

**Aggregation kleiner Moleküle in  
kryogenen Matrizes**

genehmigte

**Dissertation**

zur Erlangung des Doktorgrades

der Fakultät für Chemie

der Ruhr-Universität Bochum

vorgelegt von

**Marcus Gantenberg**

aus Essen

**Bochum 2003**



Teilergebnisse dieser Arbeit wurden in folgenden Beiträgen bereits veröffentlicht:

**Paper:**

Dimerization of Formic Acid – an Example of a "Non-covalent" Reaction Mechanism;  
Marcus Gantenberg, Martin Halupka, Wolfram Sander; Chem. Eur. J. 2000, 6, 1865-1869

Aggregation Studies on Carboxylic Acids and Amides in Cryogenic Matrices;

Marcus Gantenberg, Wolfram Sander; *in Vorbereitung*

A Matrix Isolation and Computational Study of the Aggregation of Acetylene with Acetone;

Marcus Gantenberg, Wolfram Sander; *in Vorbereitung*

**Poster:**

„Die Dimerisierung von Ameisensäure – Ein Beispiel für einen nicht-kovalenten Reaktionsmechanismus“; Marcus Gantenberg, Martin Halupka, Wolfram Sander; Symposium des Sonderforschungsbereichs 452 der Deutschen Forschungsgemeinschaft; Essen 1999

„Die Aggregation kleiner Moleküle in kryogenen Matrices“; Marcus Gantenberg, Wolfram Sander; Symposium des Sonderforschungsbereichs 452 der Deutschen Forschungsgemeinschaft; Bochum 2000

„Aggregation kleiner Moleküle in kryogenen Matrices“; Marcus Gantenberg, Lisa George, Wolfram Sander; Symposium des Sonderforschungsbereichs 452 der Deutschen Forschungsgemeinschaft, Essen 2001

„Aggregation von Carbonsäurederivaten in Tieftemperaturmatrices“; Marcus Gantenberg, Lisa George, Wolfram Sander; Symposium „Molekulare Erkennung“ des Sonderforschungsbereichs 452 der deutschen Forschungsgemeinschaft, Essen 2002



Die dieser Arbeit zugrunde liegenden Experimente sind in der Zeit von September 1999 bis August 2002 unter der Leitung von Herrn Prof. Dr. W. Sander am Lehrstuhl für Organische Chemie II der Ruhr-Universität Bochum im Rahmen des SFB 452, Projekt A1, durchgeführt worden.

Herrn Prof. Dr. W. Sander danke ich für das interessante und abwechslungsreiche Thema sowie die Bereitstellung aller dafür notwendigen Materialien und Geräte. Darüber hinaus möchte ich mich bei meinem Doktorvater für seine Diskussionsbereitschaft und seine unkomplizierte Art bedanken, mit der er experimentelle und theoretische Schwierigkeiten zu bewältigen half.

Erster Referent:	Prof. Dr. W. Sander
Zweiter Referent:	Prof. Dr. M. Feigel
Dritter Prüfer:	Prof. Dr. M. Havenith-Newen
Dissertation eingereicht am:	05.09.2003
Disputation am:	10.11.2003



Für meiner Mutter,  
meine Oma,  
Margret und Rolf.

*When I examine myself and my methods of thought,  
I come to the conclusion that the gift of fantasy has  
meant more to me than my talent for absorbing positive  
knowledge.*

(Albert Einstein)

*If you wish to understand the fragrance of the rose,  
Or the tenacity of the oak;  
If you are not satisfied until you know the secret paths  
By which the sunshine and the air achieve these wonders;  
If you wish to see the pattern which underlines one large field of  
Human experience and human measurement,  
Then take up chemistry*

(C. A. Coulson, 1973)



---

1	Zusammenfassung.....	1
1.1	Carbonsäuren und Amide.....	1
1.2	Mischsysteme.....	3
2	Einleitung und Problemstellung.....	5
2.1	Modellsysteme.....	7
3	Grundlagen.....	9
3.1	Wasserstoffbrückenbindungen.....	9
3.1.1	Historie.....	9
3.1.2	Theorie.....	9
3.1.3	Anti-Wasserstoffbrückenbindungen.....	12
3.2	Matrixisolationsspektroskopie.....	13
3.2.1	Allgemeines.....	13
3.2.2	Matrixisolation und Wasserstoffbrückenbindungen.....	14
3.2.3	Tempern von Inertgasmatrizes.....	14
3.3	Pulsdeposition.....	17
3.3.1	Pulsparameter.....	20
3.4	Quantenchemische Rechnungen.....	22
3.4.1	Methoden.....	22
3.4.2	BSSE Korrektur.....	24
4	Verbindungen mit hohem Dampfdruck.....	27
4.1	Einführung.....	27
4.2	Essigsäure.....	30
4.2.1	Einführung.....	30
4.2.2	Ergebnisse der Experimente.....	30
4.2.3	Diskussion.....	35
4.3	Furan und 1-Hexin.....	41

---

4.3.1	Einführung.....	41
4.3.2	Ergebnisse der quantenchemischen Betrachtung.....	41
4.3.3	Ergebnisse der Experimente.....	43
4.3.4	Diskussion.....	46
4.4	Aceton und Acetylen.....	50
4.4.1	Einführung.....	50
4.4.2	Ergebnisse der quantenchemischen Betrachtung.....	52
4.4.3	Ergebnisse der Experimente.....	55
4.4.4	Diskussion.....	59
4.5	Fazit.....	66
5	Verbindungen mit mittlerem Dampfdruck.....	67
5.1	Einführung.....	67
5.2	Propionsäure.....	69
5.2.1	Einführung.....	69
5.2.2	Ergebnisse der Experimente.....	69
5.2.3	Diskussion.....	73
5.3	Formamid.....	81
5.3.1	Einführung.....	81
5.3.2	Ergebnisse der Experimente.....	82
5.3.3	Diskussion.....	84
5.4	Fazit.....	89
6	Verbindungen mit niedrigem Dampfdruck.....	91
6.1	Einführung.....	91
6.2	Acetamid.....	92
6.2.1	Einführung.....	92
6.2.2	Ergebnisse der Experimente.....	93

---

6.2.3	Diskussion .....	95
6.3	Benzoessäure .....	99
6.3.1	Einführung.....	99
6.3.2	Ergebnisse der Experimente.....	99
6.3.3	Diskussion .....	103
6.4	Oxalsäure.....	107
6.4.1	Einführung.....	107
6.4.2	Ergebnisse der quantenchemischen Betrachtung .....	108
6.4.3	Ergebnisse der Experimente.....	112
6.4.4	Diskussion .....	115
6.5	Fazit.....	119
7	Ein Vergleich quantenchemischer Rechenmethoden.....	121
7.1	Einleitung .....	121
7.2	Geometrien .....	122
7.3	Energien .....	123
7.4	Schwingungsspektren.....	123
7.5	Rechenaufwand .....	128
7.6	Fazit.....	128
8	Fazit und Ausblick .....	131
8.1	Experimentelle Methoden .....	131
8.2	Untersuchte Substanzen .....	132
8.3	Weiterführende Untersuchungen.....	132
9	Allgemeine Arbeitsmethoden.....	135
9.1	Matrixisolationsspektroskopie .....	135
9.1.1	Aufbau der Matrixapparatur.....	135
9.1.2	Depositionsbedingungen .....	136

---

9.1.3	IR-Spektroskopie.....	136
9.2	Quantenchemische Rechnungen .....	137
9.3	Probenpräparation .....	138
10	Anhang .....	139
10.1	Quantenchemische Rechnungen .....	139
10.1.1	Carbonsäuren.....	139
10.1.2	Amide .....	322
10.1.3	Mischsysteme .....	383
10.2	Skripte .....	472
11	Literatur.....	491
	Danksagung.....	501

# 1 Zusammenfassung

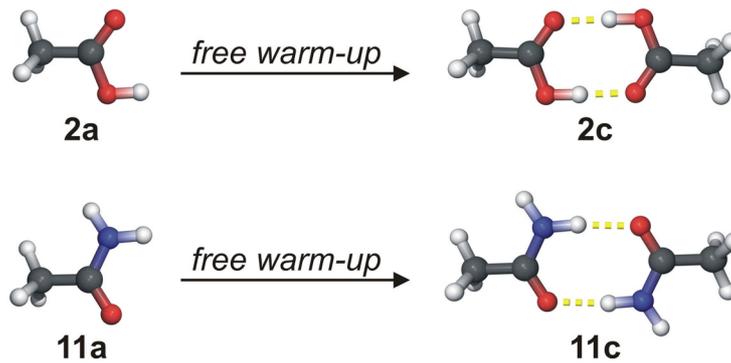
Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Bildung wasserstoffverbrückter Aggregate in Inertgasmatrizes untersucht. Die Bandbreite der untersuchten Substanzen reicht von leichtflüchtigen, wie Essigsäure **2**, bis hin zu schwerflüchtigen, wie Benzoesäure **12**. Da es keine Depositionsmethode gibt, die für leicht- wie schwerflüchtige Substanzen geeignet ist, kamen verschiedene, für das jeweilige System am besten geeignete Depositionsmethoden zum Einsatz. Jede dieser Methoden hat sowohl Vor- als auch Nachteile, welche hier einander gegenübergestellt werden.

Neben Einkomponentensystemen wie den oben genannten Carbonsäuren wurden auch Zweikomponentensysteme untersucht. Hierbei ist zu unterscheiden zwischen einem System, bei dem nur die gemischte Aggregation möglich ist, zum Beispiel Furan **3** und 1-Hexin **4**, und einem System, bei dem zusätzlich die Selbstaggregation einer Komponente erfolgt, beispielsweise Acetylen **6** und Aceton **7**.

Bei allen untersuchten Molekülen war es möglich, Matrizes zu erzeugen, die überwiegend nur Monomere enthielten. Zur Untersuchung der Aggregation wurden diese Matrizes in einem *free warm-up* Prozess getempert, wobei die Veränderungen in der Matrix IR-spektroskopisch verfolgt wurden.

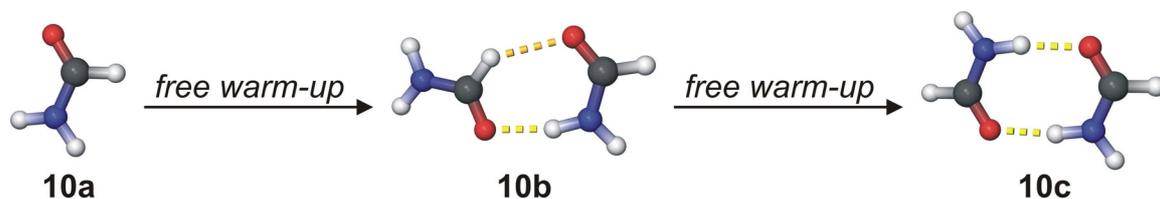
## 1.1 Carbonsäuren und Amide

Bei allen untersuchten Carbonsäuren (Essigsäure **2**, Propionsäure **9**, Benzoesäure **12** und Oxalsäure **13**) und Amidin (Formamid **10** und Acetamid **11**) wurde die Bildung eines cyclischen Dimers mit zwei Wasserstoffbrücken beobachtet, wie in Abbildung 1.1 beispielhaft dargestellt.



**Abbildung 1.1:** Bildung eines cyclischen Dimers aus dem jeweiligen Monomer am Beispiel von Essigsäure **2** und Acetamid **11**.

Allein beim Formamid konnte das intermediäre Auftreten eines einfach verbrückten Dimers **10b** als Zwischenstufe zur Bildung des cyclischen Dimers **10c** IR-spektroskopisch beobachtet werden (Abbildung 1.2). Ein analoges offenkettiges Dimer wurde bereits bei der Aggregation der Ameisensäure **1** nachgewiesen.<sup>[1]</sup>

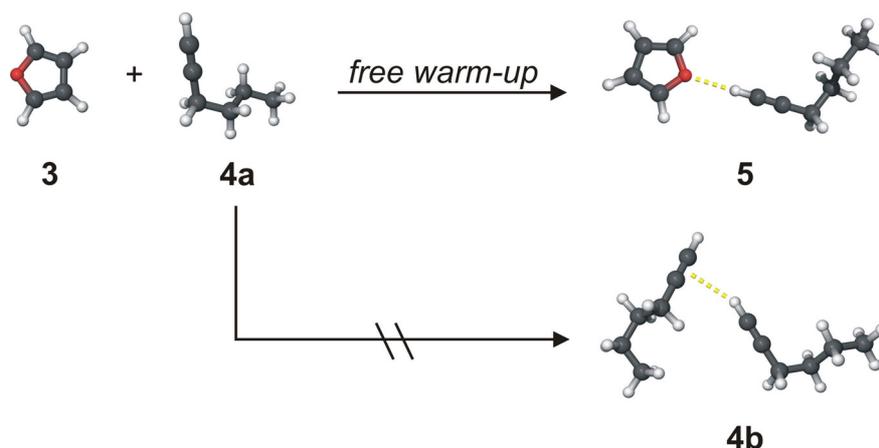


**Abbildung 1.2:** Die Aggregation des Formamids in einer Argon-Matrix. Bei der Bildung des cyclischen Dimers **10c** aus dem Monomer **10a** konnte intermediär ein offenkettiges Dimer **10b** beobachtet werden.

Dieser Unterschied bei der Beobachtbarkeit der offenkettigen Zwischenstufe zwischen den kleinsten Vertretern der beiden Substanzklassen und ihren höheren Homologen ist auf die Höhe der Barriere zurückzuführen, die bei der Umlagerung des offenkettigen in das cyclische Dimer überwunden werden muss. Quantenchemische Rechnungen zeigen, dass diese Barriere bei Ameisensäure und Formamid höher ist als bei den anderen untersuchten Verbindungen.

## 1.2 Mischsysteme

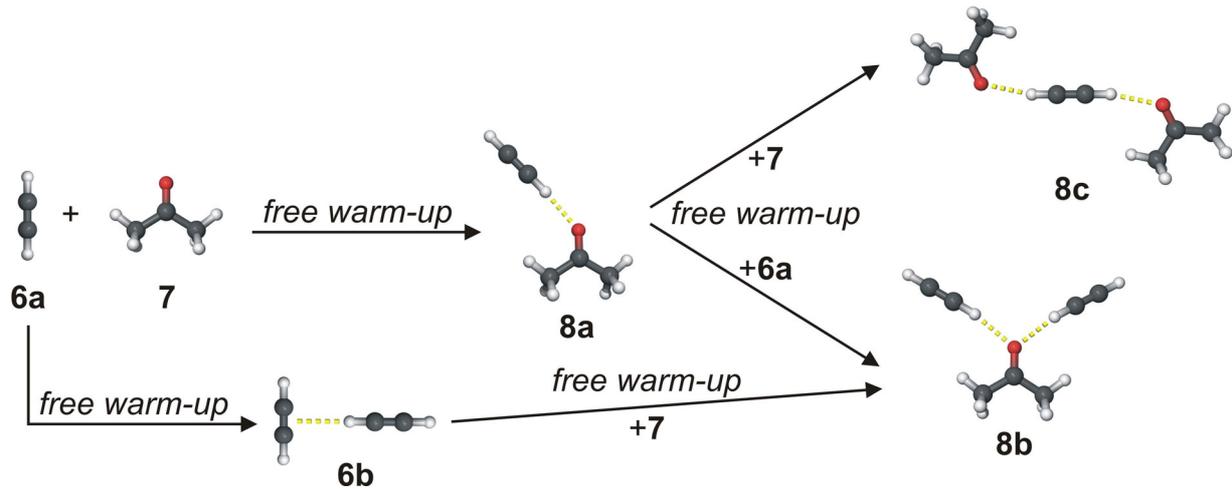
Beim Tempern einer Matrix, die den Wasserstoffbrückenakzeptor Furan **3** und den Wasserstoffbrückendonator 1-Hexin **4a** enthält, wurde die Bildung des gemischten Dimers **5** beobachtet (Abbildung 1.3), obwohl die berechnete Aggregationsenergie mit 0.8 kcal/mol auf dem B3LYP/6-311++G(d,p)-Niveau relativ gering ist.



**Abbildung 1.3:** Die Aggregation von Furan **3** und 1-Hexin **4a** zu einem gemischten Dimer **5** in einer Argon-Matrix. Das T-förmige Dimer **4b** des 1-Hexins wurde nicht beobachtet.

Eine Aggregation der Einzelkomponenten wurde nicht beobachtet, obwohl man für das 1-Hexin ein T-förmiges Dimer **4b** analog zum Acetylen-Dimer **6b** (s.u.) erwarten würde. Dieses ist theoretischen Berechnungen zufolge jedoch energetisch ungünstiger als freie Monomere. Die Berechnung der Aggregationsenergie dieses Dimers auf dem B3LYP/6-311++G(d,p)-Niveau ergab -0.15 kcal/mol.

Wesentlich komplexer gestaltet sich die Aggregation im Mischsystem von Acetylen **6** und Aceton **7**. Für reines Aceton konnte keine Aggregation beobachtet werden, monomeres Acetylen **6a** hingegen bildet beim Tempern ein T-förmiges Dimer **6b** und auch höhere Aggregate. Tempert man ein Gemisch der beiden Komponenten, kann neben der Selbstaggregation des Acetylens auch die Bildung gemischter Aggregate beobachtet werden. Neben dem gemischten Dimer **8a** wurde auch die Bildung von zwei Trimeren **8b** und **8c** beobachtet (Abbildung 1.4).



**Abbildung 1.4:** Aggregationswege im Mischsystem von Acetylen 6 und Aceton 7. Alle Aggregate 8 wurden während des Temperns beobachtet.

Die Strukturen der Trimere stehen in Einklang mit der röntgenspektroskopisch bestimmten Struktur des Cokristalls von Acetylen und Aceton, in der zwei gegenüberliegende Reihen Aceton durch eine zickzackförmige Reihe von Acetylenmolekülen verbunden werden.<sup>[2]</sup>

## 2 Einleitung und Problemstellung

Wasserstoffbrückenbindungen sind Teil unseres täglichen Lebens. Dies beginnt bereits mit einem der kleinsten Wasserstoffbrücken bildenden Moleküle, dem Wasser.<sup>[3]</sup> Ohne dessen ungewöhnliche Eigenschaften würde es überhaupt kein Leben, so wie wir es kennen, geben. Auch in größeren Molekülen spielt die Wasserstoffbrückenbindung eine wichtige, strukturgebende Rolle. Beispiele hierfür sind Polypeptide und Proteine, bei denen die auftretenden Strukturelemente durch Wasserstoffbrückenbindungen hervorgerufen werden. Die bekanntesten Beispiele hierfür sind die  $\alpha$ -Helix und das  $\beta$ -Faltblatt. Eines der wichtigsten Moleküle für das Leben ist sicherlich die Desoxyribonukleinsäure (DNA), die in ihrer doppelsträngigen Form eine  $\alpha$ -Helix bildet. Hier bestimmen Wasserstoffbrücken nicht nur die äußere Struktur, sondern dienen auch der molekularen Erkennung zwischen den Basen der Einzelstränge, was zur Ausbildung der bekannten Watson-Crick Basenpaare<sup>[4]</sup> führt.

Es ist bereits 100 Jahre her, dass das heute als Wasserstoffbrückenbindungen bezeichnete Phänomen das erste Mal in der Fachliteratur erwähnt wurde,<sup>[5]</sup> und vor gut 50 Jahren wurde die Struktur der DNA in der Arbeitsgruppe von Watson und Crick durch Röntgenstrukturanalyse aufgeklärt.

Eines der wichtigsten Instrumente der Strukturaufklärung ist die Röntgenstrukturanalyse, mit der sich Strukturen einwandfrei feststellen lassen. Dies setzt jedoch voraus, dass man einen Einkristall der Verbindung erhalten kann. Diese Einschränkung gilt nicht für die Kernresonanzspektroskopie (NMR), die mit ihren komplexen mehrdimensionalen Methoden ebenfalls gut zur Strukturaufklärung geeignet ist. In beiden Fällen werden jedoch nur vorhandene Wasserstoffbrücken nachgewiesen. Im Fall von Festkörpern sind diese statisch. In Flüssigkeiten hingegen kann man, sofern keine Präorganisation vorliegt, nur das zeitliche Mittel eines permanenten Prozesses von Bildung und Brechung der Wasserstoffbrücken beobachten. Dies ist ein Problem der Zeitauflösung, denn in Flüssigkeiten liegt die Zeit, die zur Bildung oder zum Bruch einer Wasserstoffbrücke benötigt wird, bei etwa  $10^{-12} - 10^{-13}$  Sekunden.<sup>[6]</sup> Setzt man dies in Relation zu einer der modernsten spektroskopischen Messmethoden, der Step/Scan-Technik,<sup>[7]</sup> welche mit einer Zeitauflösung von wenigen Nanosekunden Spektren aus dem mittleren Infrarot liefert, so ist man immer noch vier bis fünf Zehnerpotenzen zu langsam. Diese Methode ist aber geeignet, konformationelle Änderungen in größeren Molekülen, die der Ausbildung einer oder mehrerer Wasserstoffbrücken vorangehen, zu untersuchen.

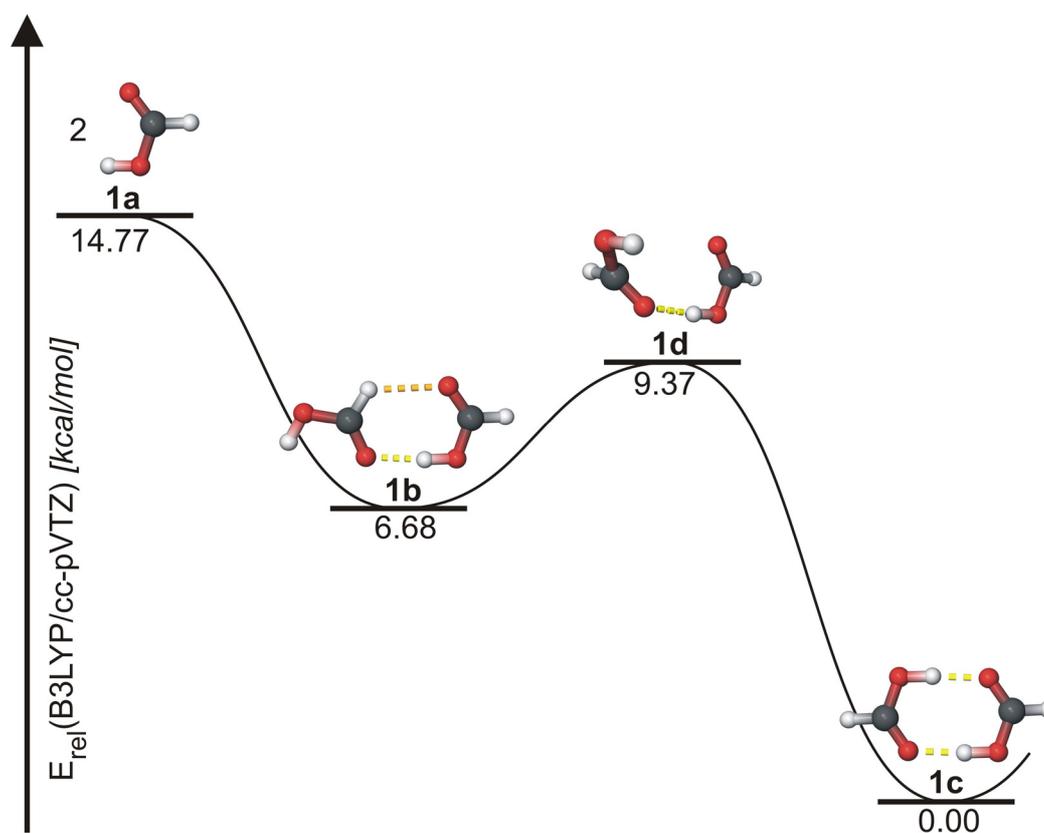
Sind die vorhandenen Messmethoden nicht schnell genug, um einen bestimmten Prozess zu beobachten, so besteht die Alternative in einer künstlichen Verlangsamung dieses Prozesses, wodurch ihre Beobachtung möglich wird. Eine gute Möglichkeit hierzu bietet die Matrixisolationstechnik,<sup>[8-12]</sup> bei der reaktive Moleküle und Intermediate in einer Inertgasmatrix bei tiefen Temperaturen ausgefroren werden. Und letztendlich sind auch die Donoren und Akzeptoren von Wasserstoffbrückenbindungen als reaktive Moleküle zu betrachten, wenn auch nicht im klassischen Sinn wie Radikale oder Carbene.

Die Matrixisolationstechnik hat aber auch Nachteile. Das Grundproblem besteht darin, die zu untersuchende Substanz unbeschädigt an den Ort zu bringen, an dem sie in dem festen Inertgas isoliert und spektroskopisch untersucht werden kann. Als einfache Faustregel kann man sagen, dass mit zunehmender Molekülgröße auch zunehmend höhere Temperaturen benötigt werden, was wiederum der Unversehrtheit der Moleküle abträglich ist. Daher bietet es sich an, anstelle von Polypeptiden oder Ähnlichem auf kleinere Modellsysteme zurückzugreifen, die im Sinne der Matrixisolationstechnik einfacher handhabbar sind. Dies bringt noch einen weiteren Vorteil mit sich. Eine der am häufigsten in Kombination mit der Matrixisolationstechnik verwendeten spektroskopischen Methoden ist die IR-Spektroskopie, welche auch sehr gut für die Untersuchung von Wasserstoffbrückenbindungen geeignet ist. Insbesondere bei kleinen Molekülen können quantenchemische Rechnungen in einem vertretbaren Zeitrahmen auf so hohem Niveau ausgeführt werden, dass auch Wasserstoffbrückenbindungen adäquat berücksichtigt werden. Aus diesen Rechnungen erhält man theoretische IR-Spektren, die bei deutlicher Übereinstimmung mit einem experimentell erhaltenen Spektrum als Beweis für das Vorhandensein eines entsprechenden Aggregates angesehen werden. Durch den Vergleich der berechneten relativen Energien der Monomere und Dimere kann man ferner Aussagen über die Energetik der Aggregation bzw. die Stärke der gebildeten Wasserstoffbrückenbindung treffen.

Das angestrebte Ziel ist es daher, die ausgesuchten Substanzen als reine Monomere in einer Inertgasmatrix zu isolieren, diese Matrix dann langsam zu erwärmen und die dabei ablaufenden Aggregationen zu beobachten. Um die hierbei auftretenden Aggregate zu identifizieren ist ferner die Matrixisolation reiner dimerer Spezies erstrebenswert.

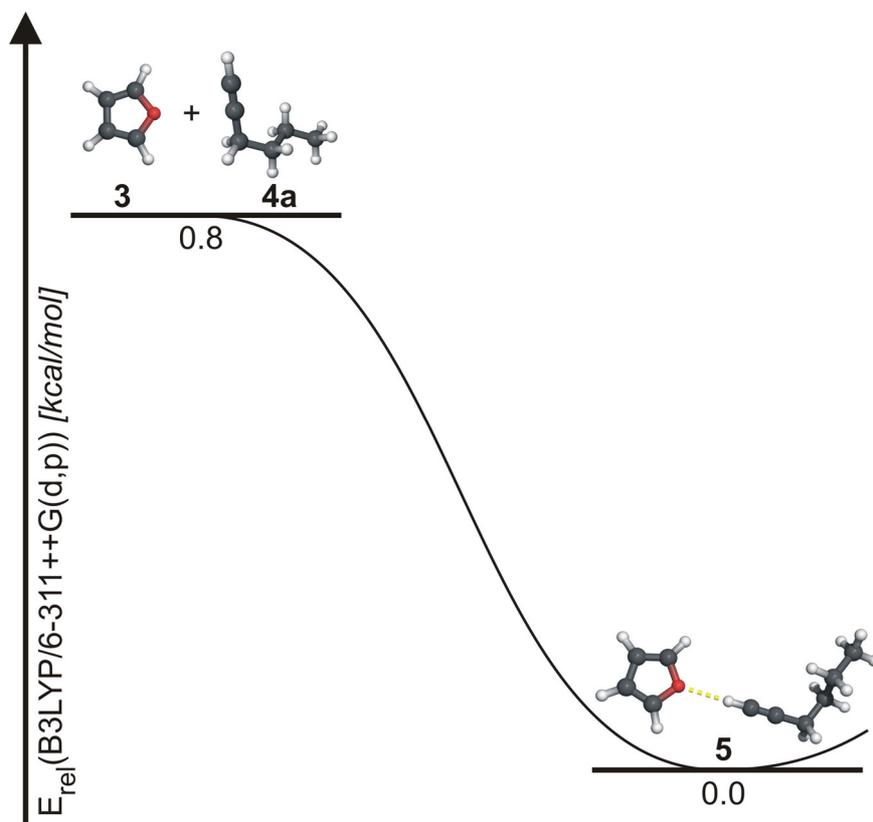
## 2.1 Modellsysteme

Die zu untersuchenden Modellsysteme sollten verschiedene Arten und Stärken von Wasserstoffbrückenbindungen abdecken (z.B. O-H...O, N-H...O, C-H...O). Einen guten Einstieg bieten Moleküle, die sowohl als Donor als auch als Akzeptor von Wasserstoffbrücken fungieren und somit mit sich selbst Aggregate bilden können. Hierzu zählen Carbonsäuren und Amide, deren Wasserstoffbrückenbindungen relativ stark sind (s. Abbildung 2.1). Im Rahmen meiner Diplomarbeit wurde bereits die Aggregation der Ameisensäure **1** in Inertgasmatrizes untersucht.<sup>[1, 13]</sup>



**Abbildung 2.1:** Energetik der Aggregation von Ameisensäure **1** berechnet auf dem B3LYP/cc-pVTZ Niveau, alle Energien inkl. ZPE.

Will man Systeme mit zwei verschiedenen Komponenten untersuchen, so empfiehlt es sich zunächst, diese so zu wählen, dass eine Komponente ausschließlich als Akzeptor, die andere ausschließlich als Donor fungieren kann. Gute Kandidaten für Akzeptoren sind Ketone und Ether, als Donoren eignen sich terminale Alkine. Wasserstoffbrücken dieser Art sind, verglichen mit denen von Carbonsäuren, sehr schwach (s. Abbildung 2.2).



**Abbildung 2.2:** Energetik der Aggregation von Furan **3** und 1-Hexin **4a** berechnet auf dem B3LYP/6-311++G(d,p) Niveau, alle Energien inkl. ZPE.

## 3 Grundlagen

### 3.1 Wasserstoffbrückenbindungen

#### 3.1.1 Historie

Der heute im deutschen Sprachraum gebräuchliche Name Wasserstoffbrückenbindung<sup>[14]</sup> setzt sich aus dem erstmals 1935 von Bernal und Megaw<sup>[15]</sup> benutzten Terminus „hydrogen bond“ und der 1936 von Huggins<sup>[16, 17]</sup> verwendeten Bezeichnung „hydrogen bridge“ zusammen, wobei sich im angelsächsischen Sprachraum der erstgenannte Begriff durchgesetzt hat.

Diese Art nicht-kovalenter Wechselwirkungen ist schon wesentlich länger bekannt. So beschrieb Werner<sup>[18]</sup> bereits 1902 eine nicht-kovalente Wechselwirkung des Typs  $X(H \cdots NH_3)$  und bezeichnete sie als „Nebervalenz“. Das Vorhandensein einer Wasserstoffbrückenbindung dieser Art wurde beispielsweise 1986 von Herbine<sup>[19]</sup> mittels Mikrowellen-Spektroskopie für den Ammoniak-Wasser-Komplex bestätigt. Allgemeine Anerkennung erhielt der Begriff der Wasserstoffbrückenbindung 1939 mit Linus Paulings Kapitel „Hydrogen Bonding“ in der ersten Auflage von „The Nature of the Chemical Bond“.<sup>[20]</sup>

Die Erkenntnis, dass die Wasserstoffbrückenbindung eine sehr wichtige Rolle für das Leben als solches spielt, begann 1951 mit der Entdeckung der  $\alpha$ -Helix und  $\beta$ -Faltblatt-Strukturen in Proteinen<sup>[21]</sup> und der Beschreibung von Watson-Crick Basenpaaren in der Doppelhelix der DNA 1953.<sup>[4]</sup>

#### 3.1.2 Theorie

Grundlage für das Verständnis der Wasserstoffbrückenbindung ist auch heute noch die bereits 1939 von Pauling<sup>[20]</sup> beschriebene attraktive Wechselwirkung zwischen zwei beteiligten Atomen aufgrund unterschiedlicher Elektronegativitäten. Der Donor für die Wasserstoffbrückenbindung ist ein kovalentes Paar X-H, in dem die höhere Elektronegativität des Atoms X zu einer partiellen positiven Ladung am Wasserstoff führt. Ein elektronegatives Atom A dient als Akzeptor. Die Wechselwirkung zwischen Donor und Akzeptor führt zur Ausbildung einer Wasserstoffbrückenbindung:



Eine der am meisten verbreiteten Definitionen besagt, dass dann eine Wasserstoffbrückenbindung vorliegt, wenn die Distanz zwischen den Schweratomen X und A geringer als die Summe ihrer van der Waals Radien ist.<sup>[22]</sup> Diese Definition stammt allerdings aus einer Zeit, in der hauptsächlich Röntgen- und Neutronenbeugung zur Untersuchung von Wasserstoffbrücken genutzt wurden, Wasserstoffatome aber mittels Röntgenbeugung nicht detektiert werden konnten. Zudem trifft diese Definition auf viele schwache Wasserstoffbrücken nicht zu.<sup>[14]</sup>

Nach Pauling<sup>[20]</sup> besitzen Wasserstoffbrücken einen starken ionischen Charakter und werden ausschließlich zwischen elektronegativen Atomen gebildet. Diese recht starre Definition wurde 1960 von Pimentel und McClellan<sup>[23]</sup> dahingehend erweitert, dass eine Wasserstoffbrückenbindung dann vorliegt, wenn Beweise für eine Bindung vorhanden sind und diese ein Wasserstoffatom enthält, welches kovalent an ein anderes Atom gebunden ist. Nach dieser Definition ist es also nicht mehr notwendig, dass das Atom X stark elektronegativ ist und eine negative Partialladung trägt. Wechselwirkungen des Typs C-H ... Y sind nach Pimentel und McClellan also Wasserstoffbrückenbindungen, während dies nach Paulings Definition nicht der Fall ist, eine Frage, die auch heute noch ebenso diskutiert wird<sup>[24]</sup> wie die, ob eine Wasserstoffbrückenbindung nicht auch als kovalent betrachtet werden kann.<sup>[25]</sup>

Die meisten Wasserstoffbrückenbindungen sind jedoch wesentlich schwächer als viele kovalente Bindungen, ihre Bildungsenthalpie liegt typischerweise in einem Bereich von 1 - 40 kcal/mol. Sie sind bevorzugt linear, allerdings sind auch deutliche Abweichungen des Winkels  $\angle$  X-H-A von dieser Linearität bekannt.<sup>[6]</sup> Durch die Wasserstoffbrücke wird die X-H-Bindung zwar geschwächt, aber nicht wie bei einer Säure-Base-Reaktion gebrochen. Typische Donoren für Wasserstoffbrückenbindungen sind O, N, S, F, Cl, Br und I, seltener C, Si und P. Typische Akzeptoren sind O, N und Halogenide.  $\pi$ -Elektronen-Systeme wie Alkine, Nitrile und Benzolderivate stellen ebenfalls schwache Akzeptoren dar.<sup>[6]</sup>

Pimentel und McClellan<sup>[23]</sup> unterteilten Moleküle hinsichtlich ihrer Fähigkeit, sich an Wasserstoffbrückenbindungen zu beteiligen, in vier Gruppen (Tabelle 3.1). Eine Unterteilung in drei Gruppen verschiedener Stärke findet man in Jeffreys „An Introduction to Hydrogen Bonding“ (Tabelle 3.2).<sup>[14]</sup>

**Tabelle 3.1:** Klassifizierung von Molekülen nach Pimentel und McClellan.<sup>[23]</sup>

Typ	Donor	Akzeptor	Beispiele
I	ja	nein	Acetylen-Derivate
II	nein	ja	Ketone, Ether, Ester, Aromaten, Olefine, tert. Amine, Nitrile
III	ja	ja	Alkohole, Wasser, Carbonsäuren, prim. & sek. Amine, Amide
IV	nein	nein	Gesättigte Kohlenwasserstoffe, Tetrachlormethan

**Tabelle 3.2:** Unterteilung der Stärke von Wasserstoffbrückenbindungen nach Jeffrey.<sup>[14]</sup>

	stark	mittel	schwach
X-H...A Wechselwirkung	hauptsächlich kovalent	hauptsächlich elektrostatisch	elektrostatisch
Bindungslängen	X-H $\approx$ H...A	X-H < H...A	X-H $\ll$ H...A
R(H...A) [Å]	$\sim 1.2 - 1.5$	$\sim 1.5 - 2.2$	2.2-3.2
R(X...A) [Å]	2.2-2.5	2.5-3.2	3.2 - 4.0
$\angle$ X-H-A [°]	175-180	130-180	90-150
$\Delta E_{\text{Agg}}$ [kcal/mol]	14-40	4-15	<4
Rel. Verschiebung der $\nu_s(\text{X-H})$ IR-Bande [ $\text{cm}^{-1}$ ]	25%	10-25%	<10%
Tiefeldverschiebung des Protons im NMR (ppm)	14-22	<14	—
Beispiele	Gasphasendimere mit starken Säuren oder Basen, HF Komplexe Protonenschwämme	Säuren, Alkohole, Phenole, Biomoleküle	Gasphasendimere mit schwachen Säuren oder Basen, C-H...A, X-H... $\pi$

### 3.1.3 Anti-Wasserstoffbrückenbindungen

Ein unlängst in der Literatur auftauchender Begriff ist der der Anti-Wasserstoffbrückenbindung.<sup>[26]</sup> In einer „normalen“ Wasserstoffbrückenbindung wird die X-H-Bindung verlängert und die  $\nu(\text{X-H})$ -Bande erfährt eine Rotverschiebung. Es werden jedoch auch Fälle beobachtet, in denen die X-H-Bindung verkürzt wird und die entspr. Streckschwingung zu höheren Wellenzahlen verschoben ist. Hierfür wurde der etwas irreführende Begriff „Anti-Wasserstoffbrückenbindung“ geprägt.<sup>[27-29]</sup> Diese Bindungen wirken nicht destabilisierend und haben auch nichts mit Anti-Wasserstoff<sup>[30]</sup> zu tun.

