Anhang

Abkürzungsverzeichnis

□	freie Koordinationsstelle
II	Basissatz II
III+	Basissatz III+
AO	Atomorbital
B3LYP	Drei-Parameter-Dichtefunktional-Hartree-Fock-Hybridfunktional von Becke in Verbindung mit dem Korrelationsfunktional von Lee, Yang und Parr
CDA	Charge-Decomposition-Analysis
CI	Konfigurationswechselwirkungs-Methode
CC	Coupled-Cluster-Methode
CCSD(T)	Coupled-Cluster-Singles-Doubles-Methode mit einer störungstheoretischen Näherung für die Dreifachanregungen
DCD	Dewar-Chatt-Duncanson-Modell
DFT	Dichtefunktionaltheorie
DMDO	Dimethyldioxiran
DO	Dioxiran
ECP	*effective core potential*
FO	Fragmentorbital
hmpa	Hexamethylphoshorsäuretriamid
HOMO	*highest occupied molecular orbital*
IRC	Intrinsische Reaktionskoordinate
L	Ligand
L‘	Ligand
L-L‘	Chelatligand
LCAO	*linear combination of atomic orbitals*
LUMO	*lowest unoccupied molecular orbital*
M1/B1	Quantenchemisches Niveau; Kombination der Methode M1 mit dem Basissatz B1
M2/B2//M1/B1	*single point* Energieberechnung auf M2/B2-Niveau für eine auf

	M1/B1-Niveau optimierte Struktur
MCPBA	*m*-Chlorperbenzoesäure
MD	Moleküldynamik
Me	Methyl
MO	Molekülorbital
MTO	Methyltrioxorhenium(VII)
NAO	*natural atomic orbital*
NBO	*natural bond orbital*
NR	Newton-Raphson-Verfahren
OWSO	*occupancy-weighted symmetric orthogonalization*
Ph	Phenyl
PMTO	Methyloxodiperoxorhenium(VII)
R	Alkylrest
R‘	Alkyl- oder Arylrest
SCF	*self-consistant field*
TS	Übergangszustand; *transition state*
ZPE	Nullpunktschwingungsenergie, *zero-point energy*

Publikationsliste

Stand: 12.01.2000. Eine aktuelle Version ist abrufbar unter http://staff-www.uni-marburg.de/~deubel/pubs.html. Die in dieser Arbeit enthaltenen Veröffentlichungen sind mit dem Vermerk *Dissertation* gekennzeichnet.

1. „Reaction Mechanisms of Transition Metal Catalyzed Reactions.“ Christian Boehme, Stefan Dapprich, Dirk Deubel, Ulrich Pidun, Martin Stahl, Ralf Stegmann und Gernot Frenking*; in "Symposium Series No. 721/ Transition State Modeling for Catalysis," Donald G. Truhlar, Keiji Morokuma (Ed.), American Chemical Society, Washington, 1998, Kap. 9, S. 114-127. (ISBN: 0-8412-3610-0)

2. „Phosphoraneiminato Complexes of Rhenium(VII). Syntheses and Crystal Structures of $[ReO_3(NPR_3)]$ (R = Ph, Et) and of $[ReO(OSiMe_3)_3(Me_3SiNPEt_3)]$.“ Sabine Schlecht, Dirk V. Deubel, Gernot Frenking, Gertraud Geiseler, Klaus Harms, Jörg Magull und Kurt Dehnicke* *Z. anorg. allg. Chem.* **1999**, *625*, 887-891.

3. „Are There Metal Oxides That Prefer a [2+2] Over a [3+2] Addition to Olefins? Theoretical Study of the Reaction Mechanism of $LReO_3$ Addition (L = O^-, Cl, Cp) to Ethylene.“ Dirk V. Deubel und Gernot Frenking* *J. Am. Chem. Soc.* **1999**, *121*, 2021-2031.

4. „Phosphane lone-pair energies as a measure of ligand donor strengths and relation to activation energies.“ Hans Martin Senn*, Dirk V. Deubel, Peter E. Blöchl, Antonio Togni und Gernot Frenking, *J. Mol. Struct. (Theochem)*, Sonderheft zur WATOC 99, im Druck.

5. *Dissertation (Projekt 1)* „Theoretical Studies of Molybdenum Peroxo Complexes $[MoO_n(O_2)_{3-n}(OPH_3)]$ as Catalysts for Olefin Epoxidation.“ Dirk V. Deubel, Jörg Sundermeyer und Gernot Frenking*, *Organometallics*, in Revision.

6. *Dissertation (Projekt 2)* „The End of the Long-Standing Controversy? Mechanism of Ethylene Epoxidation by Mimoun-Type Diperoxo Complexes.“ Dirk V. Deubel, Gernot Frenking* und Jörg Sundermeyer, *J. Am. Chem. Soc.*, eingereicht zur Veröffentlichung.

7. „First Theoretical and Experimental Evidence For a [2+2] Cycloaddition of a Transition Metal Oxide Across a C=C Double Bond.“ Sabine Schlecht, Dirk V. Deubel, Kurt Dehnicke* und Gernot Frenking*, eingereicht zur Veröffentlichung.

8. *Dissertation (Projekt 4)* „On the Electronic Character of Oxygen-Transfer Reactions.“ Dirk V. Deubel, Gernot Frenking*, Hans Martin Senn und Jörg Sundermeyer, eingereicht zur Veröffentlichung.

9. „Elektronische Struktur der Übergangszustände für die [2+2]-Cycloadditionen von CH_2=CH_2,CH_2=O und [M]=O an die C=C-Doppelbindung von Keten. Dirk V. Deubel und Gernot Frenking*, eingereicht zur Veröffentlichung.

10. *Dissertation (Projekt 3)* „Optimization of a Catalyst for Olefin Epoxidation with the Help of Quantum-Chemical Methods.“ Dirk V. Deubel, Jörg Sundermeyer und Gernot Frenking*, Manuskript in Vorbereitung.

11. „Structural and Electronic Properties of Phosphanes as Ligands for Homogeneous Catalysis.“ Manuskript in Vorbereitung.

12. „DFT Calculations Reveal Three Different Pathways for Metal Oxide Addition to Ketene; Towards an Understanding of the Astonishing Periselectivity.“ Manuskript in Vorbereitung.