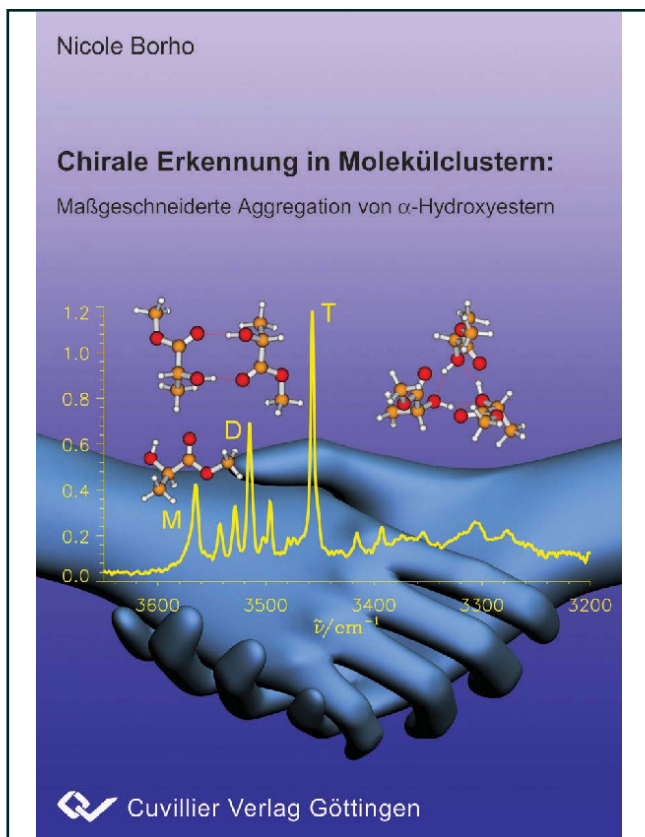




Nicole Borho (Autor)

Chirale Erkennung in Molekülclustern:

Maßgeschneiderte Aggregation von α -Hydroxyestern



<https://cuvillier.de/de/shop/publications/2684>

Copyright:

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

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

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung	xi
Einleitung	xiii
1 Grundlagen	1
1.1 FTIR-Spektroskopie	1
1.2 Überschallexpansion	6
1.3 Wechselwirkungen zwischen chiralen Molekülen	8
1.4 Quantenchemische Rechnungen	11
2 Experimentelles	13
2.1 Das Filet-Jet Cluster-Spektrometer	14
2.1.1 600 mm Schlitzdüse	14
2.1.2 Jetkammer	18
2.1.3 Probenzufuhr	19
2.1.4 Reservoir	19
2.1.5 Puffervolumen	20
2.1.6 Pumpkapazität	21
2.1.7 FTIR-Spektrometer Equinox 55	22
2.1.8 Detektorkammer	22
2.2 Synchronisation und Datenaufnahme	23
2.3 Charakterisierung der Expansion	26
2.3.1 Durchflussrate	26
2.3.2 Druckprofil	27
2.4 Vergleich von Filet- und Ragout-Jet	32
2.5 Konzentrationsbestimmung	34
2.6 Abschätzung der Teilchenanzahldichte	34
2.7 Probenpräparation	35
3 Milchsäuremethylester	37
3.1 Experimentelle Ergebnisse	38
3.1.1 Das Reinenantiomer	38

3.1.2	Die racemische Mischung	43
3.1.3	Differenzanalyse der Spektren	46
3.1.4	Der C=O- und der C-O-Bereich	51
3.1.5	Argon-Beimischung	53
3.1.6	Milchsäuremethylester in verschiedenen Aggregat- zuständen	55
3.2	Cluster-Geometrien	56
3.2.1	Monomer	56
3.2.2	Dimere	57
3.2.2.1	Topologie der Wasserstoffbrückenbindungen	58
3.2.2.2	Isomerie der 8-Ringe	60
3.2.2.3	Isomerie der 5-Ringe	62
3.2.2.4	Assoziativ gebundene Dimere	65
3.2.2.5	Stabilität der selektierten MLac-Dimere	66
3.2.2.6	Beschreibung der günstigsten MLac Dimere	68
3.2.3	Trimere	70
3.2.3.1	Homochirale Trimere	70
3.2.3.2	Heterochirale Trimere	75
3.2.4	Tetramere	75
3.3	Bandenzuordnung	77
3.4	Diskussion	80
4	Milchsäure-Ethyl-, Isopropyl- und <i>tert</i>-Butyl-Ester	85
4.1	Milchsäureethylester	85
4.2	Milchsäureisopropylester	89
4.3	Milchsäure- <i>tert</i> -Butylester	90
4.4	Vergleich der Milchsäureester	93
5	Achirale α-Hydroxymethylester	97
5.1	Glykolsäuremethylester	97
5.1.1	Die O-H-Streckschwingung	98
5.1.2	Argon-Beimischung	103
5.1.3	Panorama-Spektren von MGly	105
5.2	α -Hydroxyisobuttersäuremethylester	107
5.2.1	Die O-H-Streckschwingung	107
5.2.2	Argon-Beimischung	109
5.3	Clusterisomerie von MGly	110
5.4	Vergleich der α -Hydroxymethylester	114

6	α-Hydroxyketone	119
6.1	Monohydroxyaceton	119
6.2	3-Hydroxy-2-Butanon	121
6.3	3-Hydroxy-3-Methyl-2-Butanon	123
6.4	Vergleich der α -Hydroxyketone	124
7	Gemischte Alkohol-Cluster	129
7.1	UV-IR-Spektroskopie von NapOH-MLac	130
7.2	MLac-Methanol-Cluster	132
7.3	MLac- <i>tert</i> -Butanol-Cluster	138
7.4	MLac-Glycidol-Cluster	139
7.5	Zusammenfassung	141
8	Andere Substanzklassen	145
8.1	1-Methoxy-2-Propanol	145
8.2	β -Hydroxyisobuttersäuremethylester	149
8.3	Ungesättigte chirale Alkohole	151
9	Diskussion	155
9.1	Aggregation von Milchsäuremethylester	155
9.2	Molekulare Erkennung in α -Hydroxyestern	160
10	Ausblick	163
10.1	Das Potenzial des Filet-Jets	163
10.2	Chirale Erkennung	164
A	Optik- und Synchronisations-Parameter	169
A.1	TRS-Methode	170
A.2	Macro	171
A.2.1	Macro Jet_8: Aufnahme der Spektren	171
A.2.2	Macro Jet_calc10neu: Berechnung der gemittelten Absorptionsspektren	173
B	Geometrien der MLac-Cluster	175
	Literaturverzeichnis	178