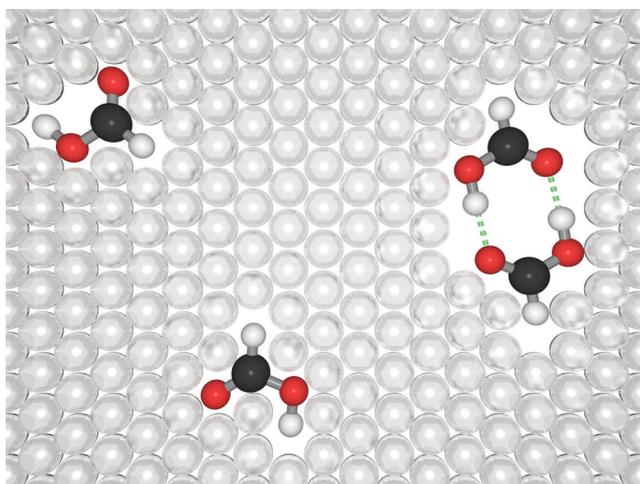
Beispiele für Anti-Wasserstoffbrückenbindungen sind z.B. das T-förmige Dimer des Benzols und andere Aggregate des Benzols mit C-H-Wasserstoffbrückendonoren.<sup>[28]</sup> Sie wurden auch mittels AIM („Atoms In Molecules“)<sup>[31-33]</sup> quantenchemisch untersucht.<sup>[29]</sup>

## 3.2 Matrixisolationsspektroskopie

### 3.2.1 Allgemeines

Reaktive Moleküle und Intermediate können nur dann einwandfrei spektroskopisch untersucht werden, wenn sie keine Möglichkeit haben mit anderen Molekülen zu reagieren. Zu diesem Zweck entwickelten Anfang der 50er Jahre sowohl Pimentel<sup>[8]</sup> als auch Norman und Porter<sup>[9]</sup> unabhängig voneinander die Matrixisolationstechnik.

Die zu untersuchende Substanz oder eine geeignete Vorstufe, aus der das Zielmolekül photo- oder thermolytisch erzeugt werden kann, wird zusammen mit einem hohen Überschuss an Inertgas auf ein spektroskopisches Fenster sublimiert. Es ist auch eine Dotierung des Inertgases mit einem kleinen Anteil eines anderen Gases wie CO oder O<sub>2</sub> möglich, um beispielsweise Photolyseprodukte abzufangen. Das spektroskopische Fenster wird hierfür auf 10 K oder darunter abgekühlt. Durch den hohen Inertgas-Überschuss und die tiefe Temperatur kommt es zu einer statistischen Verteilung einzelner, isolierter Moleküle in dem mikrokristallinen Matrixmedium (s. Abbildung 3.1), in dem auch intramolekulare Umlagerungen unterbunden oder zumindest stark verlangsamt werden. So lassen sich selbst hochreaktive Moleküle wie Radikale und Carbene oder auch Ionen spektroskopisch untersuchen.<sup>[10-12, 34-39]</sup> Ferner verhindert die Matrixisolation Molekülrotationen, so dass man Schwingungsspektren mit Banden erhält, deren Halbwertsbreite unter fünf Wellenzahlen liegt. Neben der IR-Spektroskopie können Matrices auch mittels UV- und ESR-Spektroskopie untersucht werden.



**Abbildung 3.1:** Moleküle in einer Inertgasmatrix.

Durch das Erwärmen (Tempern) einer Matrix kann die mikrokristalline Struktur teilweise aufgelöst werden, so dass kleinere Moleküle durch die Matrix diffundieren und miteinander reagieren können. Diese Reaktionen können dann spektroskopisch verfolgt werden.

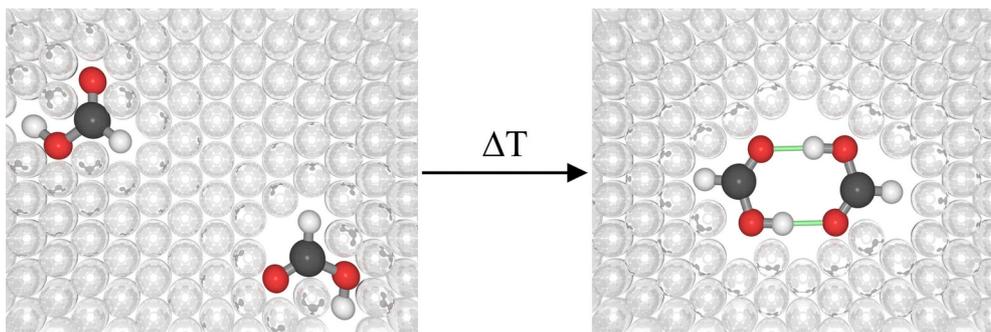
### 3.2.2 Matrixisolation und Wasserstoffbrückenbindungen

Moleküle, die Wasserstoffbrücken ausbilden können, sind reaktiv, wenn auch nicht im klassischen Sinne wie Radikale und Carbene. Unter Standardbedingungen sind sie nur schwer zu untersuchen, da Wasserstoffbrückenbindungen z.B. in Flüssigkeiten in einem dynamischen Prozess ständig neu gebildet und wieder gebrochen werden und man nur Informationen über ein statistisches Mittel erhält. Für eine genaue Untersuchung von Wasserstoffbrückenbindungen bietet sich daher die Matrixisolationstechnik an, da hier die einzelnen Moleküle bzw. Aggregate soweit getrennt sind, dass keine Wechselwirkungen zwischen ihnen auftreten. Sie wurde schon vielfach zu diesem Zweck eingesetzt.<sup>[40-55]</sup>

Doch erst durch die Entwicklung der speziellen Technik einer gepulsten Deposition (s. Abschn. 3.3) wurde es möglich, Matrizes zu erzeugen, die fast ausschließlich (> 99 %) Monomere oder Dimere einer Verbindung enthalten. Es ist anschließend möglich, die beim Tempern der Matrix eines reinen Monomers erfolgende Aggregation IR-spektroskopisch zu beobachten.<sup>[1, 56, 57]</sup>

### 3.2.3 Tempern von Inertgasmatrizes

Bei 10 K und darunter sind die meisten Inertgasmatrizes (Ar, Xe, N<sub>2</sub>) mikrokristallin, enthaltene Gast-Teilchen sind isoliert und ortsgebunden. Erwärmt man eine solche Matrix, kommt es zur Diffusion. Hierbei können sowohl die zu untersuchenden Moleküle diffundieren als auch das Matrixmaterial selbst, eine Unterscheidung ist meist unmöglich.<sup>[58]</sup> Es ist aber leicht einsichtig, dass die Teilchengröße eine wichtige Rolle spielt und ein kleines Teilchen eher diffundiert als ein großes.



**Abbildung 3.2:** Übergang von matrixisolierten Monomeren zu Dimeren.

Die Rigidität der Matrix (ihre Unnachgiebigkeit gegenüber der Diffusion von Molekülen) hängt also neben der Temperatur auch stark vom Matrixmaterial ab. Als Maß für die Rigidität wird oft der prozentuale Anteil der Matrixtemperatur an der Schmelztemperatur des Matrixmaterials verwendet (s. Tabelle 3.3).<sup>[58]</sup> Kryogene Matrices lassen sich jedoch nicht beliebig hoch erwärmen, da sie bei zu hohen Temperaturen vom Matrixfenster abdampfen.

**Tabelle 3.3:** Anteil der Matrixtemperatur an der Schmelztemperatur des Matrixmaterials für verschiedene Temperaturen.

Matrix	Temperatur					
	4.2 K	12 K	20 K	40 K	60 K	77 K
Ar	5	14	24	48	72	92
Xe	3	7	12	25	37	48

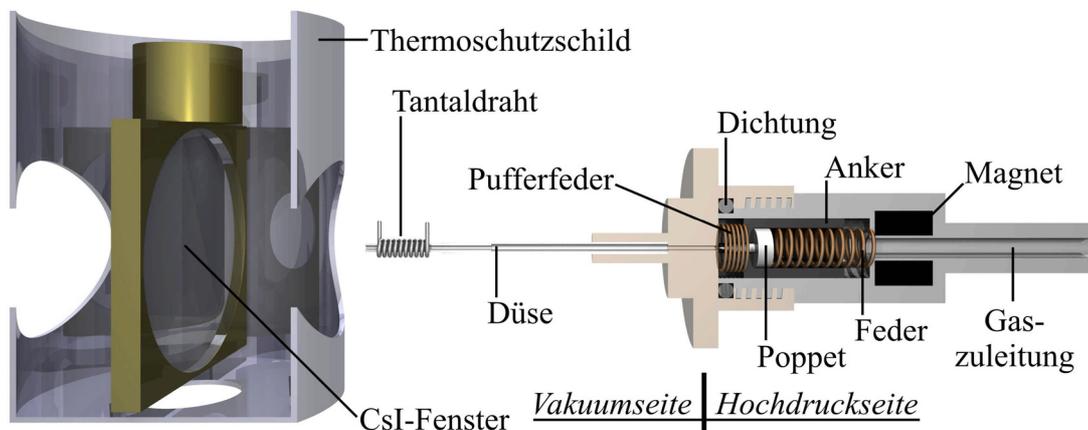
Generell kann man zwei Arten des Temperns unterscheiden. Bei der am häufigsten verwendeten Methode wird die Matrix für eine gewisse Zeit auf eine feste Temperatur erwärmt, bei der das Inertgas noch nicht abdampft. Anschließend wird wieder auf die Depositionstemperatur abgekühlt und die Matrix spektroskopisch untersucht. Auf diese Art wurde z.B. bereits die Aggregation von Benzoesäure untersucht.<sup>[40]</sup> Die Alternative besteht darin, dass man den Kryostaten abschaltet. Bei dieser als *free warm-up* bezeichneten Methode erwärmt sich die Matrix allmählich von selbst, bis sie schließlich vom spektroskopischen Fenster abplatzt. Die in der Matrix ablaufenden Prozesse werden dabei permanent spektroskopisch verfolgt, so dass man durchaus von einer zeitaufgelösten Methode sprechen kann, auch wenn die Zeitauflösung typischerweise bei einer Minute liegt.

Für die Untersuchung der Aggregation in kryogenen Matrizes ist das Tempern eine geeignete Technik, da sich während des Temporns aus Monomeren Dimere bilden können. Von den beiden genannten Methoden wird in dieser Arbeit fast ausschließlich das *free warm-up* verwendet, da einige Prozesse aufgrund energetischer Barrieren erst kurz vor dem Abplatzen der Matrix zu beobachten sind.

### 3.3 Pulsdeposition

Die Technik der gepulsten Deposition hat sich als geeignete Methode erwiesen, um gezielt Monomere oder Dimere einer leicht flüchtigen Verbindung in einer kryogenen Matrix zu isolieren.<sup>[1, 56, 57]</sup>

Das hauptsächlich verwendete Pulsventil (General Valve Corp., Serie 9) entspricht in seinem Aufbau Apparaturen, wie sie auch von Chen<sup>[59]</sup> und Maier<sup>[60, 61]</sup> verwendet wurden. Der Hochvakuumbereich des Kaltkopfes ist dabei durch eine 0,5 mm durchmessende Öffnung mit dem Hochdruckbereich der Gasmischeinrichtung verbunden, welche durch ein Poppet aus Teflon verschlossen wird (s. Abbildung 3.3). Das Poppet sitzt in einem federgelagerten Anker, der von dem Elektromagneten des Pulsventils angezogen werden kann, was in einer Öffnung des Ventils resultiert. Beim Abschalten des Magneten werden Poppet und Anker durch die Federkraft in die geschlossene Stellung zurückbewegt. Auf der Kaltkopfseite ist das Pulsventil mit einer Keramik-Düse versehen, deren Spitze mittels eines Tantaldrahtes erwärmt werden kann.



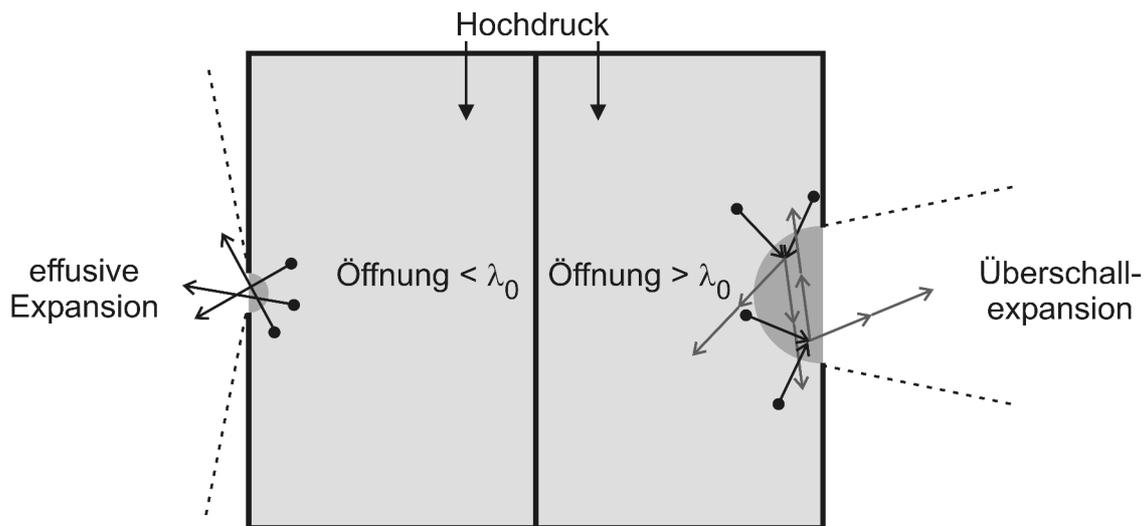
**Abbildung 3.3:** Pulsventil und Matrix-Fenster.

Das alternativ verwendete Pulsventil (Newport Corp. Model BV-100) hat ebenfalls eine Öffnung von 0,5 mm Durchmesser und arbeitet anstelle der Federn mit einem zweiten Elektromagneten, der den Schlegel des Ventils in die Ausgangsstellung zurückzieht. Dieses Pulsventil verfügt nicht über eine beheizbare Düse.

Die zu untersuchende Substanz wird mit einem Inertgas in einem für die Matrixisolation typischen Verhältnis von etwa 1:1000 in einem Stahlzylinder vorgemischt, der Gesamtdruck

liegt bei 0,5 – 2 bar. Das Gasgemisch wird dann in kurzen Pulsen (Pulslänge 300  $\mu\text{s}$  – 50 ms) auf das spektroskopische Fenster deponiert. Bei diesen Pulsen kommt es zu einer sog. Überschallexpansion,<sup>[62-65]</sup> deren Eigenschaften im Folgenden beschrieben werden sollen.

Betrachtet man einen geschlossenen, mit einem Gas (Anfangsdruck  $P_0$ ) gefüllten Behälter, so ist die Geschwindigkeitsverteilung des Gases nur abhängig von der Temperatur  $T_0$  und der Masse der Teilchen gemäß des Maxwell-Boltzmannschen Verteilungsgesetzes. Versieht man diesen Behälter mit einer Öffnung, um das Gas in einen Bereich niedrigeren Drucks entweichen zu lassen, so kann diese Öffnung entweder kleiner oder größer als die mittlere freie Weglänge  $\lambda_0$  des Gases sein. Ist sie kleiner, verlassen die Moleküle den Behälter ohne Kollision mit anderen Molekülen und somit auch ohne Änderung ihrer Geschwindigkeit. Bei dieser effusiven Expansion behalten die Moleküle ihre ursprüngliche Temperatur ebenso bei wie ihre Rotations- und Schwingungsniveaus.



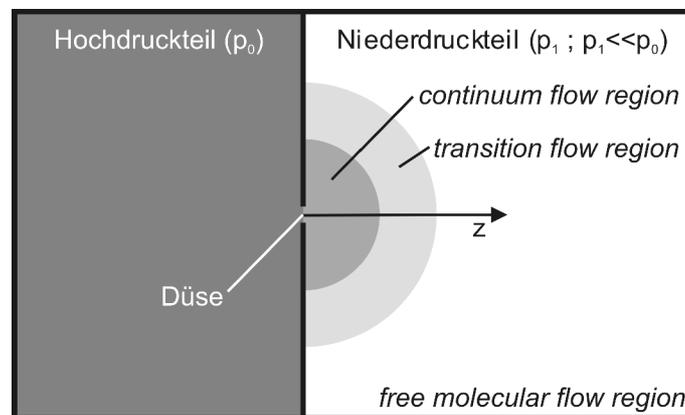
**Abbildung 3.4:** Vergleich einer effusiven mit einer Überschallexpansion.

Ist die Öffnung hingegen wesentlich größer als  $\lambda_0$ , kommt es in der Nähe des Lochs zu vielen Kollisionen. Die im Sinne einer Expansion effektivsten Kollisionen sind die, die in einer hohen Geschwindigkeitskomponente senkrecht zur Öffnungsfläche resultieren. Durch die hohe Anzahl der Kollisionen ist die Geschwindigkeitsverteilung entlang dieser Achse sehr schmal, was nach Maxwell-Boltzmann wiederum einer Temperaturenniedrigung entspricht. Gleichzeitig erhält man einen höheren Wert für die wahrscheinlichste Geschwindigkeit und, da durch die erniedrigte Temperatur auch die Schallgeschwindigkeit im Gas reduziert wird,

letztendlich die Bedingungen eines Überschall-Flusses. Dies resultiert in der Ausbildung einer Schockwelle um den Gasfluss herum, die den Kontakt mit warmen Hintergrundmolekülen verhindert. Die Entfernung  $z_M$ , der Schockwelle von der Expansionsachse wird als Mach-Disk bezeichnet. Sie ist vom Düsendurchmesser  $D$  und dem Verhältnis von Vor- ( $P_0$ ) und Enddruck ( $P_1$ ) abhängig. Es gilt:<sup>[65]</sup>

$$z_M = 0.67D \sqrt{\frac{P_0}{P_1}} \quad (3.1)$$

Die Überschallexpansion selbst lässt sich in drei Bereiche unterteilen (s. Abbildung 3.5). Der erste Bereich wird als *continuum flow* Region bezeichnet, in ihm finden viele Kollisionen statt und die Expansion ist isentropisch, d.h. die verschiedenen Freiheitsgrade bleiben im Gleichgewicht. In der *transition flow* Region bricht dieses Gleichgewicht zusammen, höherenergetische Zustände werden eingefroren. Die Prozesse in dieser Region sind allerdings weit weniger verstanden als in den anderen beiden Regionen. In der *free molecular flow* Region kommt es kaum noch zu Zusammenstößen, die Populationen der verschiedenen Zustände sind eingefroren. Dies ist der für die Spektroskopie interessante Bereich.<sup>[62]</sup>



**Abbildung 3.5:** Schematische Darstellung der verschiedenen Bereiche einer Überschallexpansion<sup>[57, 66]</sup>

Bei einem idealen Expansionsraum und einer Ausgangstemperatur  $T_0$  beträgt die erreichte Endtemperatur  $T$ :<sup>[63, 64]</sup>

$$T = T_0 \left[ \frac{5}{7} \frac{P_0}{kT_0} \sqrt{\left( \frac{2}{g+1} \right)^{\frac{1}{g-1}} \sqrt{\frac{g-1}{g+1}} D p s^2} \right]^{\frac{4}{5}} \quad (3.2)$$

mit  $g = C_p / C_v$  (Wärmekapazitäten bei konst. Druck bzw. Volumen;  $k$  = Boltzmann-Konstante). Eine möglichst niedrige Endtemperatur erreicht man also durch eine kleine Düsenöffnung  $D$  und einen hohen Vordruck  $P_0$ . Außerdem ist die Abkühlung bei Gasen mit kleinem  $\gamma$ -Wert am stärksten, also bei einatomigen Gasen. Unter den typischen Bedingungen eines Matrixexperimentes ( $T_0 = 298$  K,  $P_0 = 1$ -2 bar) werden so Endtemperaturen von 50 – 100 K erreicht.

### 3.3.1 Pulsparameter

Bei der Verwendung der gepulsten Deposition zur Untersuchung von Wasserstoffbrückenbindungen kann man verschiedene Parameter variieren. Es konnte gezeigt werden, dass es durch die Wahl geeigneter Parameter möglich ist, nur Monomere oder nur Dimere in der Inertgasmatrix zu isolieren.<sup>[1, 13, 56, 57]</sup> Die einzelnen Parameter und ihre Auswirkungen sollen im Folgenden kurz dargestellt werden.

a) Die Konzentration: Für die Matrixisolation ist zwar ein Überschuss an Inertgas erforderlich, das Mischungsverhältnis lässt sich jedoch trotzdem in einem Bereich von ca. 0.1 bis 1 % variieren. Kleine Konzentrationen führen zu einer Erhöhung des Monomeranteils und höhere Konzentrationen zu einer Erhöhung des Dimeranteils, ein Effekt, der in der Literatur hinreichend beschrieben wurde.<sup>[40, 42, 50, 52, 53, 67-69]</sup>

b) Der Vordruck: Wie bereits gezeigt (s. o.) führt ein hoher Vordruck zu einer stärkeren Abkühlung des Gasgemisches. Zugleich führt ein hoher Druck aber auch zu einem erhöhten Anteil von Dimeren in der Gasphase, da das Gleichgewicht zwischen Monomeren und Dimeren nach dem Prinzip des kleinsten Zwanges (Prinzip von Le Châtelier) auf die Seite der Dimere verschoben wird. Dies spiegelt sich auch in der Inertgasmatrix wieder.<sup>[57]</sup> Typischerweise werden Vordrücke von 0.7 bis 1.8 bar verwendet.

c) Die Gastemperatur: Eine Erhöhung der Gastemperatur führt zu einer Erniedrigung der Stosszahl und begünstigt somit Monomere in der Gasphase. Allerdings wird hierdurch gemäß Formel 3.2 auch die durch die Überschallexpansion erreichte Endtemperatur erhöht.<sup>[57]</sup> Daher belässt man das Gasgemisch zumeist bei Raumtemperatur.

d) Die Pulsfrequenz: Sie hat kaum einen Einfluss auf die Aggregation, sondern dient in erster Linie der Regelung des Massenflusses. Eine zu hohe Frequenz sollte vermieden werden, da sonst die Kühlkapazität des Kryostaten nicht ausreicht, das Gasgemisch zügig auf die Endtemperatur abzukühlen.<sup>[57]</sup> Bei kurzen Pulsen (Pulslänge ca. 300  $\mu$ s) ist eine Pulsfrequenz von 5 Hz möglich, bei langen Pulsen (Pulslänge ca. 20 ms) wird eine Pulsfrequenz von 0.1 Hz verwendet.

e) Die Pulslänge: Es hat sich gezeigt, dass kurze Pulse (ca. 300  $\mu$ s) zur vermehrten Isolation von Monomeren führen, während bei langen Pulsen (ca. 20 ms) verstärkt Dimere beobachtet werden. Die Ursache hierfür konnte noch nicht zweifelsfrei geklärt werden, es gibt aber zumindest Erklärungsansätze.<sup>[57]</sup> Bei kurzen Pulsen sind noch alle Bedingungen einer Überschallexpansion gegeben. Beim Übergang von der *continuum flow* zur *free molecular flow* Region werden die Wechselwirkungen zwischen den Teilchen aufgehoben. Die energiereichen Monomere werden ausgefroren, Dimere können zerstört aber nicht mehr gebildet werden. Die Verwendung langer Pulse entspricht hingegen eher den Bedingungen einer kontinuierlichen Deposition.

f) Die Düsentemperatur: Die Düse des Pulsventils kann über einen Tantaldraht erwärmt werden. Dies führt zunächst zu einer erhöhten Konzentration an Monomer, bei hohen Temperaturen kann es aber auch zur Zersetzung der zu untersuchenden Substanz kommen. Dieser für die Untersuchung von Wasserstoffbrückenbindungen unerwünschte Effekt wird bei den sog. Pulspyrolysen ausgenutzt, bei denen die Düse auf Temperaturen bis zu 1500°C erhitzt wird.<sup>[63, 70]</sup> Bei den in dieser Arbeit durchgeführten Untersuchungen wurde auf ein Erwärmen der Düse verzichtet, um eine Zersetzung der Substanzen zu vermeiden.

## 3.4 Quantenchemische Rechnungen

### 3.4.1 Methoden

Dem Chemiker stehen viele Möglichkeiten der Strukturbestimmung zur Verfügung, welche auch bei der Untersuchung von Wasserstoffbrückenbindungen genutzt werden: die Röntgenstrukturanalyse,<sup>[71-75]</sup> die NMR-<sup>[76, 77]</sup> und die IR-Spektroskopie.<sup>[78-99]</sup> Im Zusammenhang mit der Matrixisolationstechnik findet hiervon hauptsächlich die IR-Spektroskopie Anwendung, die erhaltenen Spektren zeichnen sich durch eine sehr geringe Halbwertsbreite aus. Solche Schwingungsspektren lassen sich auch sehr gut mit quantenchemischen Rechnungen<sup>[100]</sup> simulieren. Eine gute Übereinstimmung von theoretischem und experimentellem Spektrum ist oft ein entscheidender Beitrag für den Beweis einer Struktur, vorausgesetzt es wurde ein adäquater theoretischer Ansatz verwendet. Prinzipiell lassen sich die zur Verfügung stehenden Rechenmethoden in drei Gruppen unterteilen: semi-empirisch, *ab initio* und DFT.

Die semi-empirischen Rechenmethoden basieren, dies ist schon dem Namen zu entnehmen, auf experimentellen Parametern. Sie wurden so entwickelt, dass sie einige wichtige experimentell erhaltene Werte, hauptsächlich Geometrien und thermodynamische Daten, gut reproduzieren, in der Hoffnung, dass die so erhaltenen Parameter auf unbekannte Systeme übertragbar sind.

Im Gegensatz hierzu werden bei *ab initio* Rechnungen Molekülorbitale anhand von Kern-Elektron-Wechselwirkungen berechnet, die energetisch niedrigsten Orbitale werden mit Elektronen besetzt. Man kann die *ab initio* Methoden wiederum in verschiedene Gruppen unterteilen: Hartree-Fock, Møller-Plesset<sup>[101]</sup>, *Configuration Interaction*<sup>[102-104]</sup> und *Coupled Cluster*<sup>[105-109]</sup>. Bei Hartree-Fock (HF) werden nur die o.g. Wechselwirkungen berechnet, die Elektron-Elektron-Wechselwirkungen hingegen werden nur näherungsweise bestimmt. Diese werden bei Møller-Plesset (MP) durch Störungsrechnungen verschiedener Ordnung korrigiert. *Configuration Interaction* (CI) und *Coupled Cluster* (CC) berechnen neben dem Grundzustand zusätzlich Determinanten für angeregte Zustände, welche bei CI linear und bei CC exponentiell entwickelt werden. Diese Methoden liefern bei rein kovalenten Strukturen sehr gute Ergebnisse, benötigen aber im Vergleich mit anderen quantenchemischen Rechnungen sehr viel Rechenzeit. Bei der Berechnung von Wechselwirkungsenergien in Systemen mit mehreren Molekülen, also auch bei wasserstoffverbrückten Aggregaten, tritt allerdings der sog. *Basis Set Superposition Error* (BSSE, s.u.) auf.

Die *Density Functional Theory* (DFT)<sup>[110-112]</sup> verwendet die Elektronendichteverteilung zur Bestimmung der molekularen Eigenschaften. Anstelle der bei Hartree-Fock-Determinanten verwendeten exakten Austausch-Energie der Elektronen wird bei DFT ein Austausch- und ein Korrelations-Funktional verwendet. Diese werden mittels eines empirischen Faktors gewichtet, es handelt sich folglich nicht um eine *ab initio* Methode. Dennoch erhält man meist bessere Ergebnisse als mit MP2-Rechnungen. Gleichzeitig ist der Rechenaufwand für DFT-Rechnungen wesentlich geringer, so dass man auch Schwingungsspektren größerer Moleküle in einem vertretbaren Zeitrahmen berechnen kann. Neben den so genannten „reinen“ DFT-Funktionalen gibt es auch noch die Hybrid-DFT-Methoden, bei denen zusätzlich ein HF-Anteil einfließt. Hierzu gehört auch das in dieser Arbeit hauptsächlich verwendete Funktional B3LYP, welches sich im Bereich der wasserstoffverbrückten Aggregate als sehr zuverlässig erwiesen hat.<sup>[113, 114]</sup> Allerdings haben die meisten DFT-Methoden gegenüber *ab initio* Methoden wie MP2 den Nachteil, dass sie nicht in der Lage sind solche Komplexe zu beschreiben, in denen hauptsächlich disperse Wechselwirkungen eine Rolle spielen.<sup>[115, 116]</sup> Im Rahmen dieser Arbeit wurden Vergleichsrechnungen mit dem neueren mPW1LYP-Funktional<sup>[117]</sup> durchgeführt, welches bei langreichweitigen Wechselwirkungen wie beispielsweise Wasserstoffbrücken bessere Ergebnisse bringen soll. Ein Vergleich aller verwendeten Rechenmethoden erfolgt in Kapitel 7 (S. 121).

Sowohl *ab initio* als auch DFT verwenden für die Beschreibung der Molekülorbitale Basissätze. Für diese Arbeit wurden hauptsächlich zwei Basissätze verwendet. Zum einen der von Pople<sup>[118]</sup> entwickelte Basissatz 6-311++G(d,p), zum anderen der von Dunning<sup>[119, 120]</sup> entwickelte *correlation-consistent* Basissatz cc-pVTZ. In beiden Fällen handelt es sich um tripele- $\zeta$  Basissätze, bei denen die Orbitale der äußeren Schale durch drei Sätze von Funktionen dargestellt werden und die auch Atomorbitale mit höherer Quantenzahl  $\ell$  berücksichtigen. Dies gilt als Mindestanforderung für die Berechnung wasserstoffverbrückter Aggregate.<sup>[113, 121]</sup> Von den beiden verwendeten Basissätzen liefert die Dunning-Basis erfahrungsgemäß die verlässlicheren Energiewerte.

### 3.4.2 BSSE Korrektur

Der *Basis Set Superposition Error* wird dadurch hervorgerufen,<sup>[122-124]</sup> dass bei der Berechnung der Energien für jedes einzelne Atom stets alle Basissätze (s.o.) aller Atome berücksichtigt werden, bei einem Dimer also wesentlich mehr als in einem Monomer. Berechnet man die Aggregationsenergie  $\Delta E_{Agg}$  eines Dimers AB gemäß

$$\Delta E_{Agg} = E^{AB}(DCBS, R_D) - E^A(MCBS, R_M) - E^B(MCBS, R_M) \quad (3.3)$$

so ist diese durch den BSSE zu groß (mit *DCBS* = *dimer centered basis set* = voller Basissatz des Dimers, *MCBS* = *monomer centered basis set* = Basissatz eines Monomers,  $R_D$  = Dimer Minimums-Geometrie,  $R_M$  = Monomer Minimums-Geometrie).

Zur Korrektur dieses Fehlers wurde von Boys und Bernardi<sup>[125]</sup> die so genannte *Counterpoise Procedure* (CP) entwickelt. Hierbei verwendet man zur Berechnung der Energie eines Monomers den gesamten Basissatz des Dimers, die Atome des jeweils anderen Monomers werden durch *Ghost*-Atome ersetzt. Es muss die Geometrie des Monomers verwendet werden, in der es im Dimer vorliegt.<sup>[114, 126]</sup> Man erhält so die „vertikal“ CP-korrigierte Aggregationsenergie

$$\Delta E_{Agg}^{CP,vert.} = E^{AB}(DCBS, R_D) - E^A(DCBS, R_D) - E^B(DCBS, R_D) \quad (3.4)$$

Da sich die Geometrie des freien Monomers von der unterscheidet, in der es im Dimer vorliegt, muss zusätzlich die Deformationsenergie  $\Delta E_{Def}$  der beiden Monomere berechnet werden:

$$\Delta E_{Def} = E^A(MCBS, R_D) + E^B(MCBS, R_D) - E^A(MCBS, R_M) - E^B(MCBS, R_M) \quad (3.5)$$

Aus den Gleichungen (3.4) und (3.5) erhält man die gesamte CP-korrigierte Aggregationsenergie

$$\Delta E_{Agg}^{CP} = \Delta E_{Agg}^{CP,vert.} + \Delta E_{Def} \quad (3.6)$$

Die *Counterpoise Procedure* bringt also einen erheblichen zusätzlichen Rechenaufwand mit sich. Die vertikale CP-Korrektur muss an jedem Punkt einer Rechnung durchgeführt werden, da der BSSE neben den Wellenfunktionen auch die Geometrie des Komplexes und die Schwingungsfrequenzen beeinflusst.<sup>[114, 127]</sup> Mit den in dieser Arbeit verwendeten Programmen ist allerdings nur eine CP-Korrektur fertig optimierter Aggregate möglich, man erhält so also nur die CP-korrigierte Energie einer BSSE-behafteten Geometrie. Daher raten

einige Theoretiker von einer solchen BSSE-Korrektur ab.<sup>[128]</sup> Alternativ kann man durch Verwendung großer Basissätze den BSS-Fehler minimieren und auf die CP-Korrektur verzichten. Bei einigen Systemen wurden in dieser Arbeit zum Vergleich Møller-Plesset Störungsrechnungen 2. Ordnung (MP2) durchgeführt, bei denen aus den oben genannten Gründen auf eine Korrektur des BSSE verzichtet wurde.

