

## Corinna Emmeluth (Autor)

## Donor-/ Akzeptorisomerie in wasserstoffbrückengebundenen Dimeren

wasse	Donor-/Akzeptorisomerie in erstoffbrückengebundenen Dimeren	_
		_
	Cuvillier Verlag Göttingen	

https://cuvillier.de/de/shop/publications/2574

## Copyright:

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

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

## Inhaltsverzeichnis

Ei	$\mathbf{nleit}$	ung	⁄ii							
1	Exp	Experimentelles								
	1.1	Ragout-Jet-FTIR-Spektrometer	1							
		1.1.1 Aufbau	1							
		1.1.2 Erstellung von Mischungen	3							
		1.1.3 Konzentrationsbestimmung	4							
	1.2	Einkopplung des CO <sub>2</sub> -Lasers	5							
		1.2.1 Aufbau	5							
		1.2.2 Düsenvergleich	8							
		1.2.3 Expansionen mit $SF_6$	9							
2	Essigsäure-Essigsäuremethylester 15									
	2.1	Quantenmechanische Rechnungen	17							
	2.2		19							
	2.3	Diskussion	27							
3	Ethanoldimere 31									
	3.1	Quantenmechanische Rechnungen	31							
	3.2	Experimentelle Ergebnisse	40							
	3.3	Zusammenfassung	43							
4	Quantenmechanische Rechnungen 45									
	4.1	Stabilität und Struktur	45							
		4.1.1 Aliphatische Alkohole	45							
		4.1.2 Aromatische Alkohole	50							
		4.1.3 Aliphatische + aromatische Alkohole	56							
	4.2	-	60							
	4.3	Der Donor-/Akzeptoraustausch	66							

5	Gen	${f nischt}$	e Expansionen	<b>71</b>				
	5.1	Vorüb	perlegungen	. 71				
	5.2	Alipha	atische + Aliphatische Alkohole	74				
		5.2.1	Methanol/d- $Methanol$	74				
		5.2.2	Methanol/Ethanol	. 79				
		5.2.3	Methanol/tert-Butanol	82				
	5.3	Aroma	atische Alkohole	85				
		5.3.1	Phenol/ortho-Kresol	85				
		5.3.2	Phenol/para-Kresol	. 88				
		5.3.3	ortho-Kresol/ $para$ -Kresol					
	5.4	Alipha	$atische + aromatische Alkohole \dots \dots \dots \dots \dots$	92				
		5.4.1	Methanol/Phenol	92				
		5.4.2	Ethanol/Phenol	92				
		5.4.3	tert-Butanol/Phenol	96				
		5.4.4	Trimethylsilanol/Phenol	98				
		5.4.5	Methanol/ortho-Kresol	100				
		5.4.6	Methanol/para-Kresol	102				
6	Diskussion 10							
7	Zusammenfassung 11							
$\mathbf{A}$	Dateienverzeichnis 1							
В	B Unkorrigierte harmonische Wellenzahlen							
$_{ m Li}$	Literaturverzeichnis							
Lε	Lebenslauf							