



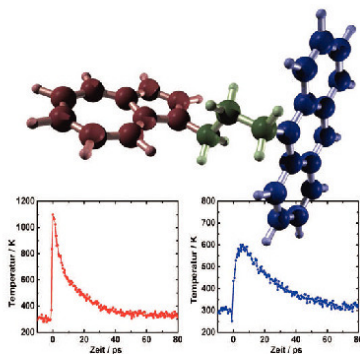
Peter Kutne (Autor)  
**Zeitaufgelöste Untersuchungen zum  
intramolekularen Schwingungsenergiefluss durch  
molekulare Ketten**

Peter Kutne

---

Zeitaufgelöste Untersuchungen zum  
intramolekularen  
Schwingungsenergiefluss durch  
molekulare Ketten

---



Cuvillier Verlag Göttingen

<https://cuvillier.de/de/shop/publications/3243>

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>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>iii</b>
<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>v</b>
<b>1 Einleitung</b>	<b>3</b>
<b>2 Untersuchte Substanzen</b>	<b>7</b>
2.1 Photophysikalische Eigenschaften der Chromophore . . . . .	8
2.2 Die Substanzgruppen . . . . .	10
2.2.1 Derivate mit einer Kette aus 7 Bindungen . . . . .	10
2.2.2 Derivate mit einer Kette aus 4 Bindungen . . . . .	11
2.2.3 Derivat mit einer Kette aus 2 Bindungen . . . . .	13
2.2.4 Derivat mit einer Kette aus einer Bindung . . . . .	13
2.2.5 Derivate ohne zweites Chromophor . . . . .	15
2.3 Strukturen im Grundzustand . . . . .	16
<b>3 Theoretische Grundlagen</b>	<b>21</b>
3.1 Intermolekularer Energietransfer . . . . .	21
3.2 Intramolekulare Schwingungsenergieumverteilung (IVR) . . . . .	24
3.2.1 IVR im Bild der „zeroth order states“ . . . . .	25
3.2.2 Modelle für IVR-Prozesse . . . . .	28
3.2.3 Der Schweratom-Effekt . . . . .	30
3.3 Ein einfaches Wärmeleitungsmodell . . . . .	32
3.3.1 Berücksichtigung der Wärmekapazität der Kette . . . . .	36
3.3.2 Berücksichtigung der Wärmeleitung in der Kette . . . . .	39
3.4 Wärmeleitung im Phononenbild . . . . .	42
3.5 Die Methode der Transienten Absorption . . . . .	46
3.5.1 Eichung anhand thermisch heißer Spektren für Azulen . . . . .	48
3.5.2 Eichung anhand thermisch heißer Spektren für Anthrazen . . . . .	51
<b>4 Experimenteller Teil</b>	<b>53</b>
4.1 Übersicht . . . . .	53
4.2 Optischer Aufbau . . . . .	53

4.2.1	Der Laseroszillator . . . . .	54
4.2.2	Der Stretcher . . . . .	54
4.2.3	Der regenerative Verstärker . . . . .	56
4.2.4	Der Kompressor . . . . .	58
4.2.5	Der nichtkollineare optisch-parametrische Verstärker . . . . .	59
4.2.6	Das Pump-Probe-Spektrometer . . . . .	61
4.3	Die Hochdruckanlage . . . . .	64
4.3.1	Die Hochdruckzelle . . . . .	65
4.3.2	Die Hochdruckerzeugung . . . . .	66
4.3.3	Die Messzelle für flüssige Lösungsmittel . . . . .	67
4.4	Synchronisation des Experiments . . . . .	67
4.5	Die Signalverarbeitung . . . . .	68
4.6	Messung der temperaturabhängigen Spektren von Anthrazen . . . . .	69
4.7	Verwendete Lösungsmittel . . . . .	70
<b>5</b>	<b>Auswertung</b>	<b>71</b>
5.1	Berücksichtigung der Inneren Konversion und der Zeitauflösung . . . . .	71
5.2	Berechnung der mittleren Schwingungsenergie . . . . .	72
5.3	Berücksichtigung der solvatochromen Verschiebung . . . . .	74
5.3.1	Lösungsmittelabhängigkeit der solvatochromen Verschiebung . . . . .	74
5.3.2	Dichteabhängigkeit der solvatochromen Verschiebung . . . . .	75
5.4	Das Auswertungsverfahren . . . . .	76
5.4.1	Berechnung des Wärmeleitungsmodells . . . . .	76
5.4.2	Die biexponentielle Anpassung . . . . .	76
<b>6</b>	<b>Ergebnisse</b>	<b>79</b>
6.1	Bestimmung der Energietransferparameter . . . . .	81
6.1.1	Auswertung der Signale . . . . .	81
6.1.2	Der harmonische Anteil am Energiefluss . . . . .	84
6.1.3	Auswertung mit harmonischem Anteil . . . . .	87
6.2	Der Einfluss der Kettenlänge . . . . .	91
6.3	Der Einfluss von Heteroatomen in der Brücke . . . . .	95
6.4	Intermolekularer Schwingungsenergie transfer ins Lösungsmittel . . . . .	96
<b>7</b>	<b>Diskussion</b>	<b>99</b>
7.1	Der harmonische Anteil am Energiefluss . . . . .	99
7.2	Die intramolekulare Schwingungsenergieumverteilung . . . . .	100
7.3	Der Einfluss von Heteroatomen . . . . .	103
7.4	Der Intermolekulare Schwingungsenergie transfer (VET) . . . . .	103
7.5	Ausblick . . . . .	105
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>107</b>