Eine Alternative zur *Counterpoise Procedure* stellt der *Chemical Hamiltonian Approach* (CHA) dar,<sup>[126, 129]</sup> bei dem der BSS-Fehler von vorneherein vermieden wird. Allerdings ist das Konzept des CHA relativ neu und ebenfalls noch nicht in den verwendeten Programmen implementiert.



## 4 Verbindungen mit hohem Dampfdruck

### 4.1 Einführung

Die Technik der gepulsten Deposition ist gut geeignet um kryogene Matrizes zu erzeugen, die entweder nur Monomere oder nur Dimere enthalten. Dies konnte am Beispiel der Ameisensäure **1** gezeigt werden.<sup>[1, 13, 56, 57]</sup> Hier ist es möglich, ein intermediär auftretendes Dimer mit nur einer O-H...O Wasserstoffbrückenbindung spektroskopisch nachzuweisen (Abbildung 4.1).

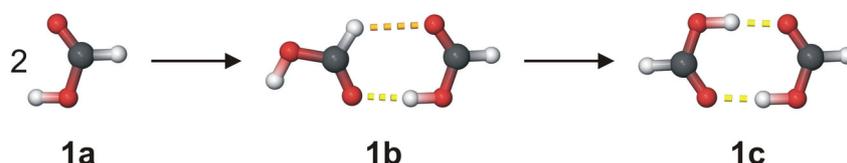


Abbildung 4.1: Aggregationsprozeß der Ameisensäure.

Grundvoraussetzung für die Anwendung dieser Technik ist allerdings ein ausreichend hoher Dampfdruck der zu untersuchenden Verbindung bei Raumtemperatur. Zu den physikalischen Auswirkungen von Wasserstoffbrückenbindungen gehört allerdings zumeist eine Erhöhung des Schmelz- und Siedepunktes, und somit eine Verringerung des Dampfdruckes bei einer gegebenen Temperatur. Dies limitiert die zur Verfügung stehenden Substanzen, die mit dieser Technik untersucht werden können, beträchtlich.

Zu den Substanzen, die Wasserstoffbrückenbindungen ausbilden können und dennoch bei Raumtemperatur einen relativ hohen Dampfdruck besitzen, gehört die Essigsäure mit einem Dampfdruck von ca. 20 mbar bei 298 K.<sup>[130]</sup> Sie wurde bereits bei der Entwicklung der Pulstechnik untersucht.<sup>[56, 57]</sup> Diese Untersuchungen wurden im Rahmen dieser Arbeit, insbesondere im Hinblick auf das Auftreten eines einfach wasserstoffverbrückten Intermediates, vertieft.

Neben Systemen, in denen Moleküle gleicher Art untereinander Wasserstoffbrückenbindungen ausbilden, also III+III-Aggregate im Sinne der Einteilung von Pimentel und McClellan (s. Tabelle 3.1, S. 11), sind auch Systeme, in denen verschiedenartige Moleküle miteinander aggregieren, von Interesse. Hier gilt es jedoch, verschiedene Punkte zu bedenken:

a) Prinzipiell sind drei Methoden vorstellbar, die Aggregation zwischen zwei Substanzen in einer Inertgasmatrix zu realisieren. Zum einen kann man die Substanzen getrennt jeweils mit dem Inertgas mischen und dann in zwei Schichten auf das CsI-Fenster depositionieren. Allerdings müssen dann die Moleküle der einen Schicht während des Temperns in Richtung der anderen Schicht diffundieren, um Aggregate bilden zu können. Versuche haben gezeigt, dass diese Methode zu keinen verwertbaren Ergebnissen führt. Alternativ kann man die beiden Gasgemische gleichzeitig mit zwei Depositionseinrichtungen depositionieren. Dies wird auch als *twin jet* Deposition bezeichnet und vielfach angewendet, allerdings nur in Form einer doppelten *slow spray-on* Deposition. Die resultierende Matrix enthält typischerweise bereits Dimere.<sup>[79, 81, 82, 84, 85, 90, 131]</sup> Die dritte Möglichkeit besteht in der (gepulsten) Deposition eines Gasgemisches, welches das Inertgas und beide Substanzen enthält. Da beide Verbindungen statistisch über die Matrix verteilt sind, führt die Diffusion zu einem wesentlich höheren Maß an Aggregation.

b) Beide Substanzen müssen in einem genau kontrollierten Verhältnis zueinander gemischt werden. Von den zur Verfügung stehenden Methoden ist dies nur bei der gepulsten Deposition mit leichtflüchtigen Verbindungen möglich. Hier kann man unter Annahme des idealen Gasgesetzes davon ausgehen, dass gleiche Partialdrücke gleichen Stoffmengen entsprechen. Bei der gepulsten Deposition mit schwerflüchtigeren Substanzen (s. Kap. 5) und der Standarddeposition (s. Kap. 6) wird die Stoffmenge hingegen über die Temperatur geregelt. Es ist zwar möglich, anhand von Dampfdruckkurven die Temperaturen für identische Stoffmengen zu ermitteln, aber es müssten dann Depositionseinrichtungen entwickelt werden, in denen man zwei Substanzen auf unterschiedliche Temperaturen erwärmen kann. Gleichzeitig sollte eine Kontamination der Substanzen untereinander verhindert werden.

c) Mögliche Kombinationen von Substanzklassen sind I+II, I+III, II+III und III+III. Allerdings ist bei allen Kombinationen außer der ersten immer die Selbstaggregation als Konkurrenzreaktion möglich. Daher bietet es sich an, zunächst Systeme vom Typ I+II zu

untersuchen. Alternativ kann man auch Systeme untersuchen, bei denen die Mischaggregation energetisch wesentlich günstiger ist als die Selbstaggregation.

Ein geeignetes System des Typus I+II ist das aus Furan **3** und 1-Hexin **4**. Ein weiteres interessantes System ist das von Acetylen **6** und Aceton **7**, da Acetylen in Gasflaschen zum Schutz vor Explosionen in Aceton gelöst ist. Ferner gehört dieses System eher zum Typus II+III, da das Acetylen ein T-förmiges Dimer **6b** <sup>[132-136]</sup> bildet. Die hierbei entstehende C-H... $\pi$ -Wasserstoffbrücke ist vergleichsweise schwach, Acetylen-Moleküle besitzen aber aufgrund ihrer geringen Größe eine höhere Mobilität innerhalb einer sich erwärmenden Matrix. Die Konkurrenz zwischen den beiden Aggregationen ist daher ein weiterer interessanter Gesichtspunkt dieses Systems.

## 4.2 Essigsäure

### 4.2.1 Einführung

Berney, Redington und Lin veröffentlichten 1970 eine matrixspektroskopische Untersuchung monomerer Essigsäure **2a**.<sup>[53]</sup> Sie verwendeten die *slow spray-on* Methode und fanden selbst bei tausendfachem Überschuss an Edelgas einen Anteil des Dimers **2c** von ca. 20%. Die Untersuchungen des Dimers durch Redington und Lin<sup>[52]</sup> bzw. Grenie, Cornut und Lassegues<sup>[51]</sup> basieren ebenfalls auf Matrizes, die einen hohen Anteil Monomer **2a** enthielten. Letztere fanden zudem einige Banden, die sie einem offenen Dimer **2b** zuordneten, während erstere diese als polymeren Spezies interpretierten.

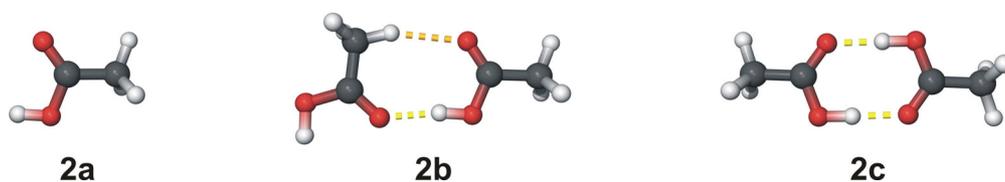
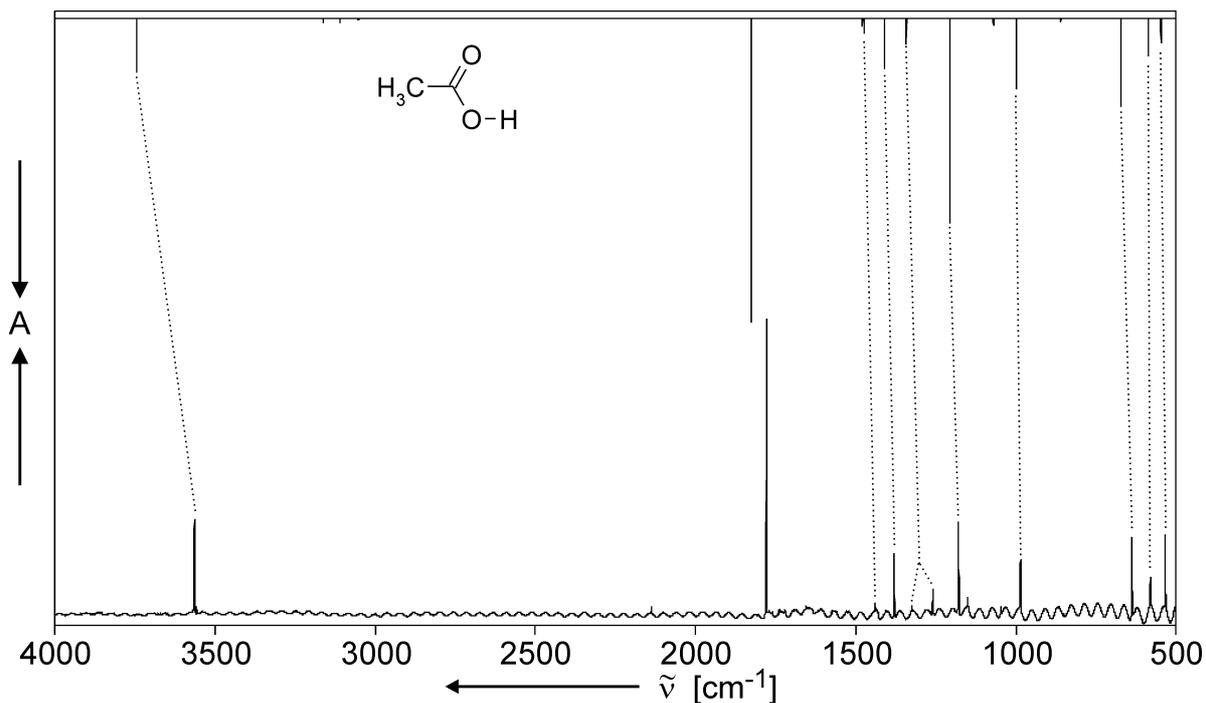


Abbildung 4.2: Essigsäure **2** - Monomer **a**, offenes **b** und cyclisches Dimer **c**.

Halupka konnte zeigen, dass durch die Verwendung der gepulsten Deposition der Anteil des jeweils unerwünschten Aggregates deutlich gesenkt werden kann.<sup>[57]</sup> Das Tempern der monomeren Essigsäure in einer Xenon-Matrix zeigte neben der Bildung des cyclischen Dimers jedoch kein intermediär auftretendes offenes Dimer **2b** analog zum offenkettigen Ameisensäure-Dimer **1b**. Diese Untersuchungen wurden in einer Argon-Matrix wiederholt.

### 4.2.2 Ergebnisse der Experimente

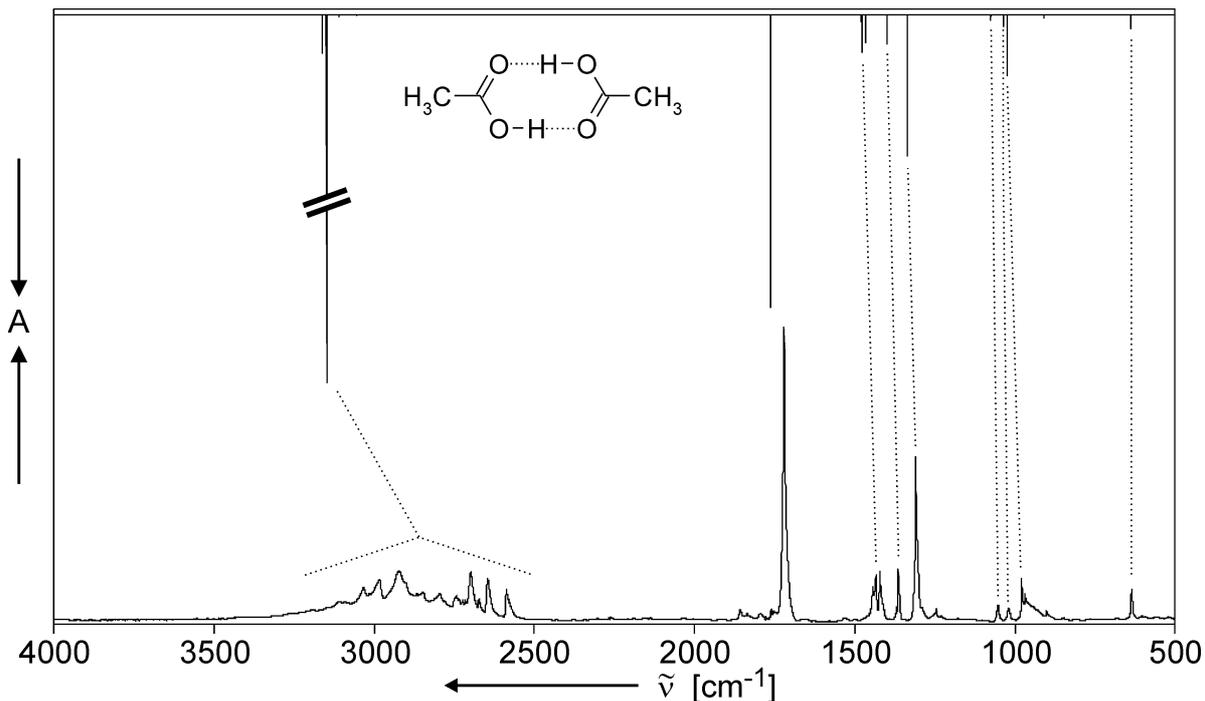
Für die Matrixisolation monomerer Essigsäure wurden zunächst die gleichen Parameter verwendet, die im Falle der Ameisensäure zu einer reinen Monomer-Matrix führen. Es zeigte sich, dass unter diesen Bedingungen hauptsächlich das Monomer **2a** in der Matrix isoliert wird. Daneben werden jedoch auch geringe Mengen Dimer **2b** und **2c** isoliert. Durch Erwärmen des Gasgemisches auf 50°C während der Deposition lässt sich eine reine Monomer-Matrix erzeugen (s. Abbildung 4.3).



**Abbildung 4.3:** IR-Spektrum matrixisolierter monomerer Essigsäure **2a**; **oben:** berechnetes Spektrum (B3LYP/cc-pVTZ); **unten:** experimentelles Spektrum (Pulsdeposition, 0.1 % Essigsäure in Argon, Pulsdauer 300  $\mu$ s, Pulsfrequenz 5 Hz, Gastemperatur 50°C; *MG138A11.0*).

Das erhaltene Spektrum zeigt gute Übereinstimmung mit dem berechneten Spektrum, ausgenommen der Bereich der C-O-Streck- und C-O-H-Deformationsschwingung, in dem zusätzliche Banden beobachtet werden können. Berechnungen und darauf basierende Normalkoordinatenanalysen von Meyer et al.<sup>[137]</sup> erklären dies durch Resonanz mit anderen Schwingungen.

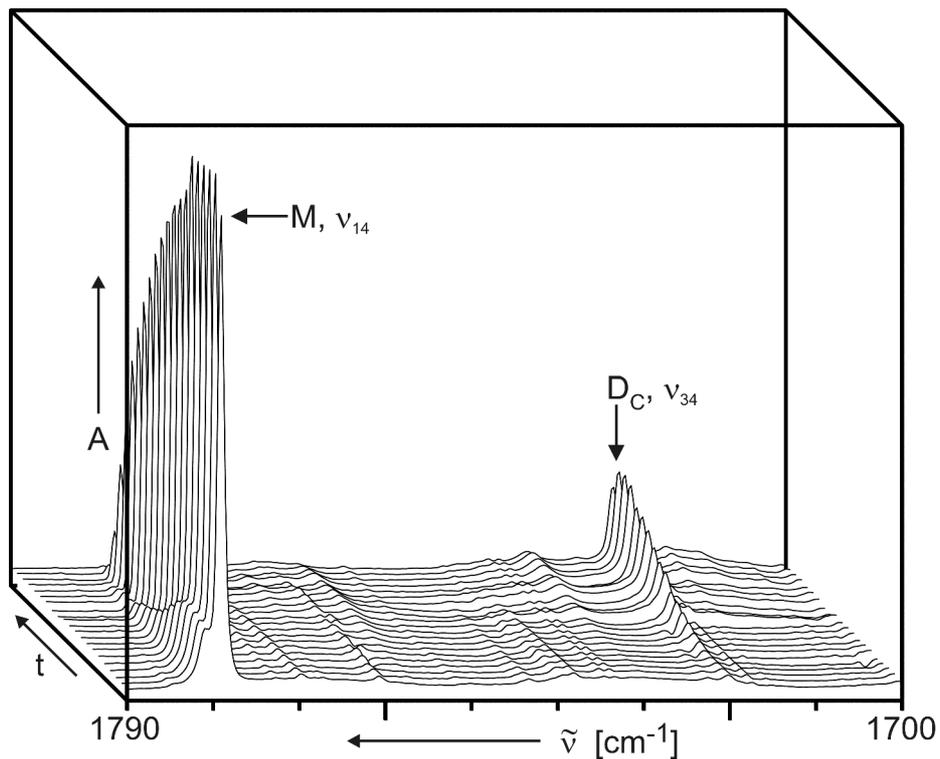
Bei der Erzeugung einer reinen Essigsäure-Dimer-Matrix zeigte sich, dass unter den entsprechenden Bedingungen der Ameisensäure **1** eine Matrix mit weniger als 1 % Monomer erzeugt wird (s. Abbildung 4.4). Das Spektrum zeigt die für dimere Carbonsäuren typische Bandenaufspaltung durch Fermi-Resonanz im Bereich der C-H- und O-H-Streckschwingungen, welche sowohl aus Untersuchungen in der Gasphase<sup>[138]</sup> als auch in kryogenen Matrices<sup>[51, 52]</sup> bekannt ist. Alle anderen Banden stimmen sehr gut mit dem berechneten Spektrum überein.



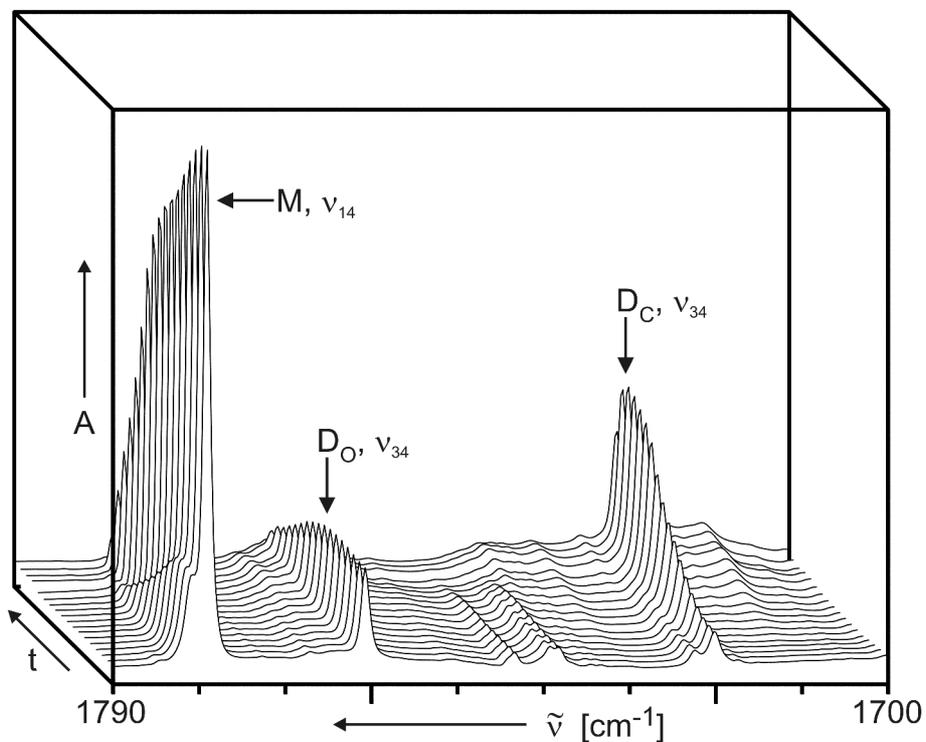
**Abbildung 4.4:** IR-Spektrum matrixisolierter dimerer Essigsäure **2c**; **oben:** berechnetes Spektrum (B3LYP/cc-pVTZ); **unten:** experimentelles Spektrum (Pulsdeposition, 0.5 % Essigsäure in Argon, Pulsdauer 20 ms, Pulsfrequenz 5 Hz, Gastemperatur RT; *MG132A01.0*).

Tempert man die Monomer-Matrix, so beobachtet man die allmähliche Abnahme der Banden des Monomers **2a**. Gleichzeitig entstehen neue Banden, die sich dem cyclischen Dimer **2c** der Essigsäure zuordnen lassen. Für die Beobachtung dieses Prozesses eignen sich vor allem die intensiven Carbonyl-Streckschwingungen (s. Abbildung 4.5). Das offenkettige Dimer **2b** kann, wie bei den Untersuchungen von Halupka in einer Xenon Matrix, während des *free warm-up* nicht beobachtet werden. Tempert man eine Matrix, die nach der Deposition bereits offenkettiges Dimer **2b** enthält, kann man nur eine Abnahme der zugehörigen Banden beobachten (s. Abbildung 4.6), auch wenn diese anfangs wesentlich langsamer erfolgt als beim Monomer.

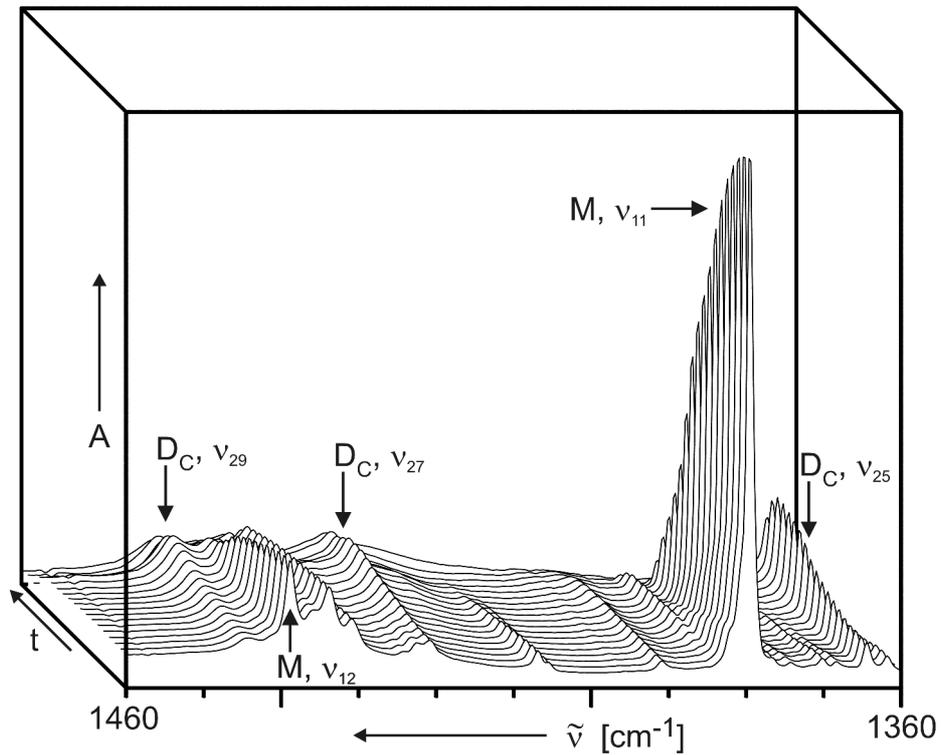
Auch im Bereich der  $\text{CH}_3$ -Deformationsschwingungen (Abbildung 4.7) und der C-O-Streckschwingungen (Abbildung 4.8) lässt sich die Aggregation gut verfolgen.



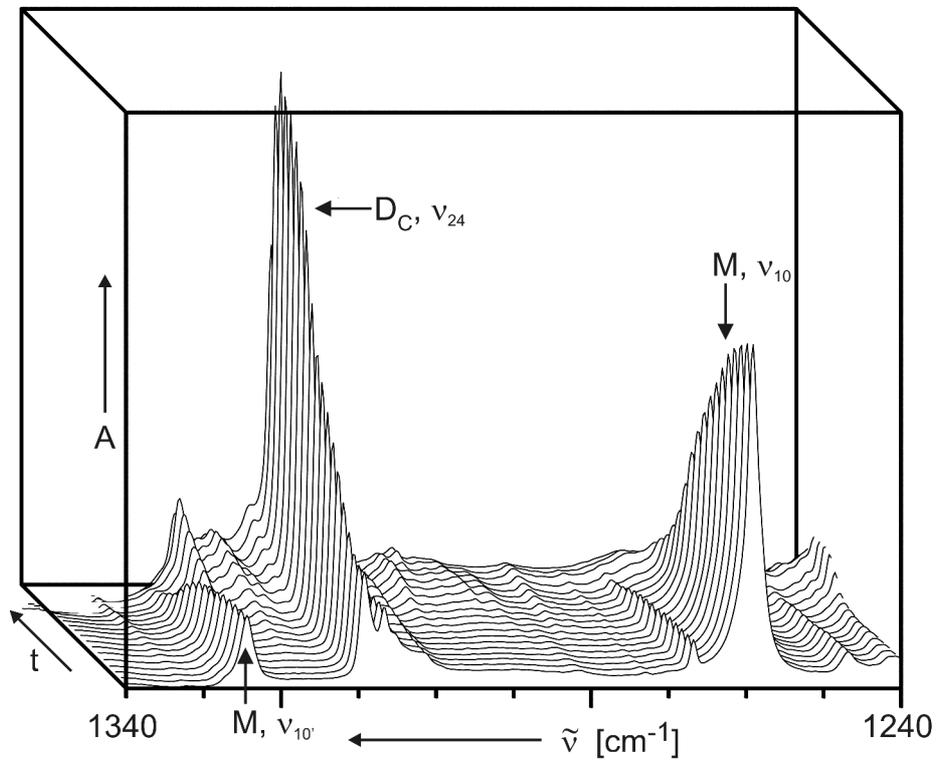
**Abbildung 4.5:** Tempern (*free warm-up*) von Essigsäure Monomer **2a** (M) in einer Argon Matrix, Bildung des cyclischen Dimers **2c** ( $D_C$ ); Bereich der Carbonyl-Streckschwingungen (MG138A12.x).



**Abbildung 4.6:** Tempern (*free warm-up*) von Essigsäure Monomer **2a** (M) und offenkettigem Dimer **2b** ( $D_O$ ) in einer Argon Matrix, Bildung des cyclischen Dimers **2c** ( $D_C$ ); Bereich der Carbonyl-Streckschwingungen (MG131A12.x).



**Abbildung 4.7:** Tempern (*free warm-up*) von Essigsäure Monomer **2a** (M) in einer Argon Matrix, Bildung des cyclischen Dimers **2c** ( $D_C$ ); Bereich der  $\text{CH}_3$ -Deformationsschwingungen (MG138A12.x).



**Abbildung 4.8:** Tempern (*free warm-up*) von Essigsäure Monomer **2a** (M) in einer Argon Matrix, Bildung des cyclischen Dimers **2c** ( $D_C$ ); Bereich der C-O-Streckschwingungen (MG138A12.x).

## 4.2.3 Diskussion

Mittels der gepulsten Deposition ist es möglich, Essigsäure sowohl als Monomer **2a** als auch als cyclisches Dimer **2c** in nahezu reiner Form in einer Matrix zu isolieren. Der Vergleich mit Literaturdaten zeigt eine sehr gute Übereinstimmung. Die Daten für das Monomer **2a** sind in Tabelle 4.1 aufgeführt, die für das cyclische Dimer **2c** in Tabelle 4.2 (normale Banden) und Tabelle 4.3 (Banden durch Fermi-Resonanz).

**Tabelle 4.1:** IR-Absorptionen des Essigsäure Monomers **2a**, Vergleich der experimentellen Daten mit berechneten Schwingungen und Literaturdaten.<sup>[53]</sup>

Mode	B3LYP/cc-pVTZ			Ar-Matrix		Zuordnung
	$\tilde{\nu}$ (cm <sup>-1</sup> )	I <sub>rel</sub>	Sym.	$\tilde{\nu}_{\text{Exp}}$ (cm <sup>-1</sup> )	$\tilde{\nu}_{\text{Lit}}$ (cm <sup>-1</sup> )	
18	3743.7	17	A'	3564.0	3566	$\nu(\text{OH})$
14	1825.9	100	A'	1779.2	1779	$\nu(\text{C}=\text{O})$
13	1478.6	2	A''	1438.8	1439	$\delta_{\text{as}}(\text{CH}_3)$
12	1473.2	4	A'	1430.8	1434	$\delta_{\text{s}}(\text{CH}_3)$
11	1408.9	16	A'	1379.5	1380	$\gamma(\text{CH}_3)$
10	1341.9	8	A' {	1324.4	1324	} $\nu(\text{C}-\text{O})$
				1259.1	1259	
9	1204.8	67	A' {	1179.4	1181	} $\delta_{\text{s}}(\text{COH})$
				1150.1	1152	
8	1070.3	2	A''	1047.2	1044	$\gamma(\text{CH}_3)$
7	998.8	23	A'	985.3	987	$\varpi(\text{CH}_3)$
6	859.4	1	A'	849.4	-	$\nu(\text{CC})$
5	670.7	28	A''	638.2	639	$\tau(\text{OH})$
4	585.3	12	A'	580.4	581	$\delta(\text{OCO})$
3	547.1	7	A''	534.1	535	$\tau(\text{OH})$

**Tabelle 4.2:** IR-Absorptionen des cyclischen Essigsäure Dimers **2c** unterhalb 1800 cm<sup>-1</sup>, Vergleich der experimentellen Daten mit berechneten Schwingungen und Literaturdaten.<sup>[51]</sup> Die berechneten Schwingungen von nicht beobachteten Banden (zu geringe Intensität oder IR-inaktiv) sind nicht aufgeführt.

Mode	B3LYP/cc-pVTZ			Ar-Matrix		Zuordnung
	$\tilde{\nu}$ (cm <sup>-1</sup> )	I <sub>rel</sub>	Sym.	$\tilde{\nu}_{\text{Exp}}$ (cm <sup>-1</sup> )	$\tilde{\nu}_{\text{Lit}}$ (cm <sup>-1</sup> )	
34	1763.7	23	B <sub>u</sub>	1720.1	1721	$\nu_{\text{as}}(\text{C}=\text{O})$
29	1476.0	3	B <sub>u</sub>	1433.8		$\delta_{\text{as}}(\text{HCH}_2)$
27	1465.4	2	B <sub>u</sub>	1420.6	1421	$\delta_{\text{s}}(\text{HCH}_2)$
25	1398.1	2	B <sub>u</sub>	1364.3	1364	$\delta(\text{CH}_3)$
24	1336.3	11	B <sub>u</sub>	1309.3	1308	$\nu(\text{C}-\text{O})$
22	1074.7	0	A <sub>u</sub>	1052.7		$\rho(\text{CH}_3)$
20	1034.2	0	B <sub>u</sub>	1019.7		$\omega(\text{CH}_3)$
18	1023.0	4	A <sub>u</sub>	979.1		$\tau(\text{OH})$
16	908.1	0	B <sub>u</sub>	900.4		$\nu(\text{CC})$
14	639.5	1	B <sub>u</sub>	636.2		$\delta(\text{OCO})$
10	487.0	1	B <sub>u</sub>	485.1		$\delta(\text{OCC})$

Durch einen Vergleich der Spektren bei verschiedenen Depositionsbedingungen erhält man einen Satz Banden, der weder dem Monomer **2a** noch dem cyclischen Dimer **2c** zugeordnet werden kann. Es zeigt sich jedoch eine sehr gute Übereinstimmung mit dem berechneten Spektrum eines offenkettigen Dimers **2b** (s. Tabelle 4.4). Dieses Aggregat ist, analog zur Struktur **1b** der Ameisensäure, unter Matrixbedingungen bei 10 K stabil. Eine Matrixisolation nur dieses Dimers war nicht möglich, es wurde immer nur zusammen mit dem Monomer oder dem cyclischen Dimer beobachtet, wobei letztere in den jeweiligen Spektren überwogen.

**Tabelle 4.3:** IR-Absorptionen des cyclischen Essigsäure Dimers **2c** oberhalb  $1800\text{ cm}^{-1}$  (Bereich der durch Fermi-Resonanz hervorgerufenen Banden), Vergleich der experimentellen Daten mit berechneten Schwingungen und Literaturdaten.<sup>[51]</sup>

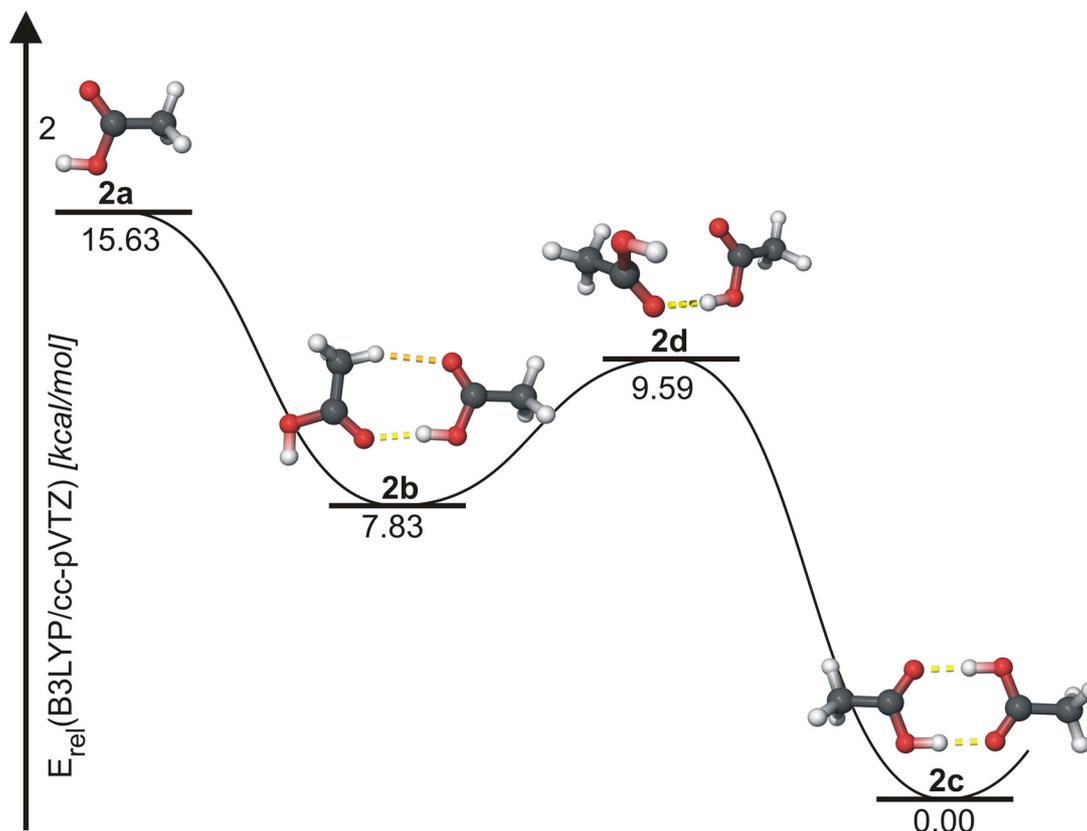
Mode	B3LYP/cc-pVTZ				Ar-Matrix	
	$\tilde{\nu}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$I_{\text{rel}}$	Sym.	Zuordnung	$\tilde{\nu}_{\text{Exp}}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\tilde{\nu}_{\text{Lit}}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
42	3161.2	3	B <sub>u</sub>	v <sub>s</sub> (CH)	3090.9	
40	3149.5	99	B <sub>u</sub>	v(OH)	3033.6	3033
39	3110.2	0	A <sub>u</sub>	v <sub>as</sub> (CH)	2983.5	2987
36	3053.5	0	B <sub>u</sub>	v(CH <sub>3</sub> )	2922.6	2921
					2867.1	
					2847.5	
					2795.5	
					2779.4	
					2743.6	2742
					2715.9	
					2698.9	2699
					2672.9	2672
					2644.3	2644
					2587.0	2584

Es ist nahe liegend, dass ein offenkettiges Dimer mit nur einer O-H...O Wasserstoffbrückenbindung als Zwischenstufe bei der Bildung des cyclischen Dimers aus isolierten Monomeren auftritt. Die simultane Ausbildung der beiden Wasserstoffbrückenbindungen des cyclischen Dimers **2c** würde eine sterische Präorganisation voraussetzen, die wesentlich unwahrscheinlicher ist als eine Anordnung, bei der eine solche Bindung gebildet werden kann.

