



Philipp Zielke (Autor)

**Ramanstreuung am Überschallstrahl:  
Wasserstoffbrückendynamik aus neuer Perspektive**



<https://cuvillier.de/de/shop/publications/1814>

Copyright:

Cuvillier Verlag, Inhaberin Annette Jentsch-Cuvillier, Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen,  
Germany

Telefon: +49 (0)551 54724-0, E-Mail: [info@cuvillier.de](mailto:info@cuvillier.de), Website: <https://cuvillier.de>

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einführung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Grundlagen</b>	<b>5</b>
2.1	Ramanspektroskopie an Clustern . . . . .	5
2.1.1	Stimulierte Ramanspektroskopie . . . . .	5
2.1.2	Ionendetektierte stimulierte Ramanspektroskopie (IDSRS) . . .	7
2.1.3	Fluoreszenzdetektierte stimulierte Ramanspektroskopie (FDSRS)	9
2.1.4	Kohärente anti-Stokes Ramanspektroskopie (CARS) . . . . .	9
2.1.5	Lineare, spontane Ramanstreuung . . . . .	11
2.2	Streugeometrie . . . . .	13
2.3	Bestimmung der Rotationstemperatur . . . . .	16
2.4	Quantenmechanische Rechnungen . . . . .	18
2.4.1	Berechnung des Streuquerschnitts . . . . .	18
2.5	Davydov Aufspaltung . . . . .	21
<b>3</b>	<b>Experimentelles</b>	<b>27</b>
3.1	Raman-Jet-Spektrometer . . . . .	27
3.1.1	Anregungslaser . . . . .	28
3.1.2	Sammeloptik und Raman-Spektrometer . . . . .	30
3.2	Synchronisation und Datenaufnahme . . . . .	34
3.3	Bearbeitung der Rohdaten . . . . .	35
3.3.1	Bedienung von SpecTool . . . . .	36
3.3.2	Kalibrierung der Spektren . . . . .	39
3.4	Charakterisierung der Expansion . . . . .	40
3.5	Erstellung der Gasmischungen . . . . .	43

3.6	Chemikalien und Gase . . . . .	45
<b>4</b>	<b>Wasser</b>	<b>47</b>
4.1	Experimentelle Ergebnisse . . . . .	47
4.2	Diskussion . . . . .	48
<b>5</b>	<b>Alkohole</b>	<b>53</b>
5.1	Methanol . . . . .	53
5.1.1	Quantenmechanische Rechnungen . . . . .	54
5.1.2	Experimentelle Ergebnisse . . . . .	54
5.1.3	Diskussion . . . . .	65
5.2	Ethanol . . . . .	76
5.2.1	Experimentelle Ergebnisse . . . . .	76
5.2.2	Quantenmechanische Rechnungen . . . . .	77
5.2.3	Diskussion . . . . .	79
5.3	<i>iso</i> -Propanol . . . . .	80
5.3.1	Experimentelle Ergebnisse . . . . .	80
5.3.2	Diskussion . . . . .	81
5.4	<i>tert</i> -Butanol . . . . .	83
5.4.1	Experimentelle Ergebnisse . . . . .	83
5.4.2	Diskussion . . . . .	84
5.5	2,2,2-Trifluorethanol . . . . .	87
5.5.1	Experimentelle Ergebnisse . . . . .	88
5.5.2	Diskussion . . . . .	90
5.6	2,2,2-Trichlorethanol . . . . .	91
5.6.1	Experimentelle Ergebnisse . . . . .	91
5.6.2	Diskussion . . . . .	93
5.7	<i>n</i> -Alkohole . . . . .	94
5.7.1	Experimentelle Ergebnisse . . . . .	94
5.7.2	Diskussion . . . . .	97
<b>6</b>	<b>Pyrrrol</b>	<b>101</b>
6.1	Experimentelle Ergebnisse . . . . .	101

6.2	Diskussion . . . . .	104
<b>7</b>	<b>Carbonsäuren</b>	<b>107</b>
7.1	Ameisensäuredimer . . . . .	107
7.1.1	Quantenmechanische Rechnungen . . . . .	108
7.1.2	Experimentelle Ergebnisse . . . . .	110
7.1.3	Diskussion . . . . .	121
7.2	Essigsäuredimere . . . . .	139
7.2.1	Experimentelle Ergebnisse . . . . .	140
7.2.2	Diskussion . . . . .	144
<b>8</b>	<b>Oxime</b>	<b>147</b>
8.1	Acetoxim . . . . .	147
8.1.1	Experimentelle Ergebnisse . . . . .	148
8.1.2	Diskussion . . . . .	150
8.2	Acetaldoxim . . . . .	151
8.2.1	Experimentelle Ergebnisse . . . . .	151
8.2.2	Diskussion . . . . .	152
<b>9</b>	<b><math>\alpha</math>-Hydroxymethylester</b>	<b>155</b>
9.1	Methylglykolat . . . . .	156
9.1.1	Experimentelle Ergebnisse . . . . .	156
9.1.2	Diskussion . . . . .	157
9.2	Methyl- $\alpha$ -Hydroxy- <i>iso</i> -Butyrat . . . . .	161
9.2.1	Experimentelle Ergebnisse . . . . .	161
9.2.2	Diskussion . . . . .	162
9.3	Methylaktat . . . . .	163
9.3.1	Experimentelle Ergebnisse . . . . .	164
9.3.2	Diskussion . . . . .	166
<b>10</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>173</b>
<b>A</b>	<b>AndorBasic Skripte</b>	<b>181</b>
A.1	Messprogramm für Jetmessungen . . . . .	181

A.2 Messprogramm für Gasphasenmessungen . . . . .	183
<b>B Literaturverzeichnis</b>	<b>187</b>