUNG

- 1) Durch Vernachlässigung der Overlap-Integrale und Ersatz der Mulliken-Beziehung durch eine andere Parametrisierung (anhand von Morse-Potentialen gewonnen) wurde versucht, die 'Extended Hückel'-Theorie zu modifizieren. Die Leistungsfähigkeit der beiden Methoden wurde anhand einiger ausgewählter Probleme diskutiert: Bildungsenergien, Spannungsenergien, Stabilitäten von Isomeren und Valenzisomerisierung vom Woodward-Hoffmann-Typ.

- 2) Es wurde versucht, die SCF-MO-LCGO-Methode von Clementi und Davis durch Einführung eines geeigneten minimalen Basissatzes von Gauss-Atomorbitalen so zu vereinfachen, dass es auf organisch chemische Probleme anwendbar wird. Mittels des Koopman-Theorems wurden die Ionisationspotentiale einiger ausgewählter Molekeln berechnet. Die Resultate wurden mit PE-Spektren verglichen.