**Tabelle 4.4:** IR-Absorptionen des offenkettigen Essigsäure Dimers **2b**, Vergleich der experimentellen Daten mit berechneten Schwingungen und Literaturdaten.<sup>[51]</sup> Die Indizes ‚frei‘ bzw. ‚WBB‘ geben an, ob es sich um eine an der Wasserstoffbrückenbindung beteiligte Gruppe handelt.

Mode	B3LYP/cc-pVTZ			Ar-Matrix		Zuordnung
	$\tilde{\nu}$ (cm <sup>-1</sup> )	I <sub>rel</sub>	Sym.	$\tilde{\nu}_{\text{Exp}}$ (cm <sup>-1</sup> )	$\tilde{\nu}_{\text{Lit}}$ (cm <sup>-1</sup> )	
42	3735.4	5	A'	3417.0	3416	$\nu_{\text{frei}}(\text{OH})$
41	3422.4	100	A'	3251.8	3250	$\nu_{\text{WBB}}(\text{OH})$
34	1797.7	62	A'	1760.7		$\nu_{\text{s}}(\text{C}=\text{O})$
33	1771.2	9	A'	1738.5		$\nu_{\text{as}}(\text{C}=\text{O})$
31	1479.4	0	A''	1441.2		$\delta_{\text{as}}(\text{CH}_3)$
28	1432.9	3	A'	1390.8		$\delta_{\text{WBB}}(\text{COH})$
26	1383.5	2	A'	1370.1		$\gamma_{\text{frei}}(\text{CH}_3)$
24	1267.0	25	A'	1246.8		$\nu_{\text{WBB}}(\text{C}-\text{O})$
22	1082.3	0	A''	1056.8		$\rho_{\text{WBB}}(\text{CH}_3)$
19	1019.1	3	A'	994.6		$\rho_{\text{frei}}(\text{CH}_3)$
17	877.2	7	A''	847.4		$\gamma_{\text{WBB}}(\text{COH})$

Beim Tempern des Monomers kann die Bildung des cyclischen Dimers beobachtet werden, nicht jedoch die Bildung des offenkettigen Dimers als Zwischenprodukt. Betrachtet man die auf dem B3LYP/cc-pVTZ Niveau berechneten relativen Energien der einzelnen Aggregate (s. Abbildung 4.9) und vergleicht sie mit denen der Ameisensäure (s. Abbildung 2.1, S. 7), so findet man für die Bildung des Essigsäure Dimers einen um ca. 1 kcal/mol höheren Energiegewinn. Gleichzeitig ist die Energiebarriere für die Umwandlung des offenkettigen Dimers **2b** in das cyclische Dimer **2c** mit 1.76 kcal/mol um fast 1 kcal/mol niedriger als bei der Ameisensäure (2.69 kcal/mol). Dieser Unterschied in den Aktivierungsbarrieren für die Dimerumwandlung erklärt, warum sich das jeweilige offenkettige Dimer bei der Aggregation der Ameisensäure **1** beobachten lässt, nicht aber bei der Essigsäure **2**.



**Abbildung 4.9:** Energetik der Aggregation von Essigsäure berechnet auf dem B3LYP/cc-pVTZ Niveau, alle Energien inkl. ZPE.

Als Ursache für die höhere Barriere im Fall der Ameisensäure **1** ist die zweite, schwächere Wasserstoffbrücke vom Typ C-H...O zu nennen. Bei der Ameisensäure **1** ist der an dieser Wasserstoffbrücke beteiligte Wasserstoff an das gleiche Kohlenstoffatom gebunden wie die Sauerstoffatome, was zu einer stärkeren Polarisierung der C-H-Bindung führt. Dadurch ist die Wasserstoffbrückenbindung hier stärker als bei der Essigsäure **2**, bei der die zweite Wasserstoffbrücke über die Methylgruppe gebildet wird.

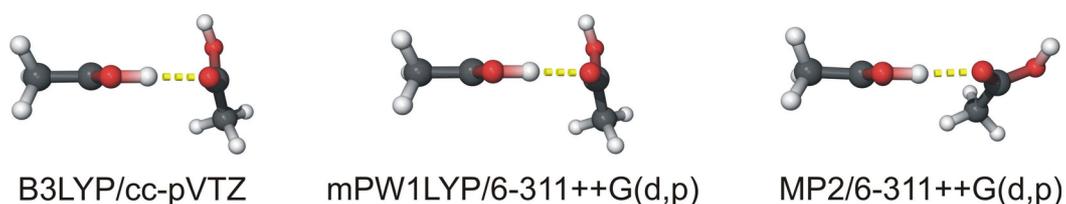
Durch die stärkere Wechselwirkung wird das offenkettige Dimer **1b** der Ameisensäure gegenüber dem Übergangszustand **1d** energetisch stärker abgesenkt als das Dimer **2b** gegenüber dem Übergangszustand **2d**. Die Energiedifferenz zwischen dem jeweiligen Übergangszustand und dem cyclischen Dimer ist für Ameisen- und Essigsäure hingegen von vergleichbarer Größe.

Berechnungen mit mPW1LYP/6-311++G(d,p) zeigen vergleichbare Ergebnisse, während man auf dem MP2/6-311++G(d,p) Niveau zwar den gleiche Trend erhält, aber mit deutlich geringeren Energien (s. Tabelle 4.5).

**Tabelle 4.5:** Vergleich der Berechneten relativen Energien von Essigsäure und Ameisensäure bei Verwendung verschiedener Methoden und Basissätze (CC = cc-pVTZ, 6G = 6-311++G(d,p)). Alle Energien in kcal/mol, inkl. ZPE.

Methode	Essigsäure			Ameisensäure		
	B3LYP	mPW1LYP	MP2	B3LYP	mPW1LYP	MP2
Basissatz	CC	6G	6G	CC	6G	6G
Monomer	15.63	15.39	14.16	14.77	14.31	12.72
Dimer (o)	7.83	6.98	6.39	6.68	5.85	4.95
Überg.zust.	9.59	8.67	6.51	9.37	8.26	7.01
Dimer (c)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Barriere	1.76	1.69	0.12	2.69	2.41	2.06

Auffällig ist die mit 0.12 kcal/mol sehr niedrige Barriere für die Umlagerung von **2b** nach **2c** auf dem MP2/6-311++G(d,p)-Niveau. Ursache hierfür ist die Geometrie des Übergangszustandes, die sehr nahe bei der des offenkettigen Dimers **2b** liegt. Bei den Übergangszuständen, die man mit DFT-Rechnungen erhält, stehen die beiden Molekülebenen hingegen nahezu senkrecht aufeinander (s. Abbildung 4.10).



**Abbildung 4.10:** Geometrien des Übergangszustandes **2d** auf verschiedenen quantenchemischen Niveaus.

Im Vergleich hierzu ergaben CCSD(T)/6-311++G(d,p)//B3LYP/cc-pVTZ *single point* Rechnungen eine Barriere von 1.10 kcal/mol.

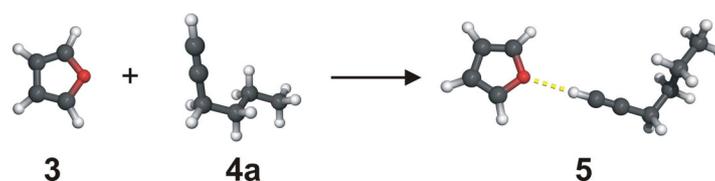
## 4.3 Furan und 1-Hexin

### 4.3.1 Einführung

Sowohl Furan **3** als auch 1-Hexin **4** sind, zumindest im Bezug auf die Matrixisolationsspektroskopie, wenig untersucht. In der „*Bibliography of Matrix Isolation*“<sup>[139, 140]</sup> findet man bis einschl. 1997 für Furan 11 Literaturstellen. Für 1-Hexin findet man dort, im Gegensatz zum isomeren tert-Butylacetylen, keine Einträge.

Hinsichtlich intermolekularer Wechselwirkungen wurde beim Furan **3** die Komplexbildung mit Chlormonofluorid untersucht.<sup>[131]</sup>

Bei der Aggregation von Furan **3** und 1-Hexin **4a** (Abbildung 4.11) erwartet man die Bildung einer Wasserstoffbrückenbindung zwischen dem C1-Wasserstoff des Hexins und dem Sauerstoff des Furans. Eine solche Wasserstoffbrückenbindung ist, verglichen mit der zwischen zwei Carbonsäuremolekülen, sehr schwach. Ferner verfügt keines der beiden Moleküle über eine Carbonylgruppe, die sich aufgrund der hohen IR-Intensität ihrer Streckschwingung als guter Ansatzpunkt für die Untersuchung der Carbonsäuren erwiesen hat. Als Ersatz könnte in diesem System die Alkin-terminale C-H-Streckschwingung des Hexins dienen. Aus diesen beiden Gründen wurde den Experimenten eine quantenchemische Betrachtung des Systems vorangestellt.



**Abbildung 4.11:** Die Aggregation von Furan **3** und 1-Hexin **4a** zu einem gemischten Dimer **5**.

### 4.3.2 Ergebnisse der quantenchemischen Betrachtung

Die quantenchemischen Rechnungen ergeben als energetisches Minimum eine Struktur, bei der die Dreifachbindung des Alkins in der Ebene des Furan-Rings liegt und die, vernachlässigt man die restliche Kohlenstoffkette des Alkins, annähernd  $C_{2v}$  Symmetrie hat. Die berechnete Aggregationsenergie ist mit Werten zwischen fast Null und 1.4 kcal/mol je nach gewählter Methode erwartungsgemäß gering (s. Tabelle 4.6).

**Tabelle 4.6:** Berechnete Energien für die Aggregation von Furan **3** und 1-Hexin **4a** zum Dimer **5** sowie für die Bildung des 1-Hexin Dimers **4b**; alle Energien in kcal/mol, inkl. ZPE.

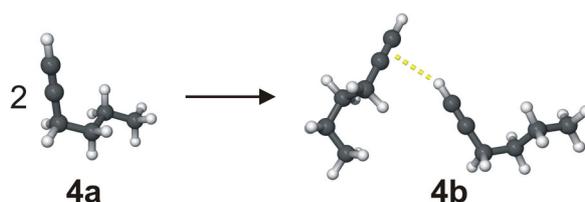
Methoden	B3LYP	B3LYP	mPW1LYP	HF
Basissatz	cc-pVTZ	6-311++G(d,p)	6-311++G(d,p)	6-311++G(d,p)
Aggregationsenergie <b>5</b>	0.00(2)	0.81	1.42	0.92
Aggregationsenergie <b>4b</b>	-0.09	-0.15	0.54	-0.02

Vergleicht man das berechnete Dimer-Spektrum mit den berechneten Spektren der beiden Monomere, so findet man drei Bereiche, in denen signifikante Änderungen auftreten sollten, wenn die Aggregation erfolgt (s. Abbildung 4.13):

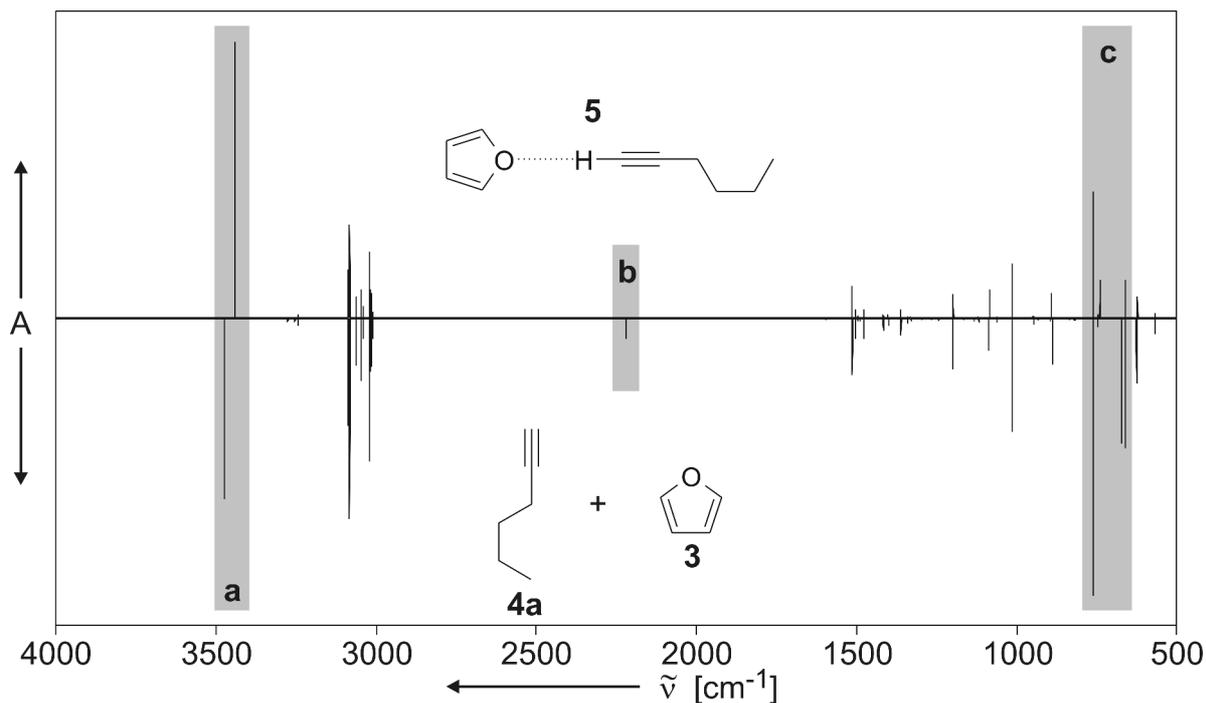
- die C-H-Streckschwingung erfährt eine Rotverschiebung von ca.  $30\text{ cm}^{-1}$
- die C≡C-Streckschwingung bei (berechneten)  $2218\text{ cm}^{-1}$  verliert stark an Intensität
- die C≡C-H-Deformationsschwingungen bei (berechneten)  $670$  und  $650\text{ cm}^{-1}$  verlieren stark an Intensität, gleichzeitig verschiebt sich eine Bande in diesem Bereich stark zu höheren Wellenzahlen.

Alle anderen Bereiche des Infrarot-Spektrums werden durch die Dimerbildung wenig beeinflusst. Die berechneten Spektren der verschiedenen Methoden und Basissätze sind in Bandenmuster und Intensitätsverhältnissen nahezu identisch.

Neben der Bildung des gemischten Dimers **5** besteht auch die Möglichkeit der Aggregation von 2 Molekülen 1-Hexin unter Bildung eines T-förmigen Dimers **4b** (s. Abbildung 4.12). Die quantenchemischen Berechnungen ergaben auf den meisten Niveaus jedoch, dass die Bildung dieses Dimers energetisch ungünstig ist (s. Tabelle 4.6).



**Abbildung 4.12:** Bildung des 1-Hexin Dimers **4b**.

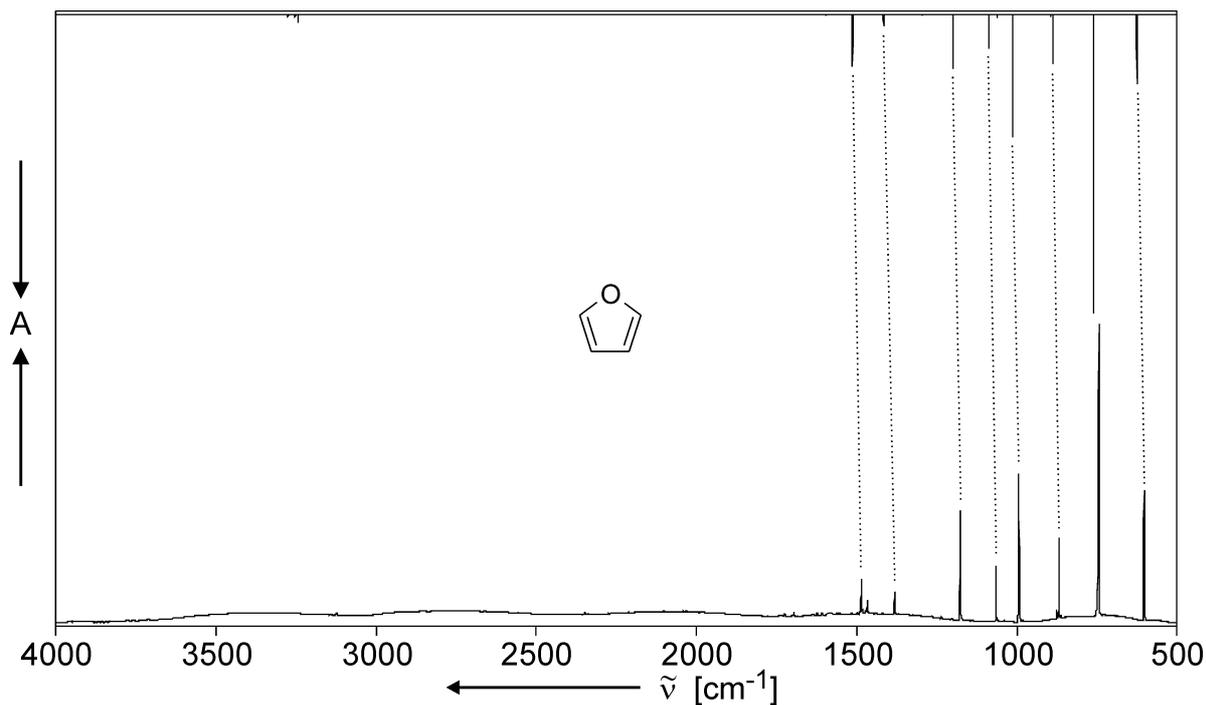


**Abbildung 4.13:** Vergleich des berechneten Spektrums des Dimers aus Furan und 1-Hexin **5** (oben) mit den berechneten Spektren der beiden Monomere **3** und **4a** (unten); alle Spektren berechnet auf B3LYP/cc-pVTZ-Niveau. Die Bereiche a-c des Spektrums, die durch die Aggregation am stärksten beeinflusst werden, sind grau unterlegt.

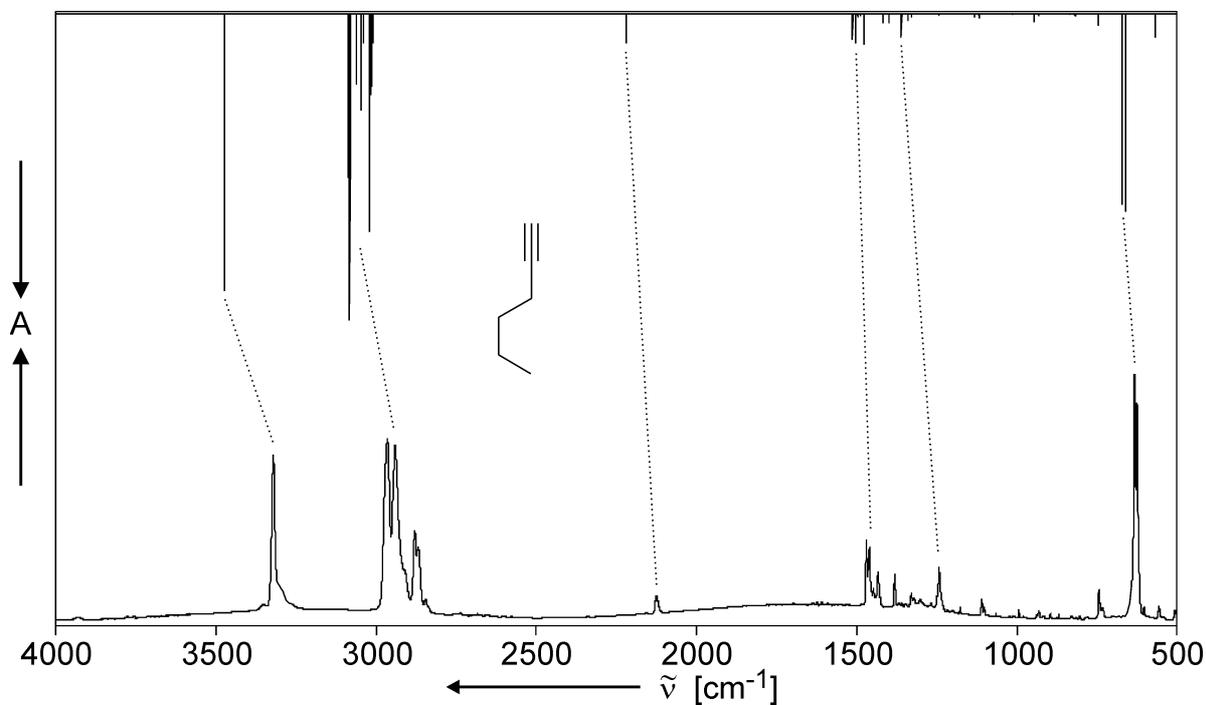
### 4.3.3 Ergebnisse der Experimente

Zunächst wurden beide Substanzen einzeln bei verschiedenen Bedingungen matrixisoliert. Bei Furan **3** erhält man, unabhängig von den Bedingungen, ein Spektrum, das sich eindeutig als Monomer identifizieren lässt (s. Abbildung 4.14). Bei längeren Pulszeiten zeigt sich lediglich eine Verbreiterung der Banden. Auch beim Tempern findet man erwartungsgemäß keine Veränderung des Spektrums, ausgenommen einer generellen Abnahme der Banden durch das Abdampfen der Matrix.

Für das 1-Hexin Monomer **4a** findet man bereits bei sehr kurzen Pulszeiten (300  $\mu$ s) relativ breite Banden. Dieses ist darauf zurückzuführen, dass die Kohlenstoffkette des Alkins sehr flexibel ist und in verschiedenen Konformationen ausgefroren wird, welche über leicht unterschiedliche Schwingungsspektren verfügen. Das experimentelle Spektrum stimmt sehr gut mit dem berechneten Spektrum überein (s. Abbildung 4.15).



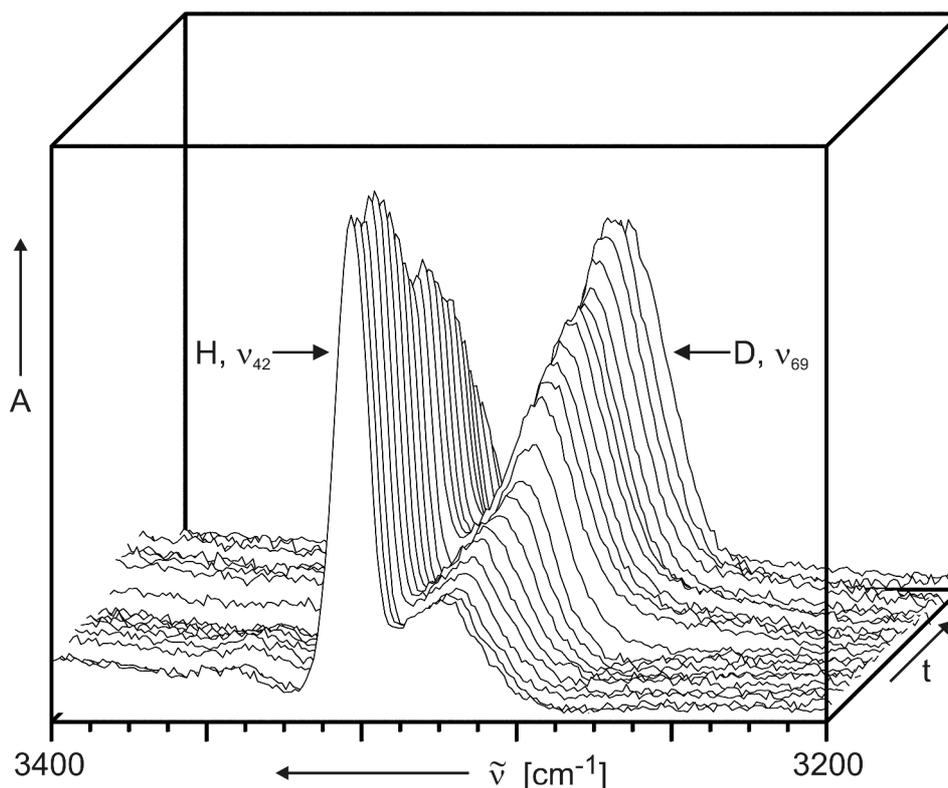
**Abbildung 4.14:** IR-Spektrum des matrixisolierten Furans **3**; **oben:** berechnetes Spektrum (B3LYP/cc-pVTZ); **unten:** experimentelles Spektrum (Pulsdeposition, 1 % Furan in Argon, Pulsdauer 300  $\mu\text{s}$ , Pulsfrequenz 5 Hz, Gastemperatur RT; *MG179A11.0*).



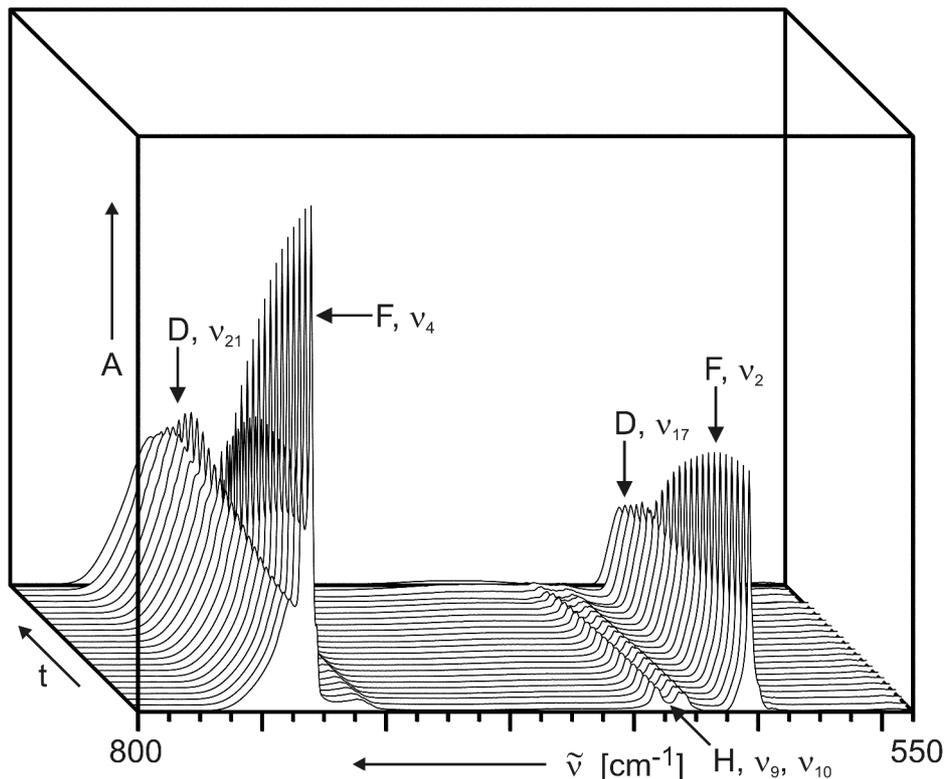
**Abbildung 4.15:** IR-Spektrum des matrixisolierten monomeren 1-Hexins **4a**; **oben:** berechnetes Spektrum (B3LYP/cc-pVTZ); **unten:** experimentelles Spektrum (Pulsdeposition, 0.5 % 1-Hexin in Argon, Pulsdauer 300  $\mu\text{s}$ , Pulsfrequenz 5 Hz, Gastemperatur RT; *MG181A11.0*).

Theoretisch besteht für das 1-Hexin die Möglichkeit der Bildung eines T-förmigen Dimers mit einer C-H $\cdots\pi$  Wasserstoffbrückenbindung, wie es vom Acetylen **6** bekannt ist. Tempert man das matrixisolierte monomere 1-Hexin **4a**, so lässt sich jedoch ebenfalls keine Änderung des Spektrums beobachten. Eine Selbstaggregation des 1-Hexins **4** während des *free warm-up* kann daher ausgeschlossen werden. Dies steht im Einklang mit den quantenchemischen Rechnungen, nach denen die Bildung des Dimers **4b** energetisch ungünstig ist (s.o.).

Für die Untersuchung der Aggregation wurden Gasgemische von Furan **3** und 1-Hexin **4** im Verhältnis von 2:1, 1:1 und 1:2 und einem 50 bis 150fachen Überschuss an Argon gepulst depositioniert. Die so erhaltenen Matrizes wurden anschließend getempert (*free warm-up*). Es zeigte sich, dass die während des Temperns zu beobachtenden Veränderungen unabhängig vom Mischungsverhältnis der beiden Substanzen sind. Die Depositionsspektren zeigen bereits einen geringen Anteil an Dimer.



**Abbildung 4.16:** Tempern (*free warm-up*) des Gemisches von Furan **3** und 1-Hexin **4** (H) in einer Argon Matrix, Bildung des Dimers **5** (D); Bereich der CH-Streckschwingungen (MG183A12.x).



**Abbildung 4.17:** Tempern (*free warm-up*) des Gemisches von Furan **3** (F) und 1-Hexin **4** (H) in einer Argon Matrix, Bildung des Dimers **5** (D); Bereich der Deformationsschwingungen (MG183A12.x).

Die Veränderungen im Verlaufe des Temperns stimmen sehr gut mit den Vorhersagen aus den quantenchemischen Rechnungen überein. Die Intensität der C-H-Streckschwingung des Alkins (Bereich a in Abbildung 4.13) bei  $3320.8\text{ cm}^{-1}$  nimmt ab, gleichzeitig entsteht eine neue Bande bei  $3286.5\text{ cm}^{-1}$ . (s. Abbildung 4.16). Die Bande der C≡C-Streckschwingung des Alkins (Bereich b) bei  $2145.4\text{ cm}^{-1}$  nimmt während des Temperns ab (ohne Abbildung). Im Bereich c lässt sich neben einer Abnahme der C≡C-H-Deformationsschwingungen bei  $632.8$  und  $624.2\text{ cm}^{-1}$  eine leichte Blauverschiebung der *out-of-plane*-Deformationsschwingungen des Furans von  $744.3$  nach  $750.9\text{ cm}^{-1}$  sowie von  $602.9$  nach  $603.7\text{ cm}^{-1}$  beobachten (s. Abbildung 4.17).

#### 4.3.4 Diskussion

Bei der schwachen Wechselwirkung zwischen Furan **3** und 1-Hexin **4** handelt es sich nach der Definition von Pimentel und McClellan um eine Wasserstoffbrückenbindung, nach der Definition von Pauling hingegen nicht (vgl. Kap. 3.1, S. 9). Die Experimente zeigen in

Übereinstimmung mit den quantenchemischen Rechnungen, dass insbesondere die Streck- und Deformationsschwingungen des Alkin-Wasserstoffes von der Aggregation betroffen sind. Daher ist es legitim, auch diese Wechselwirkung als Wasserstoffbrücke zu bezeichnen.

Die durchgeführten Experimente zeigen, dass die gepulste Deposition auch bei Systemen mit zwei verschiedenen leichtflüchtigen Substanzen geeignet ist, die Moleküle monomer in der Matrix zu isolieren. Aus den Experimenten geht ferner hervor, dass es mit den verwendeten Methoden möglich ist, die Aggregation von Komplexen zu beobachten, die nur schwache Wasserstoffbrückenbindungen ausbilden.

Die Daten für Furan **3** sind in Tabelle 4.7 aufgeführt, die für 1-Hexin **4** in Tabelle 4.8. Die Veränderungen, die während des *free warm-up* beobachtet werden konnten, stehen in sehr guter Übereinstimmung mit den quantenchemischen Rechnungen (s. Tabelle 4.9). Die Unabhängigkeit der Ergebnisse vom Konzentrationsverhältnis der beiden Komponenten spricht ebenfalls für die Bildung eines 1:1 Dimers **5** aus Furan und 1-Hexin, auch wenn die berechnete Aggregationsenergie relativ gering ist.

**Tabelle 4.7:** IR-Absorptionen des Furan Monomers **3**, Vergleich der experimentellen Daten mit berechneten Schwingungen. Die berechneten Schwingungen von nicht beobachteten Banden (zu geringe Intensität) sind nicht aufgeführt.

Mode	B3LYP/cc-pVTZ			Ar-Matrix	Zuordnung
	$\tilde{\nu}$ (cm <sup>-1</sup> )	I <sub>rel</sub>	Sym.	$\tilde{\nu}_{\text{Exp}}$ (cm <sup>-1</sup> )	
16	1512.1	17	A <sub>1</sub>	1485.3	$\nu_{\text{s}}(\text{C}=\text{C})$
15	1415.2	4	A <sub>1</sub>	1382.1	$\nu(\text{C}-\text{C})$
13	1199.2	18	B <sub>2</sub>	1177.7	$\nu_{\text{as}}(\text{C}-\text{O})$
11	1086.5	11	A <sub>1</sub>	1064.9	$\nu_{\text{s}}(\text{C}-\text{C})+\nu_{\text{s}}(\text{C}-\text{O})$
9	1014.2	40	A <sub>1</sub>	993.5	$\delta_{\text{s}}(\text{CC}-\text{H})$
6	887.6	16	A <sub>1</sub>	869.1	$\delta_{\text{s}}(\text{C}-\text{O}-\text{C})$
4	760.4	100	B <sub>1</sub>	744.3	$\gamma(\text{CC}-\text{H})$
2	624.7	23	B <sub>1</sub>	602.9	$\gamma(\text{C}-\text{O}-\text{C})$

**Tabelle 4.8:** IR-Absorptionen des 1-Hexin Monomers **4a**, Vergleich der experimentellen Daten mit berechneten Schwingungen. Die berechneten Schwingungen von nicht beobachteten Banden (zu geringe Intensität) sind nicht aufgeführt.

