

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Grundlagen	3
2.1. Spektrometertypen	3
2.2. FTIR-Spektroskopie	3
2.3. Überschallexpansionen	6
2.4. Clusterbildung und Wasserstoffbrücken	9
2.5. Quantenchemische Rechnungen	10
3. Experimentelles	13
3.1. Synthese	13
3.1.1. Prolin	13
3.1.1.1. (<i>S</i>)-Prolinmethylester, (<i>R</i>)-Prolinmethylester . . .	13
3.1.1.2. (<i>S</i>)-Prolinethylester, (<i>R</i>)-Prolinethylester	14
3.2. Chemikalien	15
3.3. Versuchsaufbau	15
3.3.1. Filet-Jet-Apparatur	15
3.3.2. Konzentrationsbestimmung	18
3.3.2.1. Vergleich mit Gasphasenspektren bekannter Kon-	
zentration	18
3.3.2.2. Vergleich mit quantenchemischen Rechnungen . . .	20
3.3.2.3. Bestimmung aus dem Dampfdruck	20
4. CH-Chromophore in Wasserstoffbrücken	23
4.1. Halothan	23
4.1.1. Halothan und Dimethylether (DME)	27
4.1.2. Halothan und Tetrahydrofuran (THF)	28
4.1.3. Halothan und Aceton	30
4.1.4. Halothan und Ammoniak	32
4.1.5. Halothan und Benzol	34
4.2. Sevofluran und Benzol	37
4.3. Chloroform und Ammoniak	43
4.4. Zusammenfassung: CH-Chromophore	48
5. NH-Chromophore in Wasserstoffbrücken	51

5.1.	Prolinester und ihre aromatischen Homologen	51
5.1.1.	Experimentelle Ergebnisse: Prolinester	52
5.1.2.	Quantenchemische Rechnungen: Prolinester	59
5.1.3.	Methyl-1H-Pyrrol-2-Carboxylat (MPC)	69
5.2.	Prolinol	75
5.3.	Pyrrol und Pyrrolidin	78
5.3.1.	Experimentelle Ergebnisse: Pyrrolidin	78
5.3.2.	Quantenchemische Rechnungen: Pyrrolidin	85
5.3.3.	Experimentelle Ergebnisse: Mischungen von Pyrrolidin und Pyrrol	99
5.3.4.	Quantenchemische Rechnungen: Mischungen von Pyrrolidin und Pyrrol	102
5.4.	Anilin	109
5.4.1.	Experimentelle Ergebnisse	109
5.4.2.	Quantenchemische Rechnungen	111
5.5.	Zusammenfassung: NH-Chromophore	114
6.	Carbonylgruppen in Wasserstoffbrücken	115
6.1.	Ester und Laktone	115
6.1.1.	Nomenklatur	115
6.1.2.	Methylacetat (1E1) und Kohlenstoffdioxid	117
6.1.2.1.	Experimentelle Ergebnisse	117
6.1.2.2.	Quantenchemische Rechnungen	131
6.1.3.	γ -Butyrolakton und verwandte Substanzen	135
6.1.3.1.	γ -Butyrolakton (3L): Experimentelle Ergebnisse	137
6.1.3.2.	3L: Quantenchemische Rechnungen	143
6.1.3.3.	Methylpropionat (2E1): Experimentelle Ergebnisse	153
6.1.3.4.	2E1: Quantenchemische Rechnungen	156
6.1.3.5.	Cyclopentanon (4K): Experimentelle Ergebnisse	165
6.1.3.6.	4K: Quantenchemische Rechnungen	170
6.1.3.7.	Ethylencarbonat (2C): Quantenchemische Rech- nungen	175
6.1.3.8.	Zusammenfassung: 3L und verwandte Substanzen	180
6.2.	Hydroxycarbonylverbindungen	184
6.2.1.	Hydroxyacetone (HA)	184
6.2.1.1.	HA: Experimentelle Ergebnisse	184
6.2.1.2.	HA: Quantenchemische Rechnungen	190
6.2.2.	4-Hydroxy-2-Butanon (4HB)	198
6.2.2.1.	4HB: Experimentelle Ergebnisse	198
6.2.2.2.	4HB: Quantenchemische Rechnungen	202
6.2.3.	Methoxyacetone (MA)	210
6.2.4.	Methylaktat (Mlac)	214

6.2.4.1. Mlac: Experimentelle Ergebnisse	214
6.2.4.2. Mlac: Quantenchemische Rechnungen	226
6.2.5. Zusammenfassung: Hydroxycarbonylverbindungen	244
7. Zusammenfassung und Ausblick	249
A. Optikparameter	I
Literaturverzeichnis	V