B3LYP/cc-pVTZ			Ar-Matrix	Zuordnung
Mode	$\tilde{\nu}$ (cm <sup>-1</sup> )	I <sub>rel</sub>	$\tilde{\nu}_{\text{Exp}}$ (cm <sup>-1</sup> )	
42	3472.9	90	3320.8	v(C1-H)
41	3086.4	53		v <sub>as</sub> (C6-H)
40	3081.8	100		v <sub>as</sub> (C4/5/6-H)
39	3060.9	23		v <sub>as</sub> (C3/4/5/6-H)
38	3046.4	31	2966.3	v <sub>as</sub> (C3-H)
37	3040.2	9	2941.9	v <sub>as</sub> (C3/4/5-H)
36	3022.0	71	2880.9	v <sub>s</sub> (C6-H)
35	3017.4	26	2870.1	v <sub>s</sub> (C4-H)
34	3014.0	23		v <sub>s</sub> (C3-H)
33	3009.4	9		v <sub>s</sub> (C4/5-H)
32	2218.0	9	2145.4	v(C≡C)
31	1512.5	8	1470.2	δ <sub>s</sub> (H-C4/5/6-H)
30	1501.4	9	1459.9	δ <sub>as</sub> (H-C6-H)
27	1476.2	9	1433.9	δ <sub>s</sub> (H-C3-H)
24	1360.4	7	1330.3	τ(HC4H)+ω(HC3H)
10	670.6	62	632.8	δ(C≡C-H)
9	659.2	64	624.2	δ(C≡C-H)
8	567.0	7	556.5	δ(C≡C-C)

**Tabelle 4.9:** IR-Absorptionen des 1:1 Dimers **5** von Furan und 1-Hexin, Vergleich der experimentellen Daten mit berechneten Schwingungen. Die berechneten Schwingungen von nicht beobachteten Banden (zu geringe Intensität) sind nicht aufgeführt. Die Indizes H bzw. F geben an, ob die Schwingung zum Furan- oder zum 1-Hexin-Teil des Dimers gehört

B3LYP/cc-pVTZ			Ar-Matrix		Zuordnung
Mode	$\tilde{\nu}$ (cm <sup>-1</sup> )	I <sub>rel</sub>	$\tilde{\nu}_{\text{Exp}}$ (cm <sup>-1</sup> )		
69	3440.4	100	3286.5		$\nu_{\text{H}}(\text{C1-H})$
64	3085.8	17			$\nu_{\text{H,as}}(\text{C6-H})$
63	3081.8	33			$\nu_{\text{H,as}}(\text{C4/5/6-H})$
62	3060.6	7			$\nu_{\text{H,as}}(\text{C3/4/5/6-H})$
61	3045.8	10	2964.1		$\nu_{\text{H,as}}(\text{C3-H})$
60	3039.8	4	2940.1		$\nu_{\text{H,as}}(\text{C3/4/5-H})$
59	3021.6	24	2879.3		$\nu_{\text{H,s}}(\text{C6-H})$
58	3016.9	10	2867.7		$\nu_{\text{H,s}}(\text{C4-H})$
57	3012.8	8			$\nu_{\text{H,s}}(\text{C3-H})$
56	3009.5	2			$\nu_{\text{H,s}}(\text{C4/5-H})$
53	1513.8	11	1487.2		$\nu_{\text{F,s}}(\text{C=C})$
46	1415.5	1	1381.7		$\nu_{\text{F}}(\text{C-C})$
38	1197.0	9	1174.9		$\nu_{\text{F,as}}(\text{C-O})$
34	1082.0	10	1062.8		$\nu_{\text{F,s}}(\text{C-C})+\nu_{\text{F,s}}(\text{C-O})$
30	1013.0	20	991.9		$\delta_{\text{F,s}}(\text{CC-H})+\nu_{\text{H}}(\text{C3-C4})$
25	889.1	9	869.3		$\delta_{\text{F,s}}(\text{C-O-C})$
21	760.7	46	750.9		$\gamma_{\text{F}}(\text{CC-H})$
17	661.1	14	628.2		$\delta_{\text{H}}(\text{C}\equiv\text{C-H})$
16	621.4	8	603.7		$\gamma_{\text{F}}(\text{C-O-C})$

## 4.4 Aceton und Acetylen

### 4.4.1 Einführung

Das kleinste Molekül in der Reihe der Alkine ist das Acetylen **6**. Es bildet mit Luft Gemische, welche zwischen 1.5 und 80 Vol.-% explosiv sind. Auch rein ist es bereits ab einem Druck von 2000 mbar explosiv.<sup>[141]</sup> Deshalb wird Acetylen **6** zur Lagerung in Aceton **7** gelöst.

In der Matrixspektroskopie wird Acetylen **6** zum Dotieren von Matrices verwendet, z.B. als Abfangreagenz für reaktive Moleküle.<sup>[142-144]</sup> Die erste matrixspektroskopische Untersuchung von reinem Acetylen erfolgte 1970 durch Bagdanskis und Bulanin.<sup>[134, 135]</sup> Bereits bei diesen ersten Untersuchungen wurden neben dem Monomer **6a** auch Aggregate des Acetylen beobachtet.

Die Natur dieser Aggregate wurde insbesondere durch Mikrowellen- und hochauflösende Rotations-Schwingungsspektroskopie untersucht. Für das Dimer wurden eine T-förmige,  $C_{2v}$ -symmetrische Struktur **6b**<sup>[145, 146]</sup> und eine verschoben-parallele,  $C_{2h}$ -symmetrische Struktur **6c**<sup>[147, 148]</sup> vorgeschlagen. Fraser et.al. zeigten, gestützt auf Sub-Doppler IR- und Mikrowellen-Spektroskopie, dass das Dimer **6b** vorliegt, welches aber durch vier isoenergetische Minima tunnelt.<sup>[149]</sup> Das Dimer **6c** stellt hierbei einen Übergangszustand dar. Dies steht in Einklang mit *ab-initio* Rechnungen, die für das Dimer **6b** ein Minimum und für das Dimer **6c** einen Übergangszustand ergaben.<sup>[136]</sup> In den Rotations-Schwingungsspektren wurden zudem ein planares Trimer **6d** und auch höhere Aggregate beobachtet.<sup>[148, 150, 151]</sup>

Die Aggregation des Acetons **7** wurde beispielsweise durch Messung der thermischen Konduktivität des Dampfes<sup>[152]</sup> und mittels quantenchemischer Rechnungen<sup>[153, 154]</sup> untersucht.

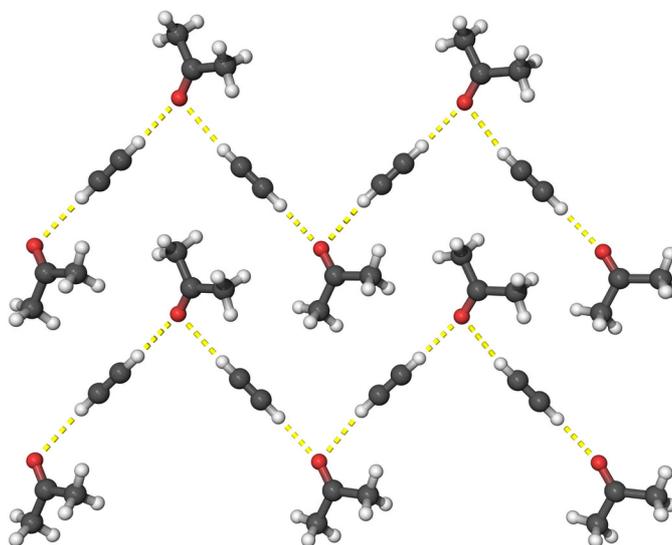


Abbildung 4.18: Acetylen Monomer **6a**, Dimere **6b** und **6c** sowie Trimer **6d**; Aceton **7**.

Untersuchungen an Acetylen **6** in Inertgas-Matrizes beinhalten beispielsweise die photochemischen Produkte der Bestrahlung des Monomers **6a** und des Dimers **6b** in Matrizes durch Maier und Lautz.<sup>[132]</sup>

Wasserstoffverbrückte Aggregate des Acetylens **6** und seiner Derivate wurden ebenfalls bereits untersucht, beispielsweise die Aggregate mit Halogenwasserstoffen<sup>[93, 155]</sup> oder mit Sauerstoff- und Stickstoff-Basen.<sup>[84, 85, 90, 156]</sup> Auch wasserstoffverbrückte Aggregate des Acetons **7** wurden bereits untersucht, insbesondere solche mit Halogenwasserstoffen<sup>[83, 91, 157]</sup> oder Wasser<sup>[158, 159]</sup> als Donor. DeLaat und Ault untersuchten bereits den Komplex von Acetylen und Aceton,<sup>[90]</sup> wobei zwar für Acetylen **6** verschobene Banden beobachtet wurden, nicht aber für das Aceton **7**. Auch Experimente mit deuteriertem Acetylen führten zu keinen weiteren Erkenntnissen über die gebildeten Aggregate. Die Autoren verwendeten für ihre Experimente die *twin jet* Deposition.

Boese und Mitarbeitern gelang es, Acetylen **6** und Aceton **7** zu kokristallisieren und die erhaltenen Kristalle röntgenspektroskopisch zu untersuchen.<sup>[2, 160]</sup> Sie fanden eine Schichtstruktur, bei der jede Schicht aus zwei Reihen Aceton besteht, welche zickzackförmig durch Acetylenmoleküle verbunden sind (Abbildung 4.19).



**Abbildung 4.19:** Ausschnitt aus dem Cokristall von Acetylen **6** und Aceton **7**.

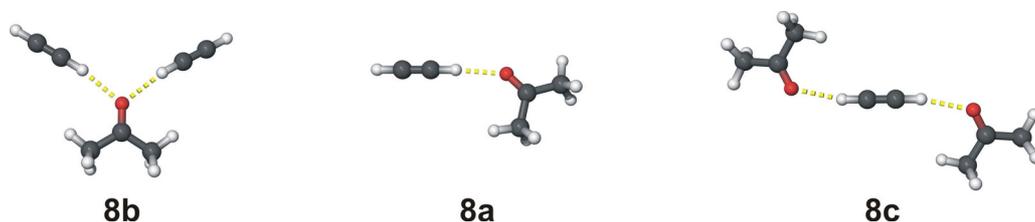
Die Matrixspektroskopie unter Verwendung der gepulsten Deposition und des Temprens mittels *free warm-up* ist eine geeignete Methode, die Bildung der Aggregate von Acetylen **6** und Aceton **7** zu untersuchen. Die Experimente mit Furan **3** und 1-Hexin **4** (s. Kap. 4.3) haben

bereits gezeigt, dass die gepulste Deposition auch für die Untersuchung gemischter Aggregate geeignet ist. Für das System von Acetylen **6** und Aceton **7** ist neben der Bildung gemischter Aggregate die Bildung des T-förmigen Acetylen-Dimers **6b** als Konkurrenzreaktion zu erwarten. Die beiden möglichen Aggregationswege werden zunächst durch quantenchemische Rechnungen verglichen.

#### 4.4.2 Ergebnisse der quantenchemischen Betrachtung

Neben dem gemischten Dimer **8a** wurden zwei Trimere **8b** und **8c** berechnet, die Ausschnitte aus der Schichtstruktur des Cokristalls von Acetylen und Aceton (s. Abbildung 4.19) widerspiegeln.

Auf dem B3LYP/cc-pVTZ Niveau liegen die Schweratome bei allen gemischten Aggregaten nahezu in einer Ebene, mit C=O...H-C Diederwinkeln nahe Null. Die Symmetrie wird zudem durch Rotation der Methylgruppen des Acetons um die C-C-Achse erniedrigt, so dass das Dimer **8a** C<sub>1</sub>-Symmetrie aufweist und die beiden Trimere **8b** und **8c** C<sub>2</sub>-symmetrisch sind.

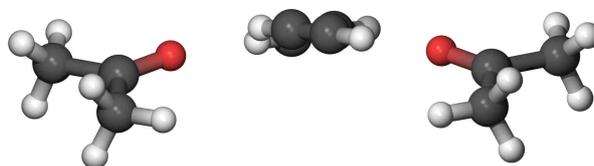


**Abbildung 4.20:** Aggregate zwischen Acetylen und Aceton, Dimer **8a** und zwei Trimere **8b** und **8c**.

Auf dem MP2/6-311++G(d,p) Niveau erhöhen sich die Diederwinkel auf Werte zwischen 0.7° (**8c**) und 6.0° (**8b**). Die Acetylen-Moleküle des Trimers **8b** neigen sich hier zur gleichen Seite aus der Ebene des Aceton-Moleküls, so dass das Molekül nur noch C<sub>1</sub>-symmetrisch ist.

In der Kristallstruktur liegen die Acetylen-Moleküle annähernd in einer Ebene. Die Aceton-Moleküle sind zu einer Seite aus dieser Ebene herausgeneigt und etwas um die C=O-Bindung gedreht (s. Abbildung 4.21). Diese Struktur wird von den MP2-Rechnungen besser wiedergegeben als von denen auf B3LYP-Niveau. Es ist jedoch zu bedenken, dass die Anordnung der Aceton-Moleküle im Kristall stark von der reißverschlussartigen Verzahnung der einzelnen Schichten und den abstoßenden Wechselwirkungen zwischen den

Acetonmolekülen beeinflusst wird. Diese Einflüsse liegen weder in der Gasphase noch in der Matrix vor.



**Abbildung 4.21:** Seitenansicht einer Schicht im Cokristall von Acetylen und Aceton.

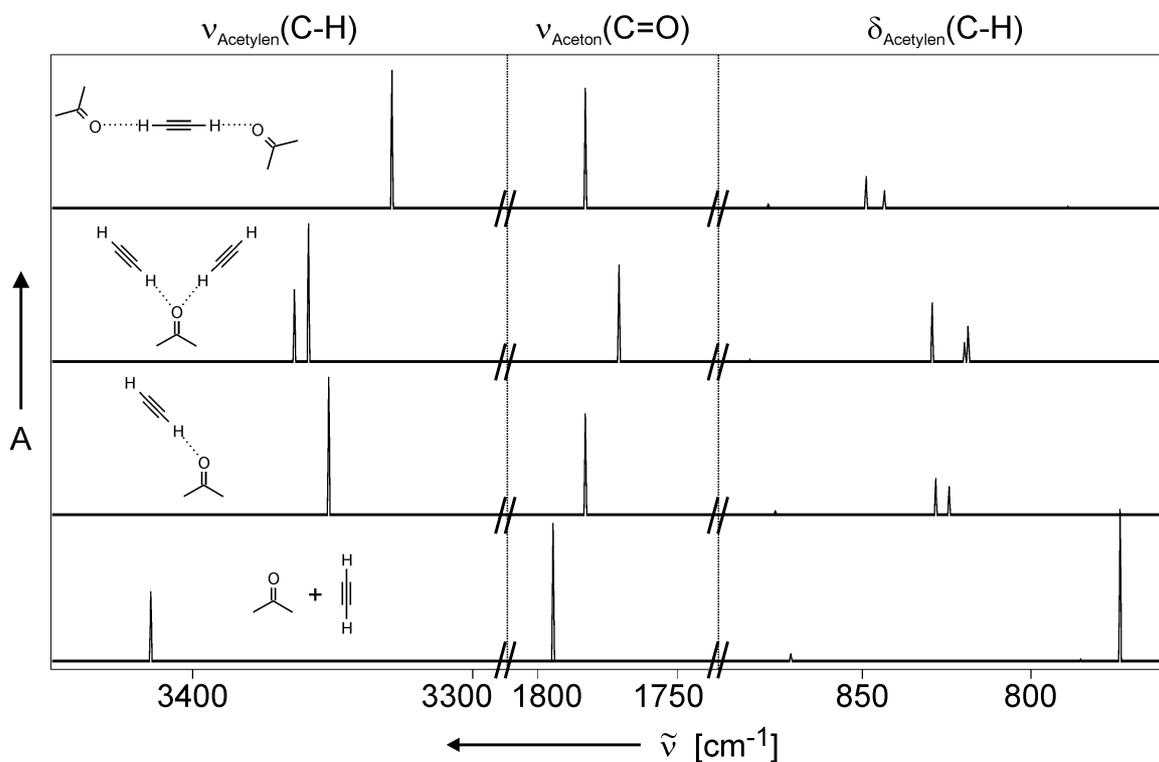
Die Aggregationsenergien der einzelnen Aggregate, berechnet auf verschiedenen quantenchemischen Niveaus, sind in Tabelle 4.10 aufgeführt. In allen Fällen ist die Ausbildung der C-H...O Wasserstoffbrücke in den gemischten Aggregaten **8** energetisch bevorzugt gegenüber der C-H... $\pi$  Wasserstoffbrücke der Acetylen-Aggregate **6b** und **6d**.

Ein Vergleich der berechneten Schwingungsspektren der einzelnen Aggregate gibt Aufschluss darüber, in wieweit ihre Unterscheidung IR-spektroskopisch möglich ist. Diesen Vergleich

**Tabelle 4.10:** Vergleich der Aggregationsenergien der verschiedenen Aggregate, berechnet auf verschiedenen quantenchemischen Niveaus. Alle Energien in kcal/mol, inkl. ZPE. Die Werte in Klammern geben die Aggregationsenergie pro Wasserstoffbrücke an.

	Methode:	B3LYP	B3LYP	mPW1LYP	MP2
Aggregat	Basissatz:	6-311++G(d,p)	cc-pVTZ	6-311++G(d,p)	6-311++G(d,p)
<b>6b</b>		0.38	0.51	0.84	1.34
<b>6d</b>		1.34 (0.45)	1.63 (0.54)	2.60 (0.87)	4.20 (1.40)
<b>8a</b>		2.28	2.43	2.95	2.82
<b>8b</b>		3.91 (1.96)	4.37 (2.19)	5.32 (2.66)	5.41 (2.70)
<b>8c</b>		4.01 (2.01)	4.42 (2.23)	5.42 (2.71)	5.65 (2.82)

der berechneten Spektren der Monomere **6a** und **7** mit den berechneten Spektren des Dimers **8a** sowie der Trimere **8b** und **8c** in den spektroskopisch wichtigsten Bereichen zeigt Abbildung 4.22. Man erkennt, dass im Bereich der acetylenischen Streck- und Deformationsschwingungen eine Unterscheidung der verschiedenen Aggregate möglich sein sollte. Problematischer ist der Bereich der Carbonyl-Streckschwingung des Acetons **7**. Die Differenz zwischen den berechneten Schwingungen des Dimers **8a** und des Trimers **8c** beträgt auf dem B3LYP/cc-pVTZ Niveau nur  $0.1 \text{ cm}^{-1}$  und auf dem MP2/6-311++G(d,p) Niveau  $0.9 \text{ cm}^{-1}$ .

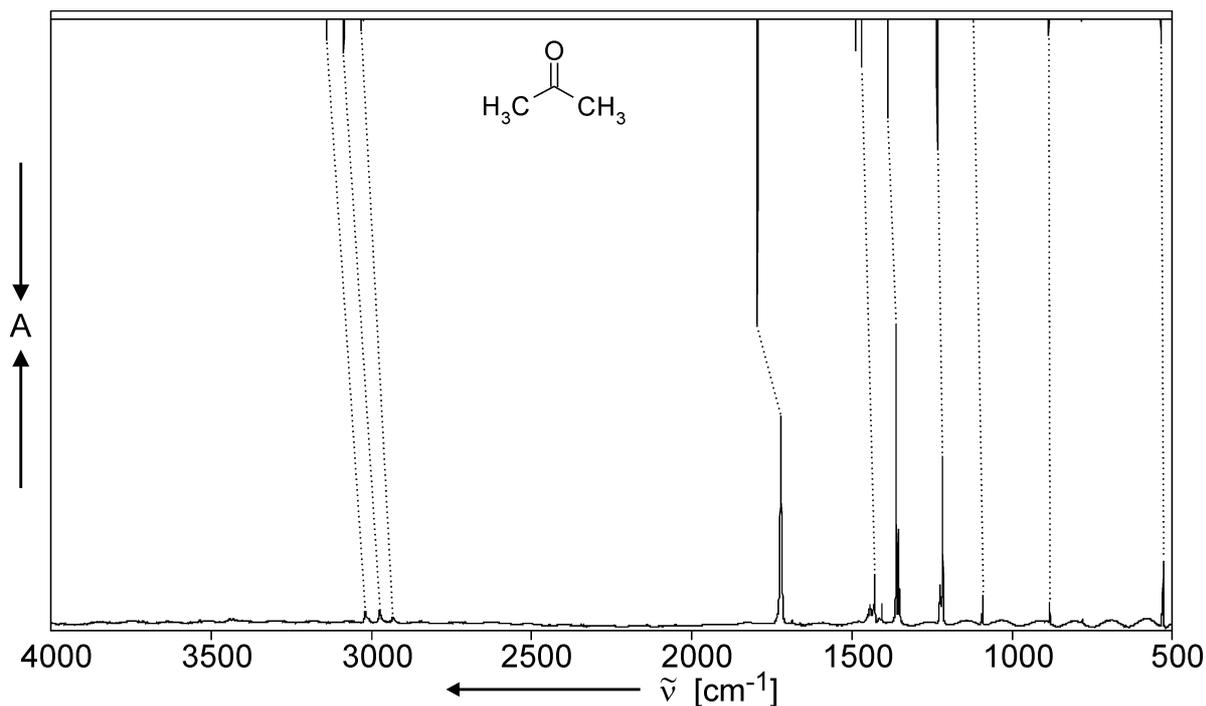


**Abbildung 4.22:** Vergleich der berechneten Spektren (B3LYP/cc-pVTZ, von unten nach oben: Spektrum von Aceton **7** und monomerem Acetylen **6a**, Dimer **8a**, Trimer **8b**, Trimer **8c**), **links:** Bereich der CH-Streckschwingung des Acetylen, **Mitte:** Bereich der Carbonyl-Streckschwingung des Acetons, **rechts:** Bereich der CH-Deformationsschwingung des Acetylen.

Im Bereich der acetylenischen C-H-Streckschwingungen und der Carbonyl-Streckschwingungen des Acetons liefern B3LYP und MP2 vergleichbare Ergebnisse, bei den C-H-Deformationsschwingungen weichen die berechneten Spektren aufgrund der Unterschiede in den Geometrien jedoch stark voneinander ab.

### 4.4.3 Ergebnisse der Experimente

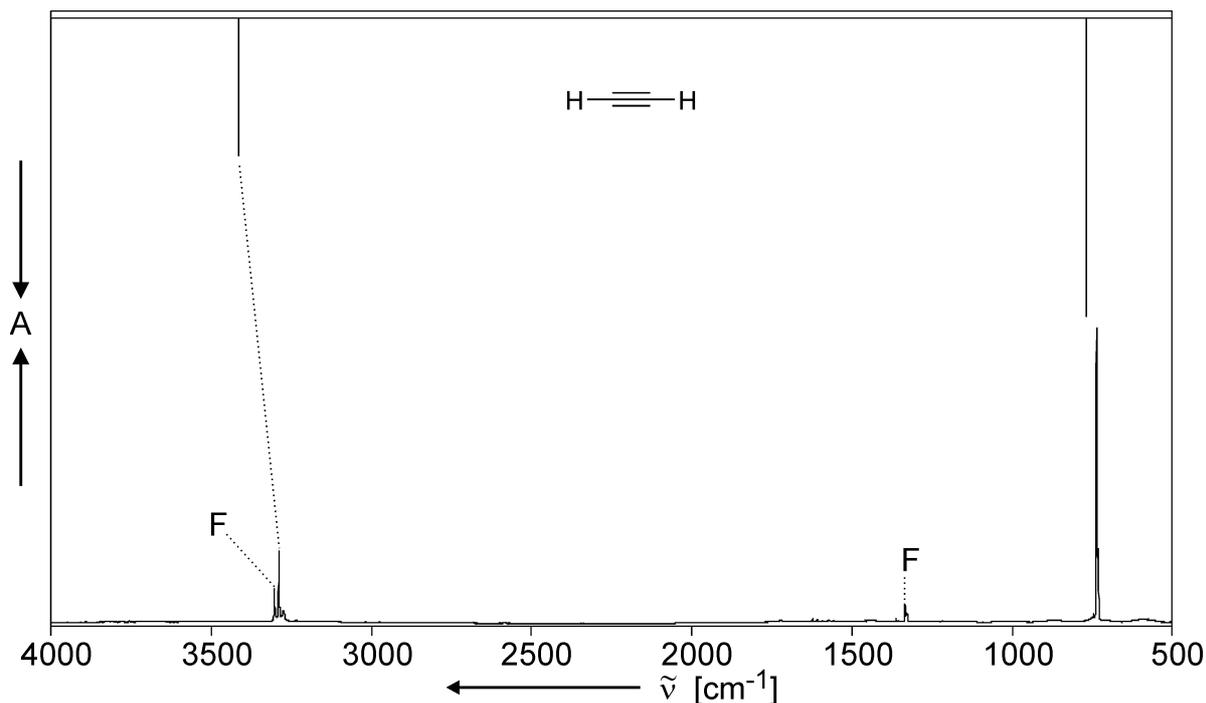
Es wurden zunächst die Reinsubstanzen einzeln matrixisoliert. Sowohl von Aceton **7** (s. Abbildung 4.23) als auch von Acetylen **6** (s. Abbildung 4.24) konnte mittels gepulster Deposition eine Matrix erzeugt werden, welche nur das jeweilige Monomer enthält.



**Abbildung 4.23:** IR-Spektrum des matrixisolierten Acetons **7**; **oben:** berechnetes Spektrum (B3LYP/cc-pVTZ); **unten:** experimentelles Spektrum (Pulsdeposition mit Newport-Pulsventil, 1 % Aceton in Argon, Pulsdauer 400  $\mu$ s, Pulsintensität 400  $\mu$ s, Pulsfrequenz 6.55 Hz, Gastemperatur RT; MG327A21.0).

Die erhaltenen Matrizes wurden mittels *free warm-up* getempert. Für das Aceton **7** konnte hierbei keine Aggregation beobachtet werden, obwohl entsprechende Dimere bekannt sind.<sup>[152]</sup> Es trat lediglich eine leichte Bandenverbreiterung ein, welche auf das allmähliche Abdampfen der Matrix zurückzuführen ist.

Beim Tempern des Acetylen Monomers **6a** wurde hingegen eine vielfältige Aggregation beobachtet. Zwischen 3270 und 3220  $\text{cm}^{-1}$  entsteht eine breite Bande mit mehreren Maxima, die verschiedenen Aggregaten des Acetylens<sup>[145-149, 151]</sup> entsprechen (s. Abbildung 4.25-a).

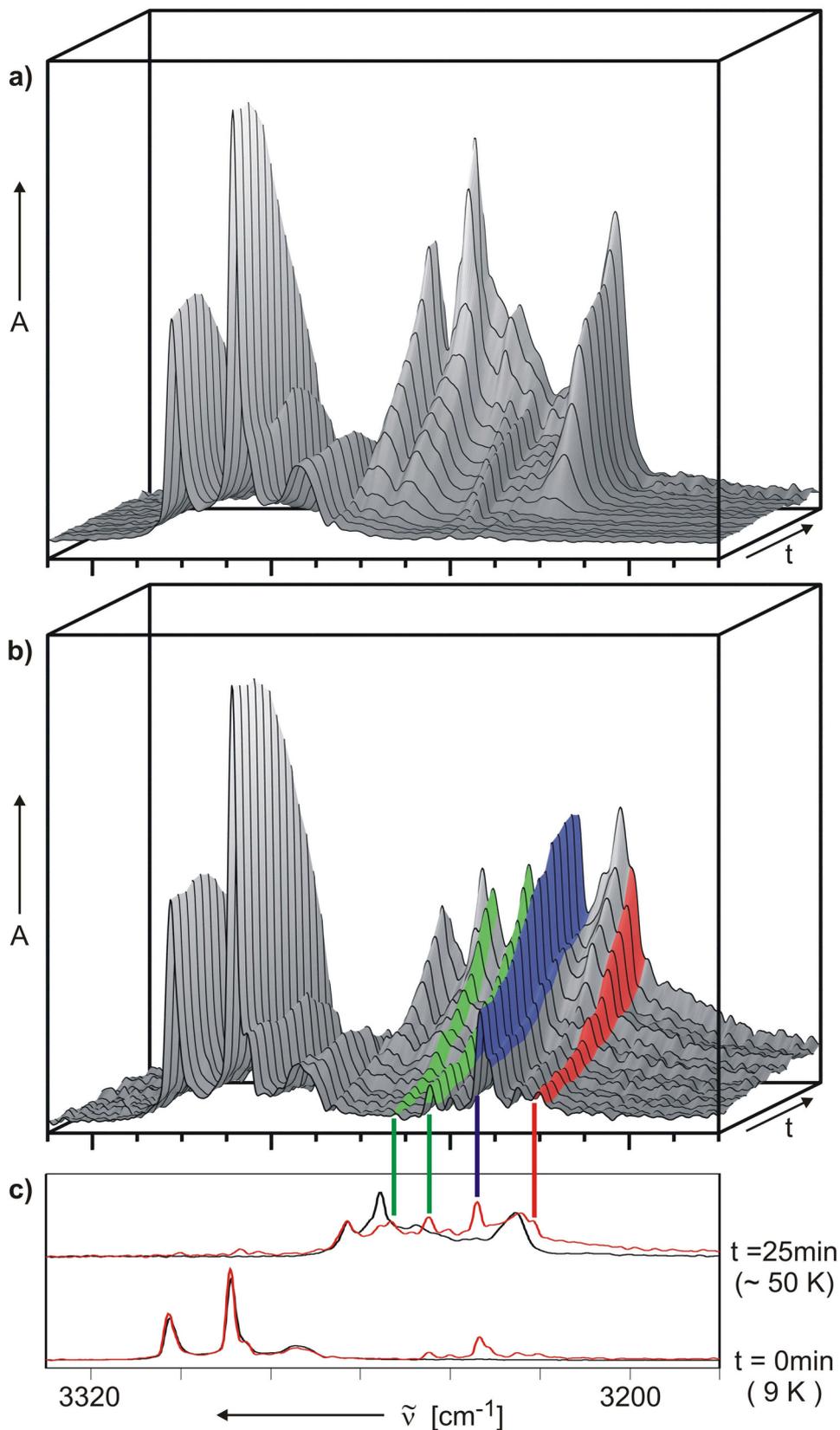


**Abbildung 4.24:** IR-Spektrum des matrixisolierten Acetylen Monomers **6a**; **oben:** berechnetes Spektrum (B3LYP/cc-pVTZ); **unten:** experimentelles Spektrum, die mit **F** gekennzeichneten Banden werden durch Fermi-Resonanz hervorgerufen (Pulsdeposition mit Newport-Pulsventil, 1 % Acetylen in Argon, Pulsdauer 400  $\mu$ s, Pulsintensität 400  $\mu$ s, Pulsfrequenz 6.5 Hz, Gastemperatur RT; MG325A11.0).

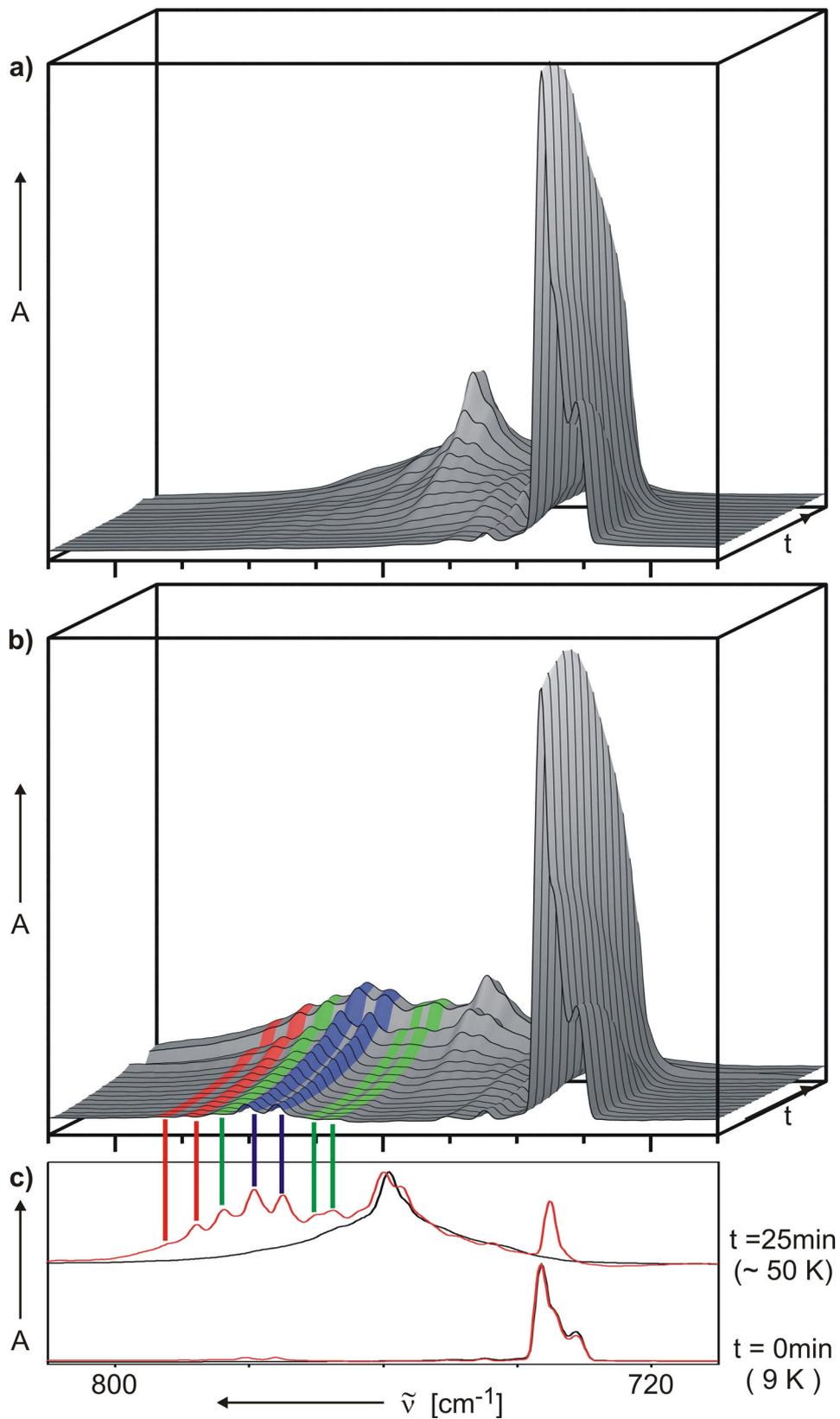
Im Bereich von 760 bis 730  $\text{cm}^{-1}$  kann man die Abnahme der C-H-Deformationsschwingung des monomeren Acetylen **6a** und die Bildung einer neuen, breiten Bande beobachten, die den Deformationsschwingungen der Aggregate zugeordnet werden kann (s. Abbildung 4.26-a).

Für die Untersuchung der gemischten Aggregation wurden Acetylen **6** und Aceton **7** in unterschiedlichen Verhältnissen (2:1, 1:1, 1:2) gemischt, wobei das Mischungsverhältnis anhand des Druckes in der Gasmischeinrichtung geregelt wurde. Die einzelnen Gemische wurden mit Argon verdünnt und dann mittels gepulster Deposition matrixisoliert.

In den Depositionsspektren wurden bereits einige schwache Banden beobachtet, welche sich weder dem Acetylen **6** noch dem Aceton **7** zuordnen lassen. Diese Banden, welche gemischten Aggregaten zugeordnet werden können, nahmen während des *free warm-up* noch an Intensität zu, gleichzeitig entstanden aber auch die Banden der Aggregate des Acetylen, welche schon beim Tempern des reinen Acetylen beobachtet wurden (s. Abbildung 4.25-b und c, Abbildung 4.26-b und c).



**Abbildung 4.25:** a) Tempern (*free warm-up*) von monomerem Acetylen **6a**. b) Tempern (*free warm-up*) einer 1:1 Mischung von Acetylen und Aceton. Nicht in a) vorhandene Banden sind farblich hervorgehoben, Banden gleicher Farben gehören zur gleichen Spezies. c) Verdeutlichung der neuen Banden, schwarz: reine Acetylen-Matrix, rot: Matrix der 1:1 Mischung.



**Abbildung 4.26:** **a)** Tempern (*free warm-up*) von monomerem Acetylen **6a**. **b)** Tempern (*free warm-up*) einer 1:1 Mischung von Acetylen und Aceton. Nicht in a) vorhandene Banden sind farblich hervorgehoben, Banden gleicher Farben gehören zur gleichen Spezies. **c)** Verdeutlichung der neuen Banden, schwarz: reine Acetylen-Matrix, rot: Matrix der 1:1 Mischung.

Durch Vergleich der Aggregationsspektren des reinen Acetylen mit denen der Gemische konnten mehrere Banden im Bereich der C-H-Streck- und Deformationsschwingungen des Acetylen sowie der C=O-Streckschwingung des Acetons ermittelt werden, welche nur beim Tempern des Gemisches auftreten.

#### 4.4.4 Diskussion

Sowohl Acetylen **6** als auch Aceton **7** konnten monomer in einer Matrix isoliert werden. Die erhaltenen Spektren stimmen gut mit den berechneten Spektren und Literaturdaten überein. Die Daten des Acetylen Monomers **6a** sind in Tabelle 4.11 aufgeführt, die des Acetons **7** in Tabelle 4.12.

**Tabelle 4.11:** IR-Absorptionen des Acetylen Monomers **6a**, Vergleich der experimentellen Daten mit berechneten Schwingungen und Literaturdaten.<sup>[161]</sup> Die Raman-aktiven Banden (R) sind aufgrund ihrer Beteiligung an der Fermi-Resonanz mit aufgeführt.

Mode	B3LYP/cc-pVTZ			Ar-Matrix		Zuordnung
	$\tilde{\nu}$ (cm <sup>-1</sup> )	I <sub>rel</sub>	Sym.	$\tilde{\nu}_{\text{Exp}}$ (cm <sup>-1</sup> )	$\tilde{\nu}_{\text{Lit}}$ (cm <sup>-1</sup> )	
7	3518.3	0	$\sigma_g$	(R)	3373.7	$\nu_s(\text{CH})$
					3302.2	3302.9a
6	3414.8	92	$\sigma_u$	3288.7	3285.5	$\nu_a(\text{CH})$
5	2071.8	0	$\sigma_g$	(R)	1973.8	$\nu_s(\text{CC})$
					1334.4	1334.5
3 & 4	767.9	100	$\pi_u$	736.3	736.7	$\delta_a(\text{CH})$
1 & 2	653.2	0	$\pi_g$	(R)	611.8	$\delta_s(\text{CH})$

**Tabelle 4.12:** IR-Absorptionen des Aceton Monomers **7**, Vergleich der experimentellen Daten mit berechneten Schwingungen und Literaturdaten.<sup>[162]</sup>

Mode	B3LYP/cc-pVTZ			Ar-Matrix		Zuordnung
	$\tilde{\nu}$ (cm <sup>-1</sup> )	I <sub>rel</sub>	Sym.	$\tilde{\nu}_{\text{Exp}}$ (cm <sup>-1</sup> )	$\tilde{\nu}_{\text{Lit}}$ (cm <sup>-1</sup> )	
24	3140.3	4	A <sub>1</sub>	3019.2	3018.6	$\nu_{\text{s}}(\text{H-CH}_2)$
23	3139.2	7	B <sub>2</sub>	3019.2	3018.6	$\nu_{\text{a}}(\text{H-CH}_2)$
22	3085.5	11	B <sub>1</sub>	2973.0	2972.6	$\nu_{\text{s}}(\text{H-CH-H})$
20	3033.2	4	A <sub>1</sub>	2932.2	2932.2	$\nu_{\text{s}}(\text{H-C})$
18	1794.2	100	A <sub>1</sub>	1721.1	1721.4	$\nu(\text{C=O})$
17	1488.1	10	B <sub>1</sub>	1428.9	1429.4	$\delta_{\text{a}}(\text{CH}_3)$
16	1470.5	16	A <sub>1</sub>	1406.7		$\delta_{\text{s}}(\text{CH}_3)$
13	1387.5	32	B <sub>2</sub>	1361.4	1361.6	$\gamma_{\text{a}}(\text{CH}_3)$
12	1386.9	10	A <sub>1</sub>	1354.0	1354.1	$\gamma_{\text{s}}(\text{CH}_3)$
11	1233.9	42	B <sub>2</sub>	1216.0	1216.6	$\nu_{\text{a}}(\text{C-C})$
10	1120.4	1	B <sub>1</sub>	1091.2	1091.7	$\gamma(\text{C}_3\text{O})$
7	884.8	5	B <sub>2</sub>	882.3	882.4	$\rho_{\text{a}}(\text{CH}_3)$
6	781.8	1	A <sub>1</sub>	781.0	780.9	$\nu_{\text{s}}(\text{C-C})$
5	535.3	8	B <sub>2</sub>	528.4	528.9	$\delta(\text{OCC})$

Beim Tempern von Matrices, die eine Mischung von Acetylen **6** und Aceton **7** enthielten, wurden mehrere neue Banden beobachtet. Dies lässt darauf schließen, dass hier mehrere Aggregate entstehen. Durch Integration konnten die meisten Banden einer von drei Gruppen (A [grün], B [blau], C [rot]; s. Tabelle 4.13) zugeordnet werden.

**Tabelle 4.13:** Zuordnung der beim Tempern des Gemisches aus Acetylen und Aceton beobachteten neuen Banden. Vergleich mit den jeweiligen berechneten Schwingungen auf dem B3LYP/cc-pVTZ Niveau.

Ar-Matrix		Zuordnung	B3LYP/cc-pVTZ
$\tilde{\nu}_{\text{Exp}} (\text{cm}^{-1})$	Integration		$\tilde{\nu}_{\text{Calc}} (\text{cm}^{-1})$
3253.1	A	Trimer <b>8b</b>	3363.6
3244.4	A	Trimer <b>8b</b>	3358.5
3234.0	B	Dimer <b>8a</b>	3351.4
3221.7	C	Trimer <b>8c</b>	3328.8
1717.5	-	Dimer <b>8a</b>	1782.6
		Trimer <b>8c</b>	1782.7
1713.3	A	Trimer <b>8b</b>	1770.7
792.2	C	Trimer <b>8c</b>	858.1
787.6	C	Trimer <b>8c</b>	851.7
783.5	A	Trimer <b>8b</b>	834.7
779.3	B	Dimer <b>8a</b>	833.4
774.9	B	Dimer <b>8a</b>	828.7
770.2	A	Trimer <b>8b</b>	823.0
767.8	A	Trimer <b>8b</b>	822.0

Bei einem Mischungsverhältnis von 1:1 war im Bereich der acetylenischen C-H-Streckschwingung die Bande der Gruppe B die intensivste, gefolgt von A und C. Bei Verdopplung der Konzentration des Acetylen gegenüber der des Acetons gewannen die beiden Banden der Gruppe A relativ zu den Banden der anderen beiden Gruppen an Intensität.

Die Verdopplung der Konzentration des Acetons gegenüber der des Acetylen führte hingegen zu einer leichten Erhöhung der relativen Intensität der Banden von Gruppe C.

Analoge Beobachtungen wurden auch im Bereich der acetylenischen Deformationsschwingungen gemacht.

Diese Beobachtungen sprechen dafür, dass es sich bei A um das V-förmige Trimer **8b**, bei B um das Dimer **8a** und bei C um das Z-förmige Trimer **8c** handelt. Diese Zuordnung wird zusätzlich dadurch gestützt, dass sich von den beiden im Bereich der Carbonyl-Streckschwingung beobachteten Banden eine der Gruppe A zuordnen lässt, die andere jedoch keiner der drei Gruppen. Dies steht in Einklang mit den quantenchemischen Berechnungen auf dem B3LYP/cc-pVTZ Niveau, die für **8a** und **8c** annähernd identische Carbonyl-Streckschwingungen ergaben. Die zweite in diesem Bereich beobachtete Bande ist daher diesen beiden Molekülen zuzuordnen.

Die relative Lage der Banden im Experiment stimmt zudem sehr gut mit der relativen Lage der berechneten Banden überein. Die beobachteten Banden und ihre Zuordnungen sind für das Dimer **8a** in Tabelle 4.14, für das Trimer **8b** in Tabelle 4.15 und für das Trimer **8c** in Tabelle 4.16 aufgeführt.

Die Tatsache, dass die Banden des Dimers **8a** eine höhere Intensität erreichen als die der beiden Trimere ist darauf zurückzuführen, dass in der Matrix, analog zur Gasphase, das gleichzeitige Zusammentreffen von drei Molekülen extrem unwahrscheinlich ist. Der Bildung eines Trimers geht also zumeist die Bildung eines Dimers voraus. Die bereits im Depositionsspektrum vorgefundenen Banden geringerer Intensität stimmen mit denen des Dimers **8a** überein.

Die Banden des Trimers **8c** haben, verglichen mit denen des Trimers **8b**, eine geringere Intensität, selbst dann wenn die Konzentration des Acetons **7** doppelt so hoch ist wie die des Acetylens **6**. Dies erklärt sich durch die geringere Größe des Acetylens, aufgrund der es leichter durch die Matrix diffundiert als Aceton. Zudem kann das Trimer **8c** nur durch Anlagerung eines Aceton Moleküls an ein Dimer **8a** entstehen. Das Trimer **8b** hingegen kann sowohl von einem Dimer **8a** und einem Acetylen Molekül **6a**, als auch von einem Acetylen-Dimer **6b** und einem Aceton Molekül **7** gebildet werden, wobei in letzterem Fall noch eine Umlagerung nötig ist (s. Abbildung 4.27).

**Tabelle 4.14:** IR-Absorptionen des Dimers **8a**, Vergleich der experimentellen Daten mit berechneten Schwingungen und Literaturdaten.<sup>[90]</sup> Die berechneten Schwingungen von nicht beobachteten Banden (zu geringe Intensität) sind nicht aufgeführt. Die Indizes ‚Ay‘ bzw. ‚Ao‘ geben an, ob die jeweilige Schwingung zum Acetylen oder Aceton gehört.

B3LYP/cc-pVTZ			Ar-Matrix		Zuordnung
Mode	$\tilde{\nu}$ (cm <sup>-1</sup> )	I <sub>rel</sub>	$\tilde{\nu}_{\text{Exp}}$ (cm <sup>-1</sup> )	$\tilde{\nu}_{\text{Lit}}$ (cm <sup>-1</sup> )	
35	3351.4	100	3234.0	3231	$\nu_{\text{Ay,as}}(\text{C-H})$
27	1782.6	73	1717.5		$\nu_{\text{Ao}}(\text{C=O})$
22	1391.8	13	1363.8		$\gamma_{\text{Ao}}(\text{CH}_3)$
20	1240.0	22	1221.4		$\delta_{\text{Ao}}(\text{C-C-H})$
15	833.4	26	779.3	780	$\delta_{\text{Ay}}(\text{CC-H})$
14	828.7	21	774.9	775	$\delta_{\text{Ay}}(\text{CC-H})$

**Tabelle 4.15:** IR-Absorptionen des Trimers **8b**, Vergleich der experimentellen Daten mit berechneten Schwingungen. Die berechneten Schwingungen von nicht beobachteten Banden (zu geringe Intensität) sind nicht aufgeführt. Die Indizes ‚Ay‘ bzw. ‚Ao‘ geben an, ob die jeweilige Schwingung zum Acetylen oder Aceton gehört.

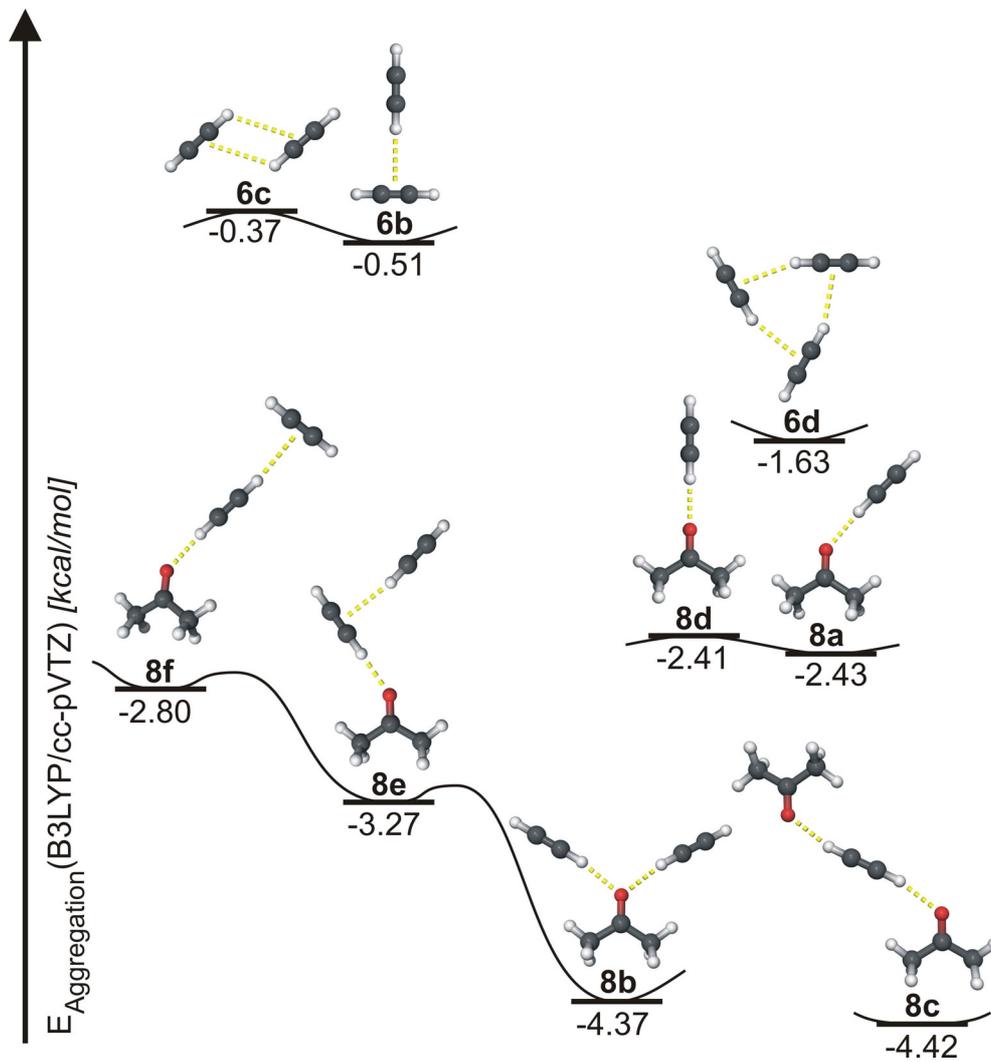
B3LYP/cc-pVTZ				Ar-Matrix	Zuordnung
Mode	$\tilde{\nu}$ (cm <sup>-1</sup> )	I <sub>rel</sub>	Sym.	$\tilde{\nu}_{\text{Exp}}$ (cm <sup>-1</sup> )	
46	3363.6	52	A	3253.1	$\nu_{\text{Ay,s}}(\text{C-H})$
45	3358.5	100	B	3244.4	$\nu_{\text{Ay,as}}(\text{C-H})$
36	1770.7	69	A	1713.3	$\nu_{\text{Ao}}(\text{C=O})$
31	1395.0	12	B	1366.1	$\gamma_{\text{Ao}}(\text{CH}_3)$
29	1246.5	19	B	1229.4	$\delta_{\text{Ao}}(\text{C-C-H})$
24	834.7	43	A	783.5	$\delta_{\text{Ay,s}}(\text{CC-H})$
23	823.0	13	B	770.2	$\delta_{\text{Ay,as}}(\text{CC-H})$
22	822.0	26	B	767.8	$\delta_{\text{Ay,as}}(\text{CC-H})$

**Tabelle 4.16:** IR-Absorptionen des Trimers **8c**, Vergleich der experimentellen Daten mit berechneten Schwingungen. Die berechneten Schwingungen von nicht beobachteten Banden (zu geringe Intensität) sind nicht aufgeführt. Die Indizes ‚Ay‘ bzw. ‚Ao‘ geben an, ob die jeweilige Schwingung zum Acetylen oder Aceton gehört.

Mode	B3LYP/cc-pVTZ			Ar-Matrix	Zuordnung
	$\tilde{\nu}$ (cm <sup>-1</sup> )	I <sub>rel</sub>	Sym.	$\tilde{\nu}_{\text{Exp}}$ (cm <sup>-1</sup> )	
65	3328.8	100	B	3221.7	$\nu_{\text{Ay,as}}(\text{C-H})$
50	1782.7	87	B	1717.5	$\nu_{\text{Ao,as}}(\text{C=O})$
46	1471.9	9	B	1393.8	$\delta_{\text{Ao}}(\text{H-C-H})$
40	1394.1	15	B	1365.8	$\gamma_{\text{Ao}}(\text{CH}_3)$
38	1389.6	13	B	1355.8	$\gamma_{\text{Ao}}(\text{CH}_3)$
36	1240.4	29	B	1226.0	$\delta_{\text{Ao}}(\text{C-C-H})$
27	858.1	23	B	792.2	$\delta_{\text{Ay}}(\text{CC-H})$
26	851.7	13	A	787.6	$\delta_{\text{Ay}}(\text{CC-H})$

Vergleicht man die von DeLaat und Ault unter Verwendung einer *twin jet deposition* beobachteten Banden<sup>[90]</sup> mit den hier aufgeführten Banden, so erhält man eine sehr gute Übereinstimmung mit den Banden des Dimers **8a** (s. Tabelle 4.14). Auch dies spricht für die in Tabelle 4.13 getroffene Zuordnung.

Es kann daher gesagt werden, dass bei der Aggregation des Gemisches von Acetylen und Aceton in einer Argon-Matrix neben dem gemischten Dimer auch Trimere der Stöchiometrie 1:2 bzw. 2:1 gebildet werden. Diese können als Vorstufen zu der von Boese<sup>[2, 160]</sup> gefundenen Struktur des Cokristalls der beiden Verbindungen verstanden werden.



**Abbildung 4.27:** Vergleich der Aggregationsenergien verschiedener Aggregate von Acetylen **6** und Aceton **7** berechnet auf dem B3LYP/cc-pVTZ Niveau, alle Energien inkl. ZPE.

## 4.5 Fazit

Die Methode der gepulsten Deposition ist hervorragend für die Untersuchung der Aggregation leichtflüchtiger Substanzen in einer kryogenen Matrix geeignet. Dies gilt sowohl für Ein- als auch für Mehrkomponentensysteme. Bei allen untersuchten Systemen war es möglich, Matrizes zu erzeugen, welche fast nur Monomere enthielten. Solche Matrizes stellen eine gute Ausgangsbasis für die Untersuchung von Aggregationen dar.

Mit Hilfe des *free warm-up* war es möglich, in allen Fällen Aggregationen zu beobachten, unabhängig davon ob es sich um eine starke Wasserstoffbrücke, wie im Fall der Essigsäure **2**, oder um schwache Wasserstoffbrücken, wie im Fall der Alkine, handelt. Für das Mischsystem aus Acetylen **6** und Aceton **7** konnte mit dieser Methode nicht nur die Bildung eines gemischten Dimers **8a** sondern auch die Bildung zweier verschiedener Trimere **8b** und **8c** gezeigt werden. Dies zeigt, dass diese Form des Temprens geeignet ist, die Aggregation von Molekülen in kryogenen Matrizes zu studieren.

Alle in diesem Kapitel untersuchten Moleküle haben einen sehr hohen Dampfdruck. Dies ist aus zweierlei Gründen eine wichtige Vorbedingung für die hier verwendeten Methoden:

1. Ist der Dampfdruck eines Moleküls zu gering, kann es nicht mehr mit dem Edelgas vorgemischt werden. Somit ist keine gepulste Deposition mehr möglich, was wiederum die Isolation reiner Monomere in der Matrix erschwert.
2. Bei Systemen aus mehreren Komponenten erlaubt der hohe Dampfdruck zudem, das Mischungsverhältnis der Komponenten genau festzulegen. Dies ist insbesondere dann wichtig, wenn wie im Fall des Mischsystems von Acetylen **6** und Aceton **7** verschiedene Aggregate möglich sind.

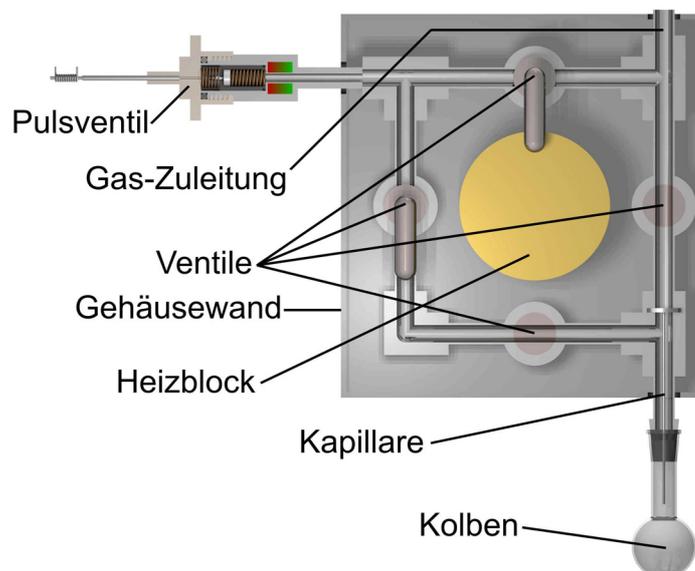
Die Beschränkung auf Moleküle mit hohem Dampfdruck ist ein großer Nachteil, da viele biologisch interessante Moleküle einen geringen Dampfdruck haben. Hier muss man weiterhin auf Modellsysteme mit hohem Dampfdruck zurückgreifen.

## 5 Verbindungen mit mittlerem Dampfdruck

### 5.1 Einführung

Will man Verbindungen mit einem Dampfdruck unter 1 mbar untersuchen, so ist die gepulste Deposition in der Form, wie sie für leichtflüchtige Substanzen verwendet wird, nicht mehr geeignet. Andererseits ist bei einigen dieser Verbindungen der Dampfdruck noch so hoch, dass sie bei Verwendung der *slow spray-on* Technik sehr stark gekühlt werden müssten. Hierzu gehören unter anderem Propionsäure **9** und Formamid **10**.

Für diese Substanzen wurde daher eine modifizierte Form der gepulsten Deposition entwickelt. Hierbei befindet sich die zu untersuchende Substanz in einem Kolben in der Nähe des Pulsventils (s. Abbildung 5.1). Sie steht permanent mit dem Inertgas in Kontakt. Dieses strömt vorgewärmt aus dem Vorratsbehälter durch eine Kapillare, welche eine Kontamination des Vorratsbehälters minimieren soll. Die Konstruktion wurde so gewählt, dass man das Inertgas auch direkt zu dem Pulsventil leiten kann. Sie kann durch einen zentralen Heizblock erwärmt werden und ist nach außen hin thermisch isoliert. Nur der Kolben mit der Substanz ragt aus der Heizeinheit heraus, da es möglich sein muss, ihn individuell zu kühlen oder zu erwärmen.



**Abbildung 5.1:** Modifizierte Pulsdeposition für Verbindungen mittleren Dampfdruckes.

Für diese Untersuchungen wurde zum einen Propionsäure **9** gewählt, deren Dampfdruck bei Raumtemperatur zwar mit ca. 5 mbar<sup>[130]</sup> über der oben genannten Grenze liegt, aber aufgrund des relativ geringen Unterschieds auch geeignet erscheint. Angesichts der gefundenen Unterschiede bei den Aggregationen von Ameisensäure **1** und Essigsäure **2** (s. Abschn. 4.2) erscheint eine Untersuchung des nächst höheren Homologen zudem sinnvoll.

Die zweite ausgewählte Verbindung ist das Formamid **10**, welches erst bei ca. 70°C einen Dampfdruck von 1 mbar erreicht<sup>[130]</sup> und somit für die normale Pulsdeposition nicht mehr geeignet ist. Als Derivat der Ameisensäure **1** erlaubt das Formamid **10** zudem einen sehr guten Vergleich zwischen einem System mit O-H...O- und einem mit N-H...O-Wasserstoffbrückenbindungen, den beiden wichtigsten Typen von Wasserstoffbrücken in der Natur.

## 5.2 Propionsäure

### 5.2.1 Einführung

Propionsäure **9** ist das nächst höhere Homologe in der Reihe der bisher untersuchten aliphatischen Monocarbonsäuren. In Hinsicht auf die Matrixisolationsspektroskopie ist die Propionsäure wenig untersucht. Sie ist in der „*Bibliography of Matrix Isolation*“<sup>[139, 140]</sup> bis einschl. 1997 nicht aufgeführt.

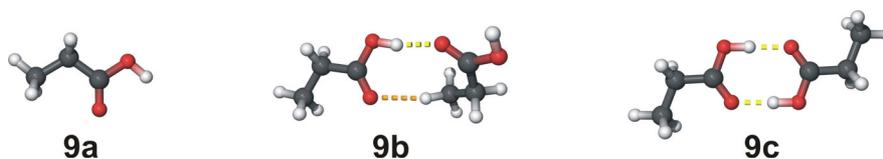


Abbildung 5.2: Propionsäure Monomer **9a**, offenes **9b** und cyclisches Dimer **9c**.

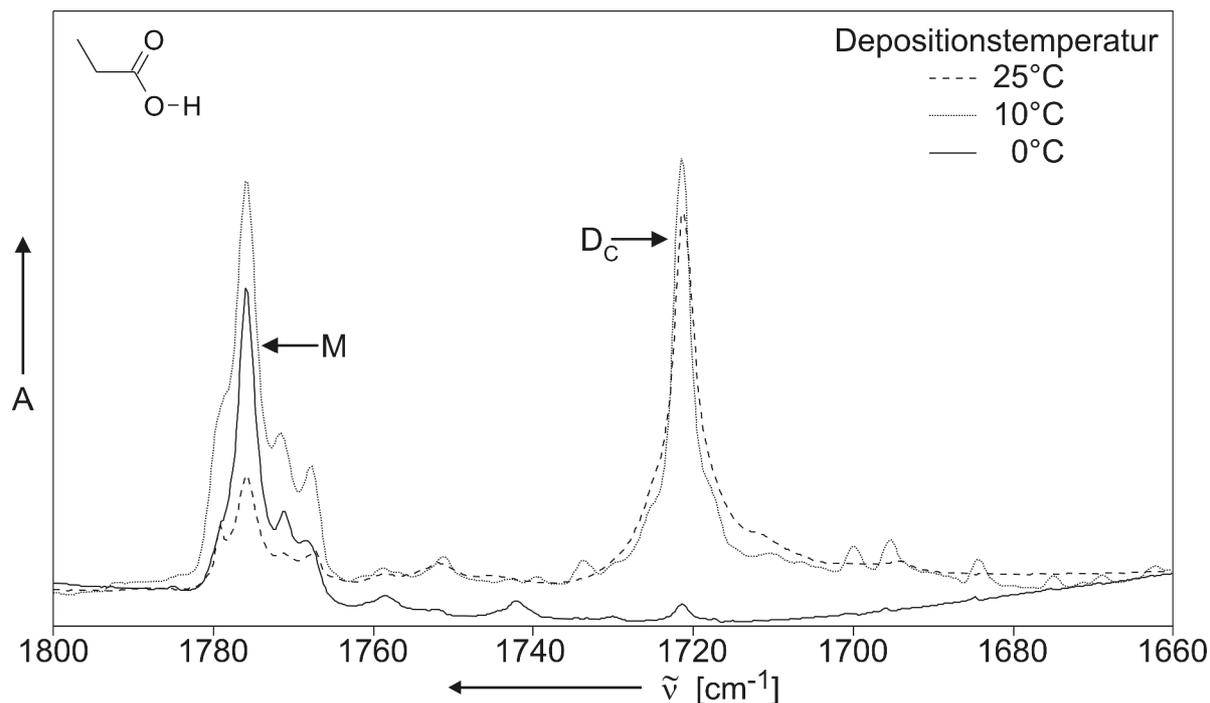
Angesichts der vorgefundenen Unterschiede bei der Aggregation von Ameisensäure **1** und Essigsäure **2** ist die Untersuchung der Propionsäure **9** sinnvoll. Das Interesse gilt hierbei insbesondere der Beobachtbarkeit des offenen Dimers **9b** und der quantenchemisch berechneten Barriere für die Umlagerung von **9b** in das cyclische Dimer **9c**.

Zugleich stellt es ein Testsystem für die Verwendbarkeit der modifizierten Pulsdeposition (s. Abbildung 5.1) dar.

### 5.2.2 Ergebnisse der Experimente

Es wurde zunächst versucht eine Matrix zu erzeugen, die nur monomere Propionsäure **9a** enthält. Als Pulsparameter wurden die gleichen Parameter gewählt, welche auch bei Ameisensäure **1** und Essigsäure **2** eine Matrixisolation des jeweiligen Monomers erlaubten: eine Pulsdauer von 300  $\mu$ s und eine Pulsfrequenz von 5 Hz.

Belässt man die Probe während der Deposition bei Raumtemperatur, so erhält man eine Matrix, die mehr Dimer **9c** als Monomer enthält. Durch Senken der Proben temperatur kann man das Verhältnis zugunsten des Monomers **9a** ändern (s. Abbildung 5.3).



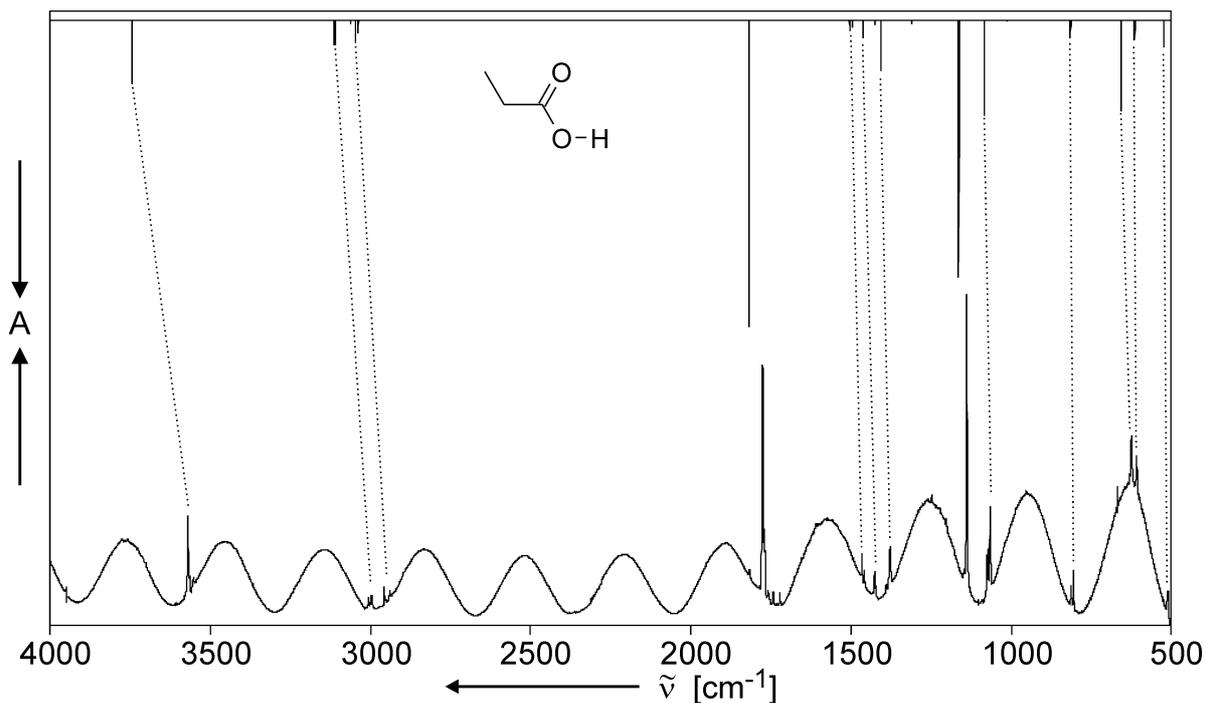
**Abbildung 5.3:** Matrixisolation von Propionsäure **9** mit modifizierter Depositionseinrichtung bei verschiedenen Proben temperaturen (Pulsdauer 300  $\mu$ s, Pulsfrequenz 5 Hz). Erniedrigung der Temperatur erhöht den Anteil des Monomers **9a** (M) gegenüber dem des cyclischen Dimers **9c** (D<sub>C</sub>) (0°C: MG243A11.0, 10°C: MG242A11.0, 25°C: MG244A11.0).

Bei einer Temperatur von ca. 0°C erhält man eine Matrix, welche ausschließlich monomere Propionsäure **9a** enthält. Allerdings ist die maximale Intensität der Banden hierbei sehr gering (s. Abbildung 5.4).

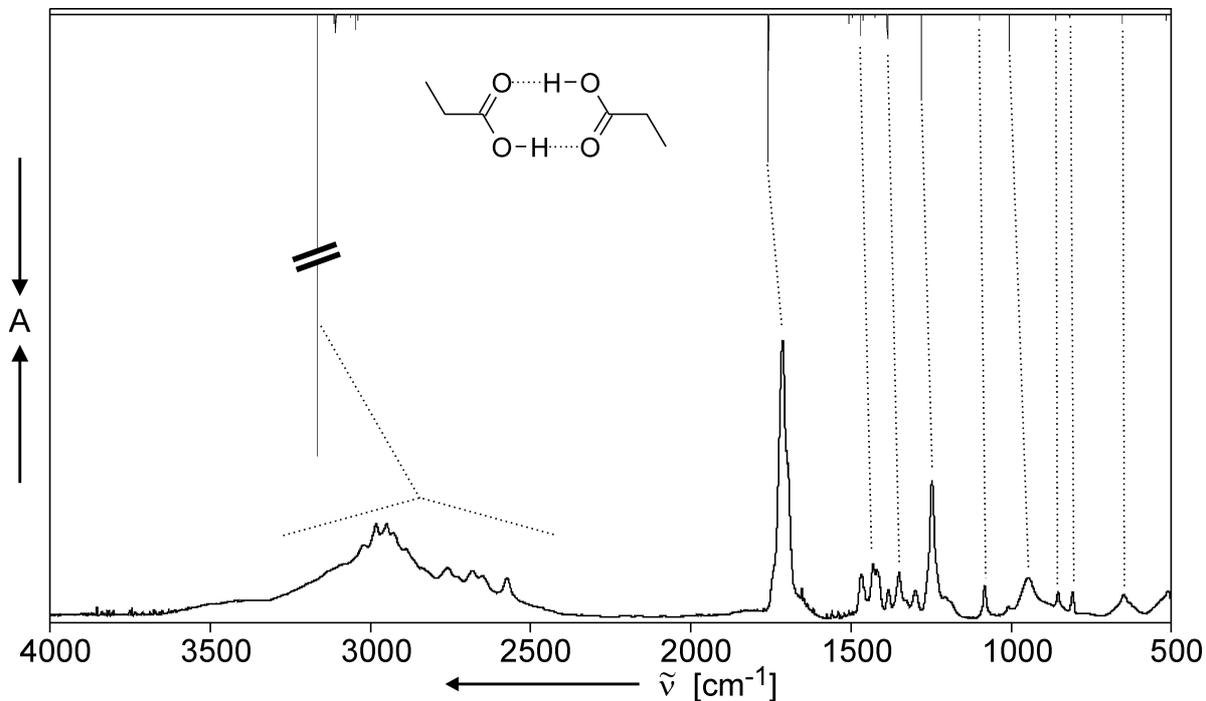
Abbildung 5.3 zeigt, dass trotz der geringen Pulsdauer bereits bei Raumtemperatur ein hoher Anteil cyclisches Dimer **9c** in der Matrix isoliert wird. Durch Verlängerung der Pulsdauer auf 20 ms bei gleichzeitiger Reduzierung der Pulsfrequenz auf 1 Hz war es möglich, eine reine Dimer-Matrix zu erzeugen (s. Abbildung 5.5). Auch hier ist die Intensität der Banden, verglichen mit der normalen gepulsten Deposition, sehr gering.

Unter keiner der verwendeten Depositionsbedingungen wurde das offenkettige Dimer **9b** beobachtet.

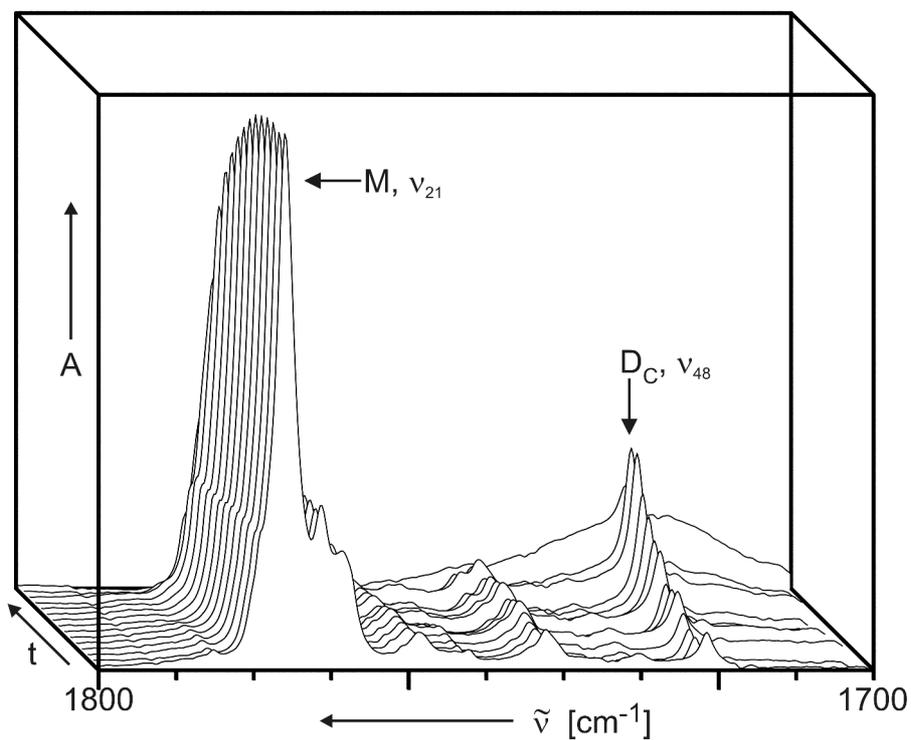
Die Beobachtung der Aggregation während des *free warm-ups* ist aufgrund der geringen allgemeinen Bandenintensität auf die Carbonyl- (Abbildung 5.6) und Carboxyl-Streckschwingungen (Abbildung 5.7) reduziert. In beiden Bereichen lässt sich eine Abnahme der Banden des Monomers **9a** und eine Zunahme der Banden des cyclischen Dimers **9c** beobachten.



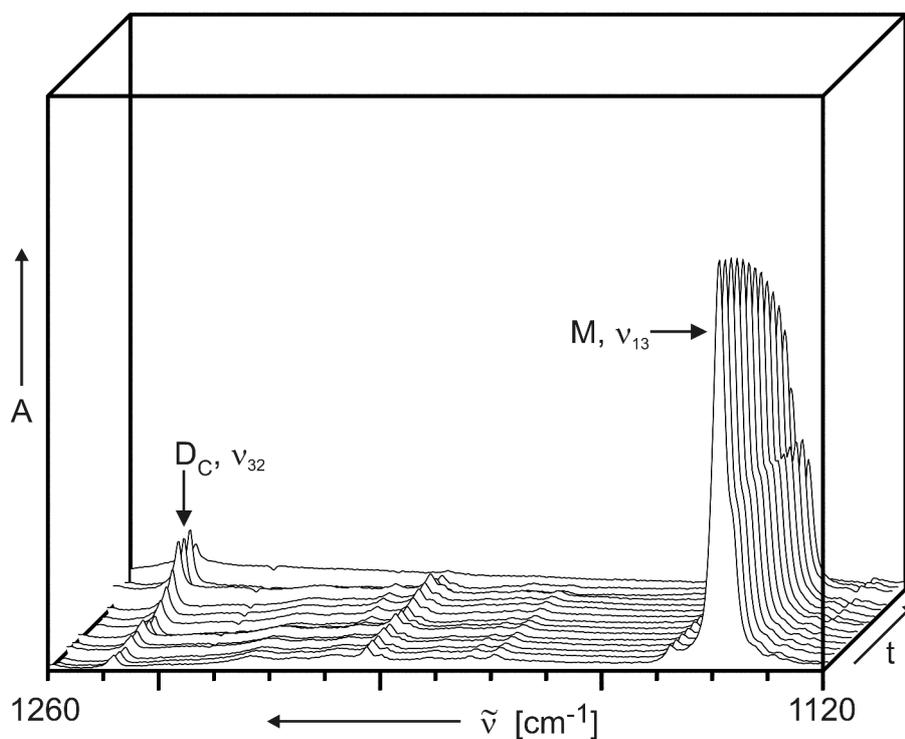
**Abbildung 5.4:** IR-Spektrum matrixisolierter monomerer Propionsäure **9a**; **oben:** berechnetes Spektrum (B3LYP/cc-pVTZ); **unten:** experimentelles Spektrum (modifizierte Pulsdeposition, Propionsäure in Argon, Pulsdauer 300  $\mu\text{s}$ , Pulsfrequenz 5 Hz, Proben temperatur 0°C; MG243A11.0).



**Abbildung 5.5:** IR-Spektrum matrixisolierter dimerer Propionsäure **9c**; **oben:** berechnetes Spektrum (B3LYP/cc-pVTZ); **unten:** experimentelles Spektrum (modifizierte Pulsdeposition, Propionsäure in Argon, Pulsdauer 20 ms, Pulsfrequenz 1 Hz, Proben temperatur 25°C; MG315A01.0).



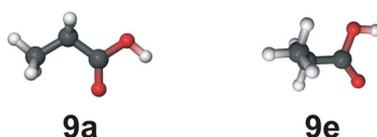
**Abbildung 5.6:** Tempern (*free warm-up*) von Propionsäure Monomer **9a** (M) in einer Argon Matrix, Bildung des cyclischen Dimers **9c** ( $D_C$ ); Bereich der Carbonyl-Streckschwingungen (MG243A12.x).



**Abbildung 5.7:** Tempern (*free warm-up*) von Propionsäure Monomer **9a** (M) in einer Argon Matrix, Bildung des cyclischen Dimers **9c** ( $D_C$ ); Bereich der C-O-Streckschwingungen (MG243A12.x).

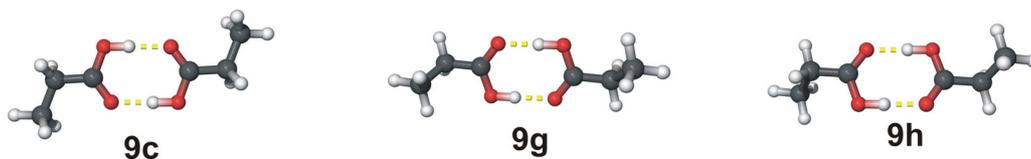
### 5.2.3 Diskussion

Das Monomer der Propionsäure kann zwei verschiedene Konformationen einnehmen, die beide energetische Minima darstellen. Von diesen ist das  $C_s$ -symmetrische Monomer **9a** um 1.2 kcal/mol (B3LYP/cc-pVTZ) energetisch günstiger als das  $C_1$ -symmetrische Monomer **9e**.



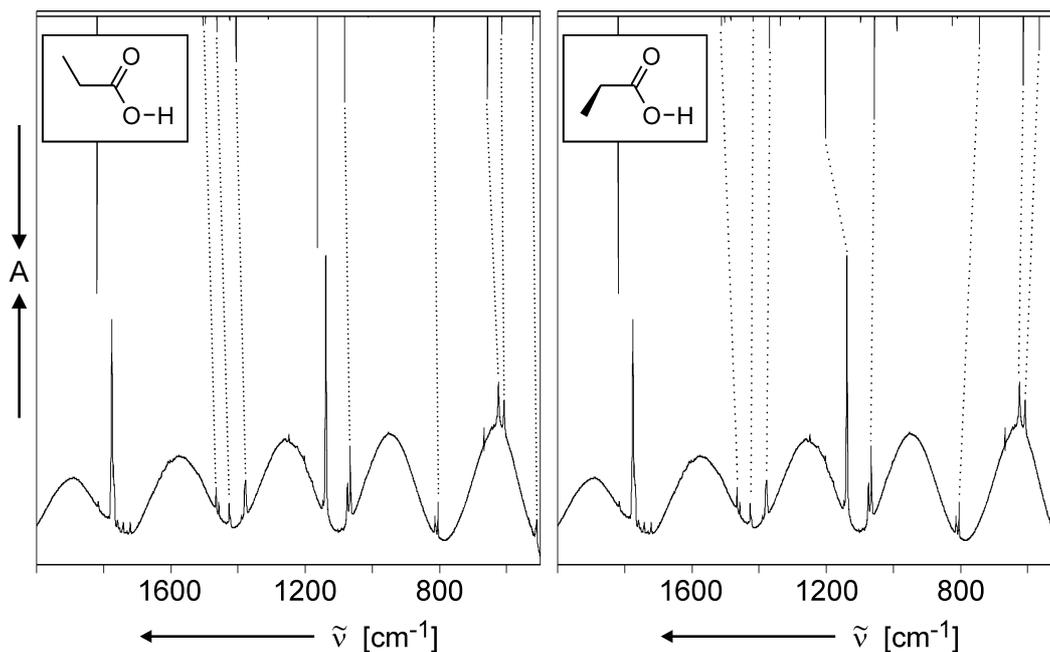
**Abbildung 5.8:** Verschiedene Konformere der monomeren Propionsäure.

Die berechneten IR-Spektren der beiden Monomere sind oberhalb von  $1600\text{ cm}^{-1}$  sehr ähnlich. Erst bei kleineren Wellenzahlen werden größere Unterschiede deutlich. Den Vergleich der berechneten Spektren beider Monomere mit dem experimentellen Spektrum zwischen  $2000$  und  $500\text{ cm}^{-1}$  zeigt Abbildung 5.10. Die berechneten Banden des energetisch günstigeren  $C_s$ -symmetrischen Monomers **9a** zeigen eine wesentlich bessere Übereinstimmung mit dem experimentellen Spektrum (s. Tabelle 5.1). Die Banden des Monomers **9a** sind in Tabelle 5.3 aufgeführt.



**Abbildung 5.9:** Verschiedene Konformere der dimeren Propionsäure.

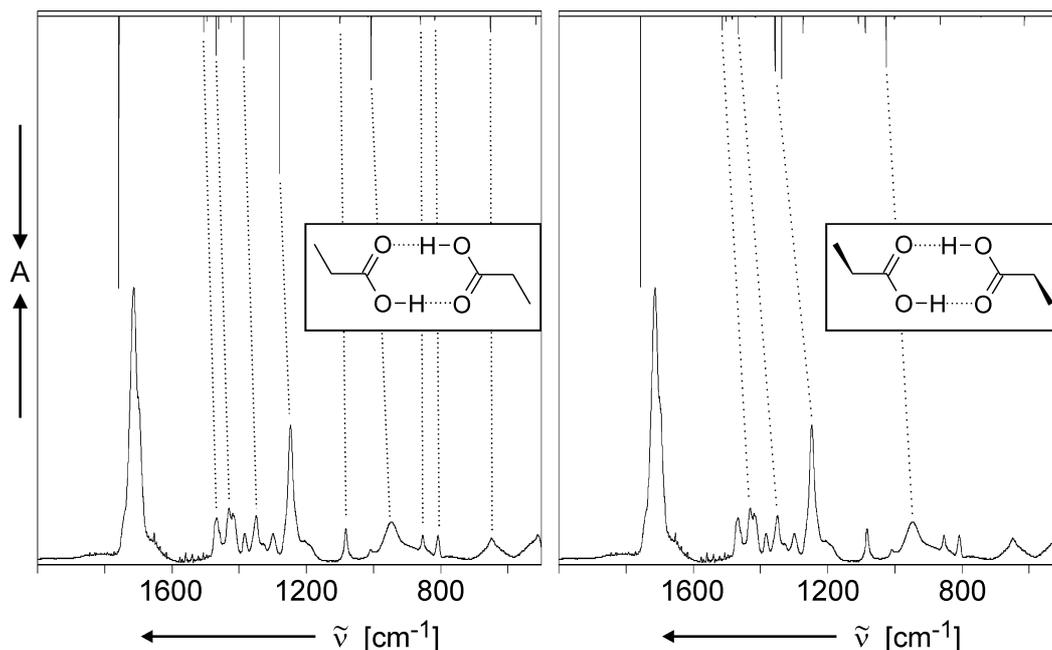
Auch bei den cyclischen Dimeren weist das  $C_{2h}$ -symmetrische Dimer **9c**, welches sich formal aus zwei  $C_s$ -symmetrischen Monomeren **9a** zusammensetzt, eine eindeutig bessere Übereinstimmung mit dem experimentellen Spektrum auf als die aus zwei  $C_1$ -symmetrischen Monomeren bestehenden Dimere **9g** und **9h** (s. Abbildung 5.11 und Tabelle 5.2). Analog zu den anderen Carbonsäuren zeigt das Dimer **9c** bei Wellenzahlen oberhalb von  $2000\text{ cm}^{-1}$  Banden, die durch Fermi-Resonanz verursacht werden. Die Schwingungen des Dimers **9c** sind in Tabelle 5.4 (normale Banden) und Tabelle 5.5 (Banden durch Fermi-Resonanz) aufgeführt.



**Abbildung 5.10:** Vergleich der berechneten IR-Spektren (B3LYP/cc-pVTZ) mit dem experimentellen Spektrum (modifizierte Pulsdeposition, Propionsäure in Argon, Pulsdauer 300  $\mu$ s, Pulsfrequenz 5 Hz, Probentemperatur 0°C, *MG243A11.0*) im Bereich von 2000-500  $\text{cm}^{-1}$ , **links:**  $C_s$ -symmetrisches Monomer **9a**, **rechts:**  $C_1$ -symmetrisches Monomer **9e**. Die jeweilige Zuordnung der Banden erfolgte aufgrund von Bandenabfolge und relativer Bandenintensität.

**Tabelle 5.1:** Vergleich der berechneten Schwingungen des  $C_s$ -symmetrischen Monomers **9a** und des  $C_1$ -symmetrischen Monomers **9e** mit den experimentellen Daten. Die Werte in den Klammern geben die Abweichung der berechneten von den experimentellen Frequenzen an.

Mode	B3LYP/cc-pVTZ				Ar-Matrix
	$C_s$ -Monomer <b>9a</b>		$C_1$ -Monomer <b>9e</b>		$\tilde{\nu}_{\text{Exp}} (\text{cm}^{-1})$
	$\tilde{\nu} (\text{cm}^{-1})$	$I_{\text{rel}}$	$\tilde{\nu} (\text{cm}^{-1})$	$I_{\text{rel}}$	
21	1819.6 (+43.5)	100	1819.5 (+43.4)	100	1776.1
16	1405.9 (+28.4)	16	1368.3 (-9.2)	11	1377.5
13	1163.4 (+25.0)	83	1202.1 (+63.7)	43	1138.4
11	1082.4 (+16.3)	30	1056.4 (-9.7)	37	1066.1
7	656.6 (+31.3)	29	743.4 (+118.1)	10	625.3
6	614.1 (+6.6)	6	612.7 (+5.2)	24	607.5
5	521.9 (+11.2)	8	565.1 (+54.4)	12	510.7



**Abbildung 5.11:** Vergleich der berechneten IR-Spektren (B3LYP/cc-pVTZ) mit dem experimentellen Spektrum (modifizierte Pulsdeposition, Propionsäure in Argon, 20 ms, Pulsfrequenz 1 Hz, Proben temperatur 25°C, *MG315A01.0*) im Bereich von 2000-500  $\text{cm}^{-1}$ , **links:**  $C_{2h}$ -symmetrisches Dimer **9c**, **rechts:**  $C_2$ -symmetrisches Dimer **9g** (berechnetes Spektrum identisch mit  $C_1$ -symmetrischem Dimer **9h**).

**Tabelle 5.2:** Vergleich der berechneten Schwingungen des  $C_{2h}$ -symmetrischen Dimers **9c** und des  $C_2$ -symmetrischen Dimers **9g** mit den experimentellen Daten. Die Werte in den Klammern geben die Abweichung der berechneten von den experimentellen Frequenzen an.

Mode	B3LYP/cc-pVTZ				Ar-Matrix
	$C_{2h}$ -Dimer <b>9c</b>		$C_2$ -Dimer <b>9g</b>		$\tilde{\nu}_{\text{Exp}} (\text{cm}^{-1})$
	$\tilde{\nu} (\text{cm}^{-1})$	$I_{\text{rel}}$	$\tilde{\nu} (\text{cm}^{-1})$	$I_{\text{rel}}$	
48	1757.5 (+36.0)	18	1755.4 (+33.9)	32	1721.5
45	1505.5 (+39.2)	1	1512.3 (+46.0)	1	1466.3
41	1468.7 (+38.3)	2	1479.5 (+49.1)	0	1430.4
32	1279.7 (+33.0)	10	1275.3 (+28.6)	1	1246.7
24	1007.0 (+60.8)	4	1004.1 (+57.9)	0	946.2
18	651.8 (+3.1)	1	727.9 (+79.2)	0	648.7
14	516.1 (+4.1)	0	496.3 (-15.7)	2	512.0

**Tabelle 5.3:** IR-Absorptionen des  $C_s$ -symmetrischen Propionsäure Monomers **9a**, Vergleich der experimentellen Daten mit berechneten Schwingungen. Die berechneten Schwingungen von nicht beobachteten Banden (zu geringe Intensität) sind nicht aufgeführt.

Mode	B3LYP/cc-pVTZ			Ar-Matrix	Zuordnung
	$\tilde{\nu}$ (cm <sup>-1</sup> )	$I_{\text{rel}}$	Sym.	$\tilde{\nu}_{\text{Exp}}$ (cm <sup>-1</sup> )	
27	3744.3	20	A'	3569.7	$\nu(\text{OH})$
26	3114.3	8	A''	3004.4	$\nu_{\text{as}}(\text{C3-H})$
25	3109.1	7	A'	2995.2	$\nu_{\text{s}}(\text{H}_2\text{-C-H})$
23	3046.2	7	A'	2956.0	$\nu_{\text{s}}(\text{C3-H})$
22	3037.6	4	A'	2937.6	$\nu_{\text{s}}(\text{C2-H})$
21	1819.6	100	A'	1776.1	$\nu(\text{C=O})$
20	1504.1	3	A'	1465.7	$\delta_{\text{s}}(\text{CH}_3)$
19	1496.9	2	A''	1457.4	$\delta_{\text{as}}(\text{CH}_3)$
18	1462.9	5	A'	1426.0	$\delta(\text{CH}_2)$
17	1425.0	1	A'	1389.5	$\gamma(\text{CH}_3)$
16	1405.9	16	A'	1377.5	$\omega(\text{CH}_2)$
13	1163.4	83	A'	1138.4	$\delta(\text{C-O-H})$
11	1082.4	30	A'	1066.1	$\rho(\text{CH}_3)$
9	816.5	5	A''	813.4	$\rho(\text{CH}_2)$
8	814.5	3	A'	804.4	$\nu(\text{C-C})$
7	656.6	29	A''	625.3	$\gamma(\text{C-O-H})$
6	614.1	6	A'	607.5	$\delta(\text{O-C=O})$
5	521.9	8	A''	510.7	$\gamma(\text{C-O-H})+\rho(\text{CH}_2)$
4	466.9	6	A'	465.4	$\delta(\text{C-C-O})$

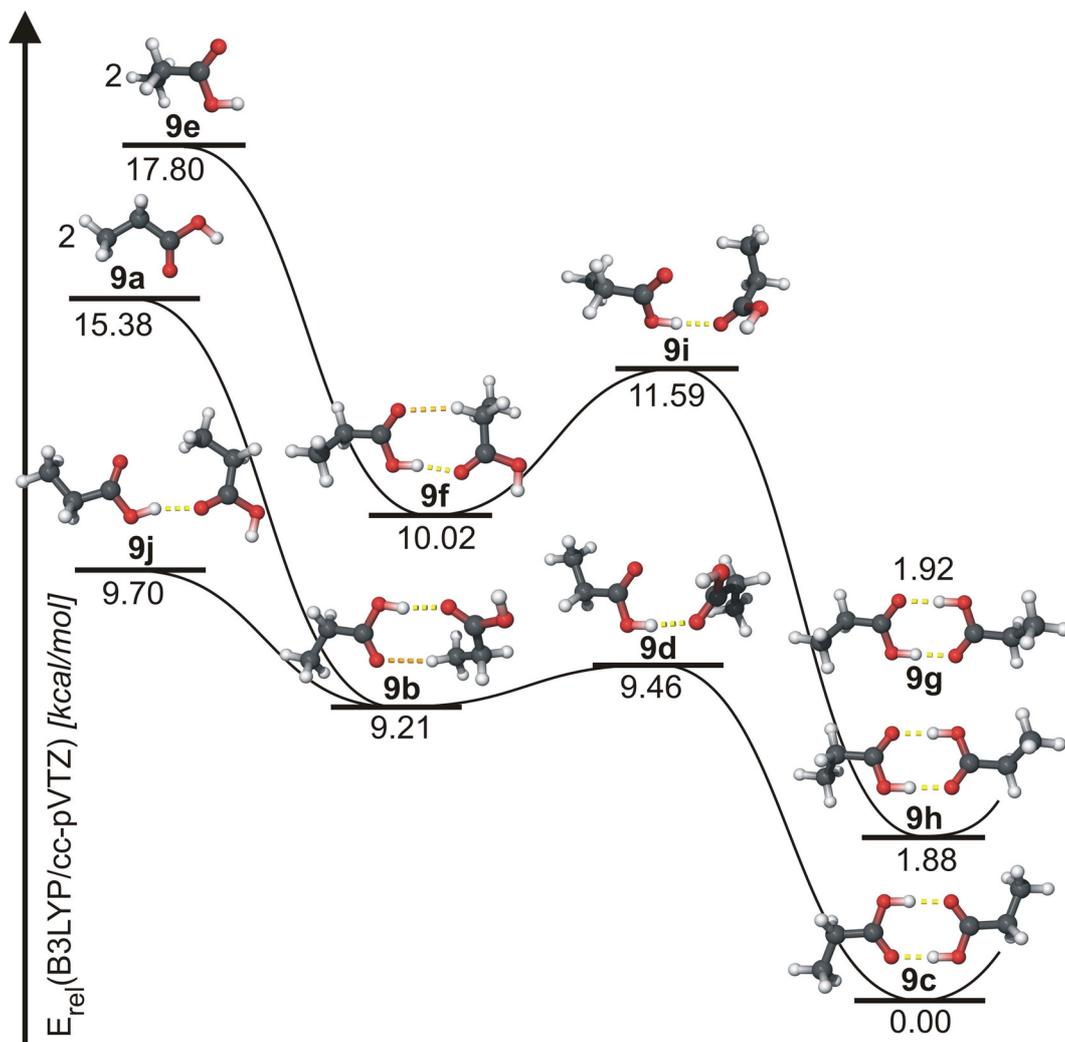
**Tabelle 5.4:** IR-Absorptionen des  $C_{2h}$ -symmetrischen Propionsäure Dimers **9c** unterhalb  $1800\text{ cm}^{-1}$ , Vergleich der experimentellen Daten mit berechneten Schwingungen. Die berechneten Schwingungen von nicht beobachteten Banden (zu geringe Intensität oder IR-inaktiv) sind nicht aufgeführt.

Mode	B3LYP/cc-pVTZ			Ar-Matrix	Zuordnung
	$\tilde{\nu}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$I_{\text{rel}}$	Sym.	$\tilde{\nu}_{\text{Exp}}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	
48	1757.5	18	$B_u$	1721.5	$\nu(\text{C}=\text{O})$
45	1505.5	1	$B_u$	1466.3	$\delta_s(\text{CH}_3)$
44	1495.7	0	$A_u$	1457.3	$\delta_{\text{as}}(\text{CH}_3)$
41	1468.7	2	$B_u$	1430.4	$\delta(\text{C}-\text{O}-\text{H})$
40	1461.0	0	$B_u$	1418.5	$\delta(\text{CH}_2)$
38	1424.2	0	$B_u$	1383.4	$\gamma(\text{CH}_3)$
35	1385.9	2	$B_u$	1349.0	$\varpi(\text{CH}_2)$
32	1279.7	10	$B_u$	1246.7	$\nu(\text{C}-\text{O})$
28	1099.2	0	$B_u$	1082.9	$\rho(\text{CH}_3)$
24	1007.0	4	$A_u$	946.2	$\gamma(\text{C}-\text{O}-\text{H})$
22	859.9	0	$B_u$	853.9	$\nu(\text{C}-\text{C})$
19	817.3	0	$A_u$	807.7	$t(\text{CH}_2)$
18	651.8	1	$B_u$	648.7	$\delta(\text{O}-\text{C}=\text{O})$
14	516.1	0	$B_u$	512.0	$\delta(\text{O}-\text{C}-\text{C})$

**Tabelle 5.5:** IR-Absorptionen des cyclischen Propionsäure Dimers **9c** oberhalb 1800 cm<sup>-1</sup> (Bereich der durch Fermi-Resonanz hervorgerufenen Banden), Vergleich der experimentellen Daten mit berechneten Schwingungen.

Mode	B3LYP/cc-pVTZ				Ar-Matrix
	$\tilde{\nu}$ (cm <sup>-1</sup> )	I <sub>rel</sub>	Sym.	Zuordnung	$\tilde{\nu}_{\text{Exp}}$ (cm <sup>-1</sup> )
60	3164.8	100	B <sub>u</sub>	v <sub>s</sub> (OH)	3022.1
59	3114.2	1	A <sub>u</sub>	v <sub>as</sub> (C3-H)	2982.6
56	3108.2	2	B <sub>u</sub>	v <sub>s</sub> (H <sub>2</sub> -C-H)	2942.9
55	3062.4	0	A <sub>u</sub>	v <sub>as</sub> (C2-H)	2930.1
51	3045.8	1	B <sub>u</sub>	v <sub>s</sub> (C <sub>3</sub> -H)	2889.5
50	3039.1	0	B <sub>u</sub>	v <sub>s</sub> (C2-H)	2841.7
					2755.8
					2728.3
					2680.5
					2648.3
					2571.9

In Abbildung 5.12 sind die relativen Energien der verschiedenen Aggregate der Propionsäure, berechnet auf dem B3LYP/cc-pVTZ Niveau, dargestellt. Man erkennt, dass die Aggregate, welche sich aus C<sub>S</sub>-symmetrischen Monomeren zusammensetzen, energetisch günstiger sind als die der C<sub>1</sub>-symmetrischen Monomere. Das offenkettige Dimer **9b** weicht hierbei einer C<sub>S</sub>-symmetrischen Gesamtgeometrie **9j** aus, um eine zusätzliche Wasserstoffbrücke vom Typ C-H...O bilden zu können.



**Abbildung 5.12:** Energetik der Aggregation von Propionsäure berechnet auf dem B3LYP/cc-pVTZ Niveau, alle Energien inkl. ZPE, **obere Kurve:** niedersymmetrische Aggregate (ausgehend von dem  $C_1$ -symmetrischem Monomer **9e**), **untere Kurve:** hochsymmetrische Aggregate (ausgehend von dem  $C_S$ -symmetrischen Monomer **9a**).

Beim Tempern der reinen Monomer-Matrix konnte die Bildung des cyclischen Dimers **9c** beobachtet werden, nicht jedoch die des offenkettigen Dimers **9b**. Dies steht in Einklang mit der berechneten Barriere für die Umlagerung von **9b** in **9c**, die mit 0.25 kcal/mol noch niedriger ausfällt als die entsprechende Barriere für die Essigsäure **2** (1.76 kcal/mol).

Diese sehr kleine Barriere ist auch der Grund dafür, dass unter keiner der verwendeten Depositionsbedingungen Banden des offenkettigen Dimers **9b** beobachtet wurden. In Tabelle 5.6 sind die berechneten Barrieren auf verschiedenen quantenchemischen Niveaus aufgeführt.

**Tabelle 5.6:** Barriere für die Umwandlung des offenkettigen Dimers **9b** in das cyclische Dimer **9c** auf verschiedenen quantenchemischen Niveaus. Alle Energien in kcal/mol inkl. ZPE.

<b>Methode und Basissatz</b>	<b>Barriere</b>
B3LYP/cc-pVTZ	0.25
B3LYP/6-311++G(d,p)	0.32
mPW1LYP/6-311++G(d,p)	0.36
MP2/6-311++G(d,p)	0.93

Die höchste Barriere wird mit 0.9 kcal/mol auf dem MP2/6-311++G(d,p) Niveau gefunden, sie ist somit fast dreimal so groß wie die Barrieren, die mit den Hybrid-DFT Methoden gefunden werden. Anders als bei den entsprechenden Übergangszuständen der Essigsäure **2d** (vgl. S. 40) unterscheiden sich die Geometrien der Übergangszustände auf den verschiedenen Niveaus allerdings nur wenig, so dass dies nicht die Ursache für die hohe Barriere auf dem MP2/6-311++G(d,p) Niveau sein kann..

## 5.3 Formamid

### 5.3.1 Einführung

Formamid **10** ist als Amid-Derivat der Ameisensäure **1** das kleinste Amid. In Hinsicht auf Wasserstoffbrückenbindungen besteht der größte Unterschied zwischen diesen beiden Substanzen darin, dass Formamid über zwei Donor-Wasserstoffe verfügt. Dies erlaubt die Ausbildung weiterer wasserstoffverbrückter Aggregate.

Die wichtigsten Wasserstoffbrücken des Formamids **10** sind vom Typ N-H...O, der am häufigsten in biologischen Systemen auftretenden Art von Wasserstoffbrückenbindungen. Damit kommt ihnen ein besonderes Interesse zu.

Viele Arbeiten beschäftigen sich mit der Struktur des flüssigen Formamids.<sup>[74, 163, 164]</sup> Komplexe mit Isocyanat-Anionen,<sup>[165]</sup> Wasser<sup>[166]</sup> oder HF,<sup>[87]</sup> wurden ebenso untersucht wie die Komplexe zwischen verschiedenen Isotopomeren des Formamids<sup>[167, 168]</sup> oder die Isomerisierung zur Formimidinsäure.<sup>[169, 170]</sup>

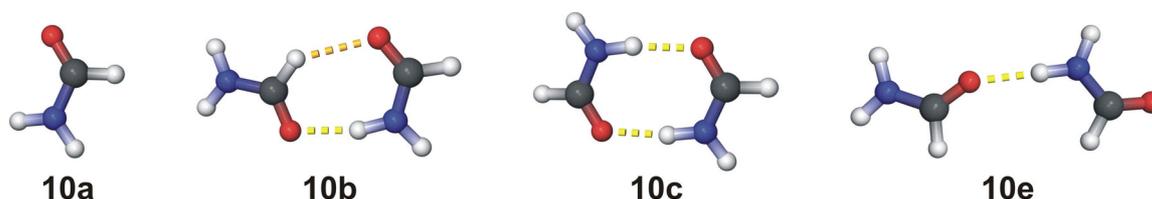
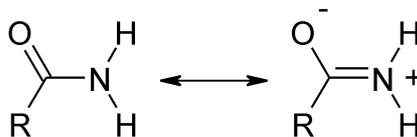


Abbildung 5.13: Formamid Monomer **10a**, verschiedene Dimere.

1983 veröffentlichte Räsänen erste Untersuchungen des Formamids **10** in kryogenen Matrices sowie quantenchemische Berechnungen auf dem HF/STO-3G und HF/4-31G Niveau.<sup>[171, 172]</sup> Er beobachtete neben einem cyclischen Dimer **10c** auch ein offenkettiges Dimer, dem er die Struktur **10e** zuordnete. Dieses Dimer tritt als Strukturelement in der kettenförmigen Struktur des flüssigen Formamids auf<sup>[164]</sup> und stellt laut den durchgeführten Berechnungen das energetisch günstigste offene Dimer dar.

Das offene Dimer **10e** kann sich jedoch nicht in das cyclische Dimer **10c** umlagern, ohne die vorhandene Wasserstoffbrücke zu brechen oder die Carbonylgruppe des Donor-Moleküls unter vorübergehender Aufhebung der Planarität um 180° um die C-N-Bindung zu drehen. Letzteres erscheint unwahrscheinlich, da die C-N-Bindung aufgrund von Resonanz einen partiellen Doppelbindungscharakter besitzt (Abbildung 5.14).<sup>[173]</sup>



**Abbildung 5.14:** Resonanzstabilisierung in Amiden, die C-N-Bindung erhält partiellen Doppelbindungscharakter.

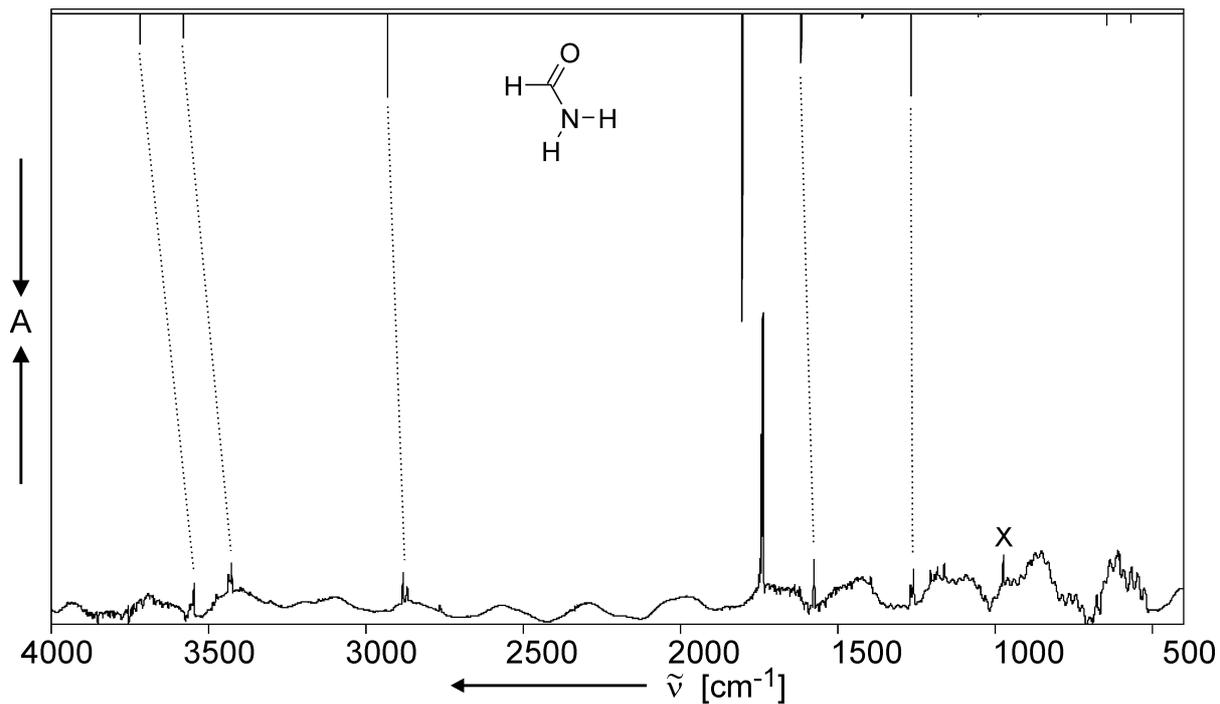
Die Bildung des cyclischen Dimers **10c** unter Beibehaltung der ersten Wasserstoffbrücke ist nur bei dem offenen Dimer **10b** möglich, das formal dem Dimer **1b** der Ameisensäure entspricht. Dieses Dimer wurde weder in den theoretischen Untersuchungen von Räsänen, noch in denen von Østergård diskutiert,<sup>[164]</sup> wobei sich letztere allerdings nur auf flüssiges Formamid bezogen.

### 5.3.2 Ergebnisse der Experimente

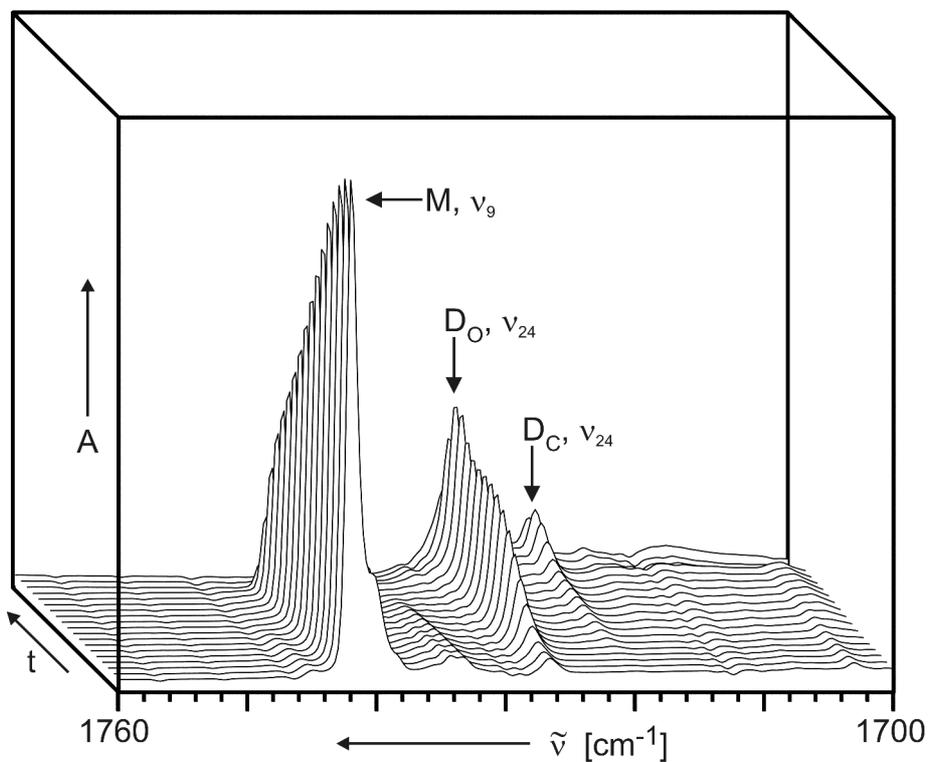
Zur Isolation des monomeren Formamids **10a** in einer Argon-Matrix wurde die modifizierte Pulsdeposition verwendet. Als Pulsparameter wurden analog zu den Carbonsäuren eine Pulslänge von 300  $\mu\text{s}$  und eine Pulsfrequenz von 5 Hz gewählt. Bei Raumtemperatur konnte kein Spektrum erhalten werden. Erst durch Erwärmen der Depositionseinrichtung und der Probe auf 70°C konnte ein Spektrum des monomeren Formamids **10a** erhalten werden. Die Banden dieses Spektrums weisen eine sehr geringe Intensität auf (s. Abbildung 5.15). Das Spektrum enthält zudem eine Verunreinigung (X) mit einer Bande bei 974.6  $\text{cm}^{-1}$ .

Ein Spektrum des dimeren Formamids **10c** konnte aufgrund des geringen Dampfdrucks und der apparativ auf 150°C limitierten Arbeitstemperatur (maximale Betriebstemperatur des Pulsventils laut Herstellerangaben) nicht erhalten werden.

In dem Spektrum des monomeren Formamids **10a** besitzt nur die Bande der Carbonyl-Streckschwingung eine ausreichende Intensität für die Beobachtung der Aggregation während des *free warm-up*. Der entsprechende Bereich ist in Abbildung 5.16 dargestellt. Man erkennt die Abnahme der Bande des Monomers bei 1739  $\text{cm}^{-1}$  und die gleichzeitige Entstehung einer neuen Bande bei 1728  $\text{cm}^{-1}$ . Gegen Ende des *free warm-up* entsteht bei 1720  $\text{cm}^{-1}$  eine weitere Bande.



**Abbildung 5.15:** IR-Spektrum des matrixisolierten monomeren Formamids **10a**; **oben:** berechnetes Spektrum (B3LYP/cc-pVTZ); **unten:** experimentelles Spektrum (modifizierte Pulsdeposition, Formamid in Argon, Pulsdauer 300  $\mu$ s, Pulsfrequenz 5 Hz, Proben temperatur 70°C; MG119A11.0); **X:** Verunreinigung.



**Abbildung 5.16:** Tempern (*free warm-up*) von Formamid Monomer **10a** (M) in einer Argon Matrix, zunächst Bildung des offenkettigen Dimers **10b** ( $D_O$ ), dann des cyclischen Dimers **10c** ( $D_C$ ); Bereich der Carbonyl-Streckschwingungen (MG119A12.x).

### 5.3.3 Diskussion

Formamid **10** konnte als Monomer **10a** in einer Argon-Matrix isoliert werden. Die IR-Daten sind in Tabelle 5.7 aufgeführt. Das Spektrum enthielt eine Verunreinigung mit einer IR-Absorption bei  $947.6\text{ cm}^{-1}$ . Diese lässt sich der intensivsten Bande des literaturbekannten Komplexes von  $\text{NH}_3$  und  $\text{CO}$  zuordnen,<sup>[174, 175]</sup> welcher durch thermische Zersetzung von Formamid entsteht. Neben den apparativen Beschränkungen ist diese Zersetzung ein weiterer Grund, warum mit der modifizierten Pulsdeposition kein reines Dimer in einer Argon-Matrix isoliert werden kann. Die hierfür benötigten wesentlich höheren Temperaturen würden verstärkt zu einer Zersetzung und weniger zur Erhöhung des Dampfdrucks führen.

**Tabelle 5.7:** IR-Absorptionen des Formamid Monomers **10a**, Vergleich der experimentellen Daten mit berechneten Schwingungen und Literaturdaten.<sup>[172]</sup>

Mode	B3LYP/cc-pVTZ			Ar-Matrix		Zuordnung
	$\tilde{\nu}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$I_{\text{rel}}$	Sym.	$\tilde{\nu}_{\text{Exp}}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\tilde{\nu}_{\text{Lit}}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	
12	3718.2	9	A'	3547.4	3548	$\nu_{\text{as}}(\text{NH}_2)$
11	3579.9	8	A'	3426.6	3427	$\nu_{\text{s}}(\text{NH}_2)$
10	2930.9	27	A'	2882.9	2884	$\nu(\text{CH})$
9	1803.9	100	A'	1739.1	1740	$\nu(\text{C}=\text{O})$
8	1616.6	16	A'	1576.8	1579	$\delta(\text{NH}_2)$
7	1422.1	1	A'	1395.4	1400	$\delta(\text{CH})$
6	1267.9	26	A'	1260.3	1261	$\nu(\text{CN})$
5	1054.7	1	A'	1047.1	1047	$\rho(\text{NH}_2)$
4	1045.2	0	A''	1033.5	1035	$\gamma(\text{CH})$
3	645.9	3	A''	680.9	682	$\tau(\text{NH}_2)$
2	568.3	2	A'	565.2	564	$\delta(\text{OCN})$

Ein Vergleich der beobachteten mit den berechneten Banden für die Carbonyl-Streckschwingungen zeigt, dass die während des *free warm-up* zuerst entstehende Bande bei  $1728\text{ cm}^{-1}$  dem offenkettigen Dimer **10b** und die später entstehende Bande bei  $1720\text{ cm}^{-1}$  dem cyclischen Dimer **10c** zugeordnet werden kann (Tabelle 5.8).

**Tabelle 5.8:** Vergleich der beobachteten mit den berechneten (B3LYP/cc-pVTZ) Carbonyl-Streckschwingungen des Formamids. Der verwendete Skalierungsfaktor wurde auf das Monomer ausgerichtet.

	Monomer <b>10a</b>	Dimer <b>10b</b>	Dimer <b>10c</b>
Argon Matrix	1739.1	1728.0	1720.5
B3LYP/cc-pVTZ	1803.9	1784.9	1781.0
Skalierung 0.964	1739.0	1720.6	1716.9
Literatur <sup>[172]</sup>	1740	1728	1720

Alle Banden, die dem cyclischen Dimer **10c** zugeordnet werden können, sind in Tabelle 5.9 aufgeführt, die Banden des offenkettigen Dimers **10b** in Tabelle 5.10.

Versuche, das von Räsänen<sup>[172]</sup> vorgeschlagene Dimer **10e** auf dem gleichen Niveau zu berechnen wie die Dimere **10b** und **10c** führte bei Verwendung einer  $C_s$ -symmetrischen Geometrie zu einem Übergangszustand. Aufhebung der Symmetrie führt zu einem lokalen Minimum **10f**, in welchem die Ebenen der beiden Formamid-Moleküle annähernd rechtwinklig zueinander stehen (s. Abbildung 5.17). Weitere Rotation eines Formamid-Moleküls um die Wasserstoffbrückenbindung führt zu einem weiteren  $C_s$ -symmetrischen Dimer **10g**, welches ebenfalls einen Übergangszustand darstellt. Die Energiedifferenz zwischen den linearen *trans*-Dimeren **10e-g** ist nur gering, sie liegen aber alle deutlich höher als das lineare *cis*-Dimer **10b** (*trans* bzw. *cis* kennzeichnet hier die Lage des verbrückenden Wasserstoffes relativ zur Carbonylgruppe).

**Tabelle 5.9:** IR-Absorptionen des cyclischen Formamid Dimers **10c**, Vergleich der experimentellen Daten mit berechneten Schwingungen. Die breite Bandenstruktur zwischen 3100 und 3400  $\text{cm}^{-1}$  wird durch Fermi-Resonanz hervorgerufen. Die Indices ‚frei‘ bzw. ‚WBB‘ geben an, ob es sich um ein an der Wasserstoffbrückenbindung beteiligtes Amid-Proton handelt. Die berechneten Schwingungen von nicht beobachteten Banden (zu geringe Intensität oder IR-inaktiv) sind nicht aufgeführt.

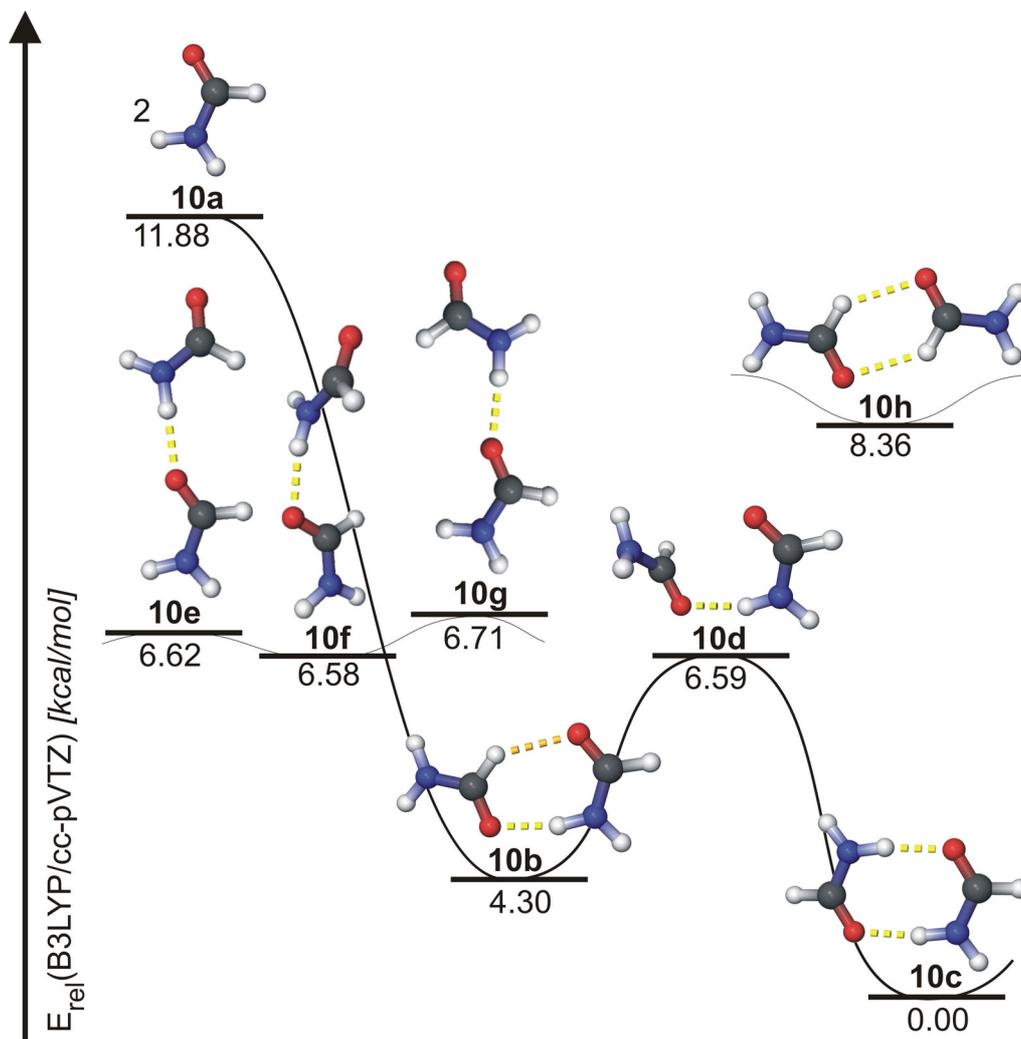
B3LYP/cc-pVTZ				Ar-Matrix	Zuordnung
Mode	$\tilde{\nu}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$I_{\text{rel}}$	Sym.	$\tilde{\nu}_{\text{Exp}}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	
				3355.8	
				3323.8	
				3308.7	
				3290.2	
				3257.8	
30	3670.8	11	B <sub>u</sub>	3218.5	$\nu_{\text{as, frei}}(\text{N-H})$
28	3312.5	100	B <sub>u</sub>	3199.9	$\nu_{\text{as, WBB}}(\text{N-H})$
25	2957.5	23	B <sub>u</sub>	3172.8	$\nu(\text{C-H})$
				3165.9	
				3160.6	
				3153.7	
				3131.2	
24	1781.0	61	B <sub>u</sub>	1720.5	$\nu(\text{C=O})$
17	1334.4	13	B <sub>u</sub>	1312.9	$\delta_{\text{WBB}}(\text{C-N-H})$
12	862.2	6	A <sub>u</sub>	835.2	$\gamma_{\text{WBB}}(\text{C-N-H})$

**Tabelle 5.10:** IR-Absorptionen des offenkettigen Formamid Dimers **10b**, Vergleich der experimentellen Daten mit berechneten Schwingungen. Die Indices ‚frei‘ bzw. ‚WBB‘ geben an, ob es sich um eine an der Wasserstoffbrückenbindung beteiligte Gruppe handelt. Die berechneten Schwingungen von nicht beobachteten Banden (zu geringe Intensität) sind nicht aufgeführt.

Mode	B3LYP/cc-pVTZ			Ar-Matrix	Zuordnung
	$\tilde{\nu}$ (cm <sup>-1</sup> )	I <sub>rel</sub>	Sym.	$\tilde{\nu}_{\text{Exp}}$ (cm <sup>-1</sup> )	
30	3716.3	6	A'	3532.5	$\nu_{\text{as, frei}}(\text{N-H}_2)$
29	3672.7	11	A'	3515.1	$\nu_{\text{frei}}(\text{N-H})$
27	3341.0	89	A'	3171.9	$\nu_{\text{WBB}}(\text{N-H})$
25	2931.4	22	A'	2884.5	$\nu_{\text{frei}}(\text{C-H})$
24	1784.9	100	A'	1728.0	$\nu_{\text{WBB}}(\text{C=O})$
18	1323.1	14	A'	1296.6	$\delta_{\text{WBB}}(\text{C-N-H})$
17	1282.7	24	A'	1281.5	$\delta_{\text{frei}}(\text{C-N-H})$

Es wurden zusätzliche Rechnungen auf dem HF/6-311++G(d,p) Niveau durchgeführt, die jedoch zu einem qualitativ identischen Ergebnis führten. Erst durch Verkleinerung des Basissatzes auf 6-31G wurde für das Dimer **10e** ein Minimum erhalten. Ein solcher Basissatz ist jedoch für die Beschreibung der längerreichweitigen Wechselwirkungen in einem wasserstoffverbrückten System ungeeignet.

Die intensivere der beiden für das Dimer **10f** berechneten Carbonyl-Streckschwingungen liegt bei 1775.7 cm<sup>-1</sup> (B3LYP/cc-pVTZ), also bei einer kleineren Wellenzahl als das cyclische Dimer **10c** (vgl. Tabelle 5.8). Das Auftreten eines *trans*-Dimers bei der Bildung des cyclischen Dimers **10c** ist daher mit den gemachten Beobachtungen nicht in Einklang zu bringen.



**Abbildung 5.17:** Energetik der Aggregation von Formamid **10** berechnet auf dem B3LYP/cc-pVTZ Niveau, alle Energien inkl. ZPE.

Das ebenfalls cyclische Dimer **10h**, bei dem die Wasserstoffbrücken über die aldehydischen Protonen gebildet werden, hat eine berechnete Carbonyl-Streckschwingung bei  $1783.8 \text{ cm}^{-1}$ . Es ist jedoch energetisch wesentlich ungünstiger als die anderen Dimere und kann bei der Betrachtung der Aggregation des Formamids somit vernachlässigt werden.

Es kann daher gesagt werden, dass monomeres Formamid **10a** in einer Argon-Matrix über ein intermediär geformtes offenkettiges *cis*-Dimer **10b** zum cyclischen Dimer **10c** aggregiert.

## 5.4 Fazit

Die Aggregation der Propionsäure **9** und des Formamids **10** konnte IR-spektroskopisch beobachtet werden. In beiden Fällen wurde ein cyclisches Dimer mit zwei Wasserstoffbrückenbindungen gebildet. Im Falle des Formamids **10** konnte ein intermediär auftretendes offenkettiges Dimer **10b** beobachtet werden, im Falle der Propionsäure **9** nicht. Dies steht im Einklang mit den quantenchemisch berechneten Barrieren für die jeweilige Umlagerung des offenkettigen in das cyclische Dimer.

Für die Propionsäure **9** konnte zudem gezeigt werden, dass im Falle der Matrixisolation des Monomers mittels gepulster Deposition nur das energetisch günstigere  $C_3$ -symmetrische Monomer **9a**, nicht aber das  $C_1$ -symmetrische Monomer **9e** isoliert wird. Diese Bevorzugung der höhersymmetrischen Geometrien wurde auch beim Dimer gefunden.

Die Experimente zeigen, dass die modifizierte Pulsdeposition für Substanzen mit einem Dampfdruck ähnlich dem der Propionsäure **9** (ca. 5 mbar bei Raumtemperatur) eine geeignete Methode zur gezielten Generierung von reinen Monomer- oder Dimer-Matrizes darstellt. Sie stößt jedoch bei Substanzen mit einem Dampfdruck unter 1 mbar (bei Raumtemperatur) deutlich an ihre Grenzen, vor allem hinsichtlich der Erzeugung reiner Dimer-Matrizes.

Als geeignete Substanzen für die modifizierte Pulsdeposition können daher solche angesehen werden, die bei Raumtemperatur einen Dampfdruck zwischen 1 und 5 mbar aufweisen und zusätzlich unterhalb von 150°C nicht zu thermischer Zersetzung neigen. Für thermisch labile Substanzen und solche mit niedrigerem Dampfdruck sollte hingegen die Deposition im *slow spray-on*<sup>[58]</sup> Verfahren gewählt werden.



## 6 Verbindungen mit niedrigem Dampfdruck

### 6.1 Einführung

Ist der Dampfdruck der zu untersuchenden Verbindung so gering, dass keine der gepulsten Methoden verwendet werden kann, muss man auf die *slow spray-on* Technik<sup>[58]</sup> zurückgreifen. Bei dieser steht die Substanz in direktem Kontakt mit dem Vakuum des Matrixkopfes und wird erst während des Fluges zum spektroskopischen Fenster mit dem Inertgas vermischt. Hierbei ist das Verhältnis von Substanz zu Inertgas bei einem gegebenen Inertgasfluss abhängig von der Temperatur der Substanz.

Im Hinblick auf die bisher aufgezeigten Ergebnisse erscheint die Untersuchung des Acetamids **11** (Dampfdruck  $< 0.1 \text{ mbar}^{[130]}$ ) sinnvoll, um einen Vergleich der Amide (Formamid **10** und Acetamid **11**) mit den entsprechenden Carbonsäuren (Ameisensäure **1** und Essigsäure **2**) machen zu können.

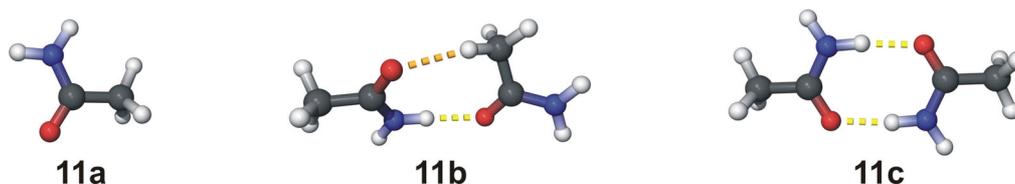
Auch die Benzoesäure **12** als kleinste aromatische Carbonsäure kann nur mittels der *slow spray-on* Technik untersucht werden, da ihr Dampfdruck bei Raumtemperatur ebenfalls unter  $0.1 \text{ mbar}^{[176]}$  liegt. Eine Untersuchung dieser Verbindung zum Vergleich mit den oben genannten Systemen erscheint sinnvoll.

Neben den Monocarbonsäuren sind auch die Dicarbonsäuren von Interesse, daher wurde die Oxalsäure **13** als kleinster Vertreter dieser Gruppe untersucht. Ihr Dampfdruck ist ebenfalls so niedrig, dass auch hier nur die *slow spray-on* Technik für eine Deposition in Frage kommt.

## 6.2 Acetamid

### 6.2.1 Einführung

Nach dem Formamid **10** ist das Acetamid **11** das kleinste unsubstituierte Amid. Es bildet ebenfalls Wasserstoffbrückenbindungen des biologisch wichtigen Typs N-H...O.



**Abbildung 6.1:** Acetamid Monomer **11a**, offenkettiges **11b** und cyclisches Dimer **11c**.

Erste matrixspektroskopische Untersuchungen des monomeren Acetamids **11a** wurden 1971 von King veröffentlicht,<sup>[177]</sup> der sie mit Gasphasenuntersuchungen<sup>[178]</sup> verglich. Er beobachtete im Bereich der Carbonyl-Streckschwingungen neben der Bande des Monomers noch mehrere andere Banden geringerer Intensität, von denen er die meisten auf Wechselwirkungen zwischen einzelnen, nach wie vor matrixisolierten Molekülen zurückführte („Neighbor interactions“). Die verbliebenen Banden ordnete er aufgrund von Experimenten, in denen er die Argon-Matrix mehrere Minuten bei 45 K temperte, einem Dimer zu, ohne allerdings einen genaueren Strukturvorschlag zu machen.

Räsänen, Murto und Kivinen untersuchten 1978 die Torsion der NH<sub>2</sub>-Gruppe von Amiden in Matrices anhand der Banden im fernen Infrarot.<sup>[179]</sup> Die Barriere für die Rotation um die C-N-Bindung wurde 1994 von Knudsen, Sala und Hase matrixspektroskopisch und quantenchemisch untersucht.<sup>[173]</sup>

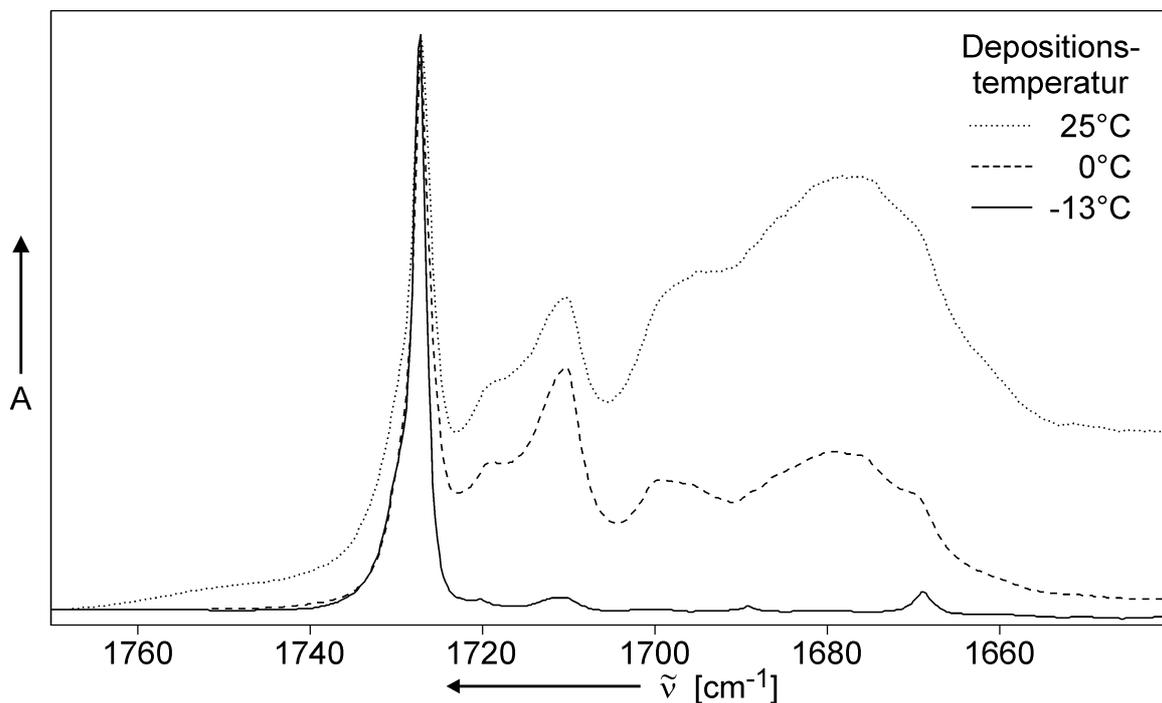
Eine quantenchemische Untersuchung der Molekülgeometrie wurde 1979 von Fogarsi und Mitarbeitern durchgeführt. Aufgrund ihrer Hartree-Fock-Berechnungen wiesen sie dem Molekül eine planare Geometrie zu.<sup>[180]</sup>

Die Aggregation des Acetamids **11** wurde durch Matrixisolation des Monomers **11a**, Tempern mittels *free warm-up* und quantenchemische Rechnungen genauer untersucht.

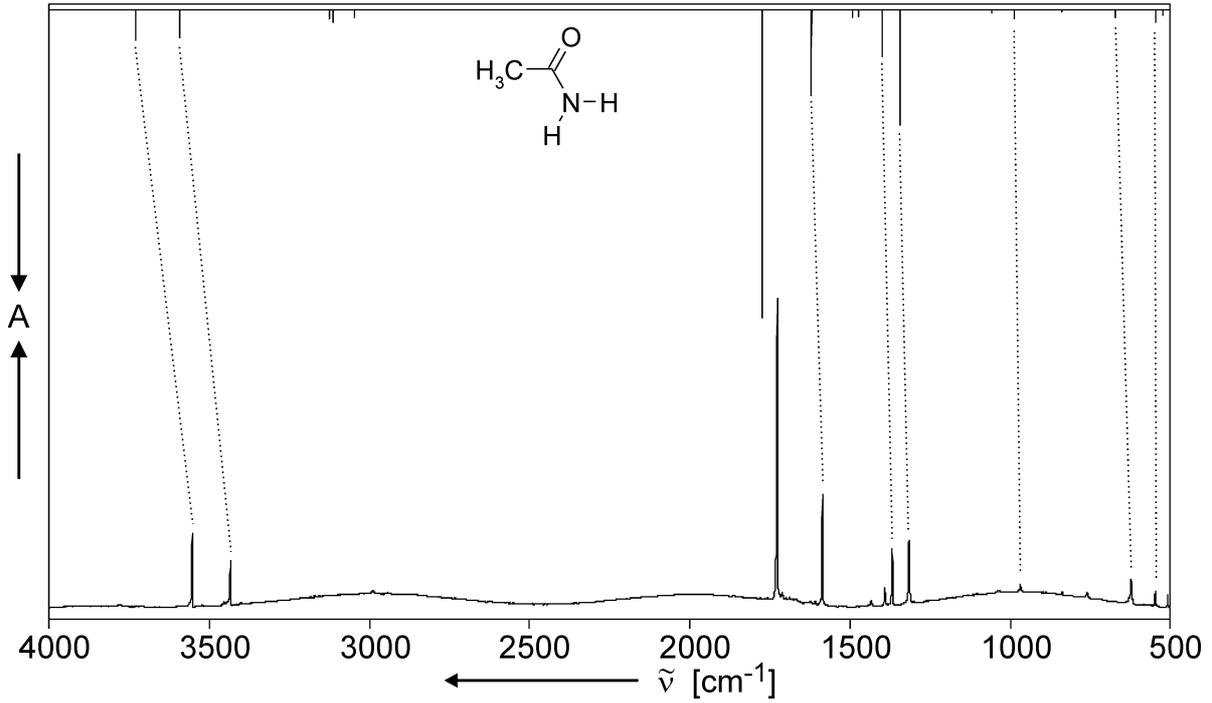
## 6.2.2 Ergebnisse der Experimente

Acetamid **11** wurde mittels *slow spray-on* Deposition matrixisoliert. Belässt man die Probe während der Deposition bei Raumtemperatur, so enthält die Matrix noch einen großen Anteil Dimere. Dieser lässt sich durch Kühlung der Probe auf 0°C verringern (s. Abbildung 6.2), da der Dampfdruck des Acetamids verringert und somit bei konstantem Argon-Fluss das Mischungsverhältnis zugunsten des Inertgases verschoben wird. Die so verringerte „Konzentration“ des Acetamids bedingt gemäß dem Prinzip von Le Châtelier eine Verschiebung des Gleichgewichts zwischen Monomeren und Dimeren zugunsten der Monomere.

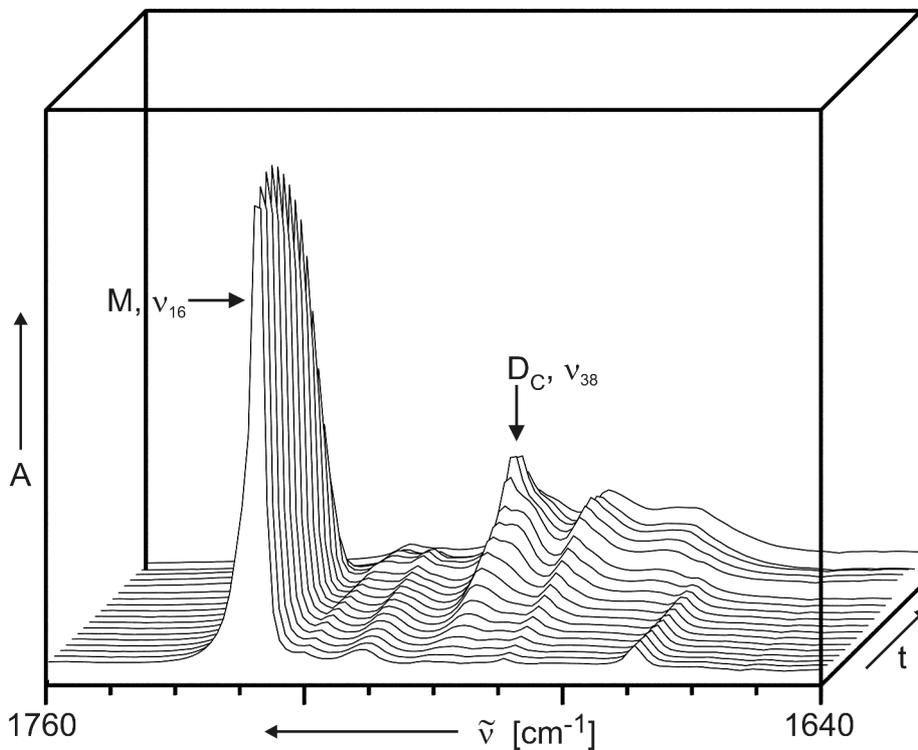
In dem so erhaltenen Spektrum erkennt man neben der Monomer-Bande bei 1727 cm<sup>-1</sup> weitere Banden bei ca. 1710, 1700 und 1675 cm<sup>-1</sup>. Diese wurden von King der „neighbor interaction“ (1710 cm<sup>-1</sup>), einem Dimer (1699 cm<sup>-1</sup>) und einer polymeren Spezies (1680 cm<sup>-1</sup>) zugeordnet.<sup>[177]</sup>



**Abbildung 6.2:** Vergleich der Argon-Matrizes von Acetamid **11** bei verschiedenen Depositionstemperaturen (25°C: MG249A11.0, 0°C: MG251A11.0; -13°C: MG253A11.0). Durch Extrapolation von Literaturdaten<sup>[130]</sup> kann abgeschätzt werden, dass der Dampfdruck des Acetamids bei 0°C ca. 1/8 und bei -13°C ca. 1/25 des Dampfdrucks bei 25°C beträgt.



**Abbildung 6.3:** IR-Spektrum des matrixisolierten monomeren Acetamids **11a**; **oben:** berechnetes Spektrum (B3LYP/cc-pVTZ); **unten:** experimentelles Spektrum (*slow spray-on* Deposition,  $-13^\circ\text{C}$ ; MG253A11.0).



**Abbildung 6.4:** Tempern (*free warm-up*) von Acetamid Monomer **11a** (M) in einer Argon Matrix, Bildung des cyclischen Dimers **11c** ( $D_C$ ); Bereich der Carbonyl-Streckschwingungen (MG253A12.x).

Durch Kühlung der Probe auf  $-13^{\circ}\text{C}$  konnten die Aggregate fast vollständig vermieden werden. Die so erzeugte Matrix enthält nur noch das monomere Acetamid **11a** (Abbildung 6.3). Die Carbonyl-Streckschwingung erreicht nach einer Depositionszeit von einer Stunde eine Intensität, die in etwa der der entsprechenden Schwingung der monomeren Essigsäure **2a** nach zwei Stunden Pulsdeposition entspricht.

Im Verlauf der *free warm-up* Tempers der Monomer-Matrix kann man die Abnahme der Bande bei  $1727\text{ cm}^{-1}$  und die Zunahme der Bande bei  $1700$  beobachten. Eine Bande bei  $1710\text{ cm}^{-1}$  wurde während des Tempers nicht beobachtet (s. Abbildung 6.4), allerdings entsteht eine breite Bande von ca.  $1693$  bis  $1665\text{ cm}^{-1}$ .

### 6.2.3 Diskussion

Acetamid **11** konnte als reines Monomer in einer Argon-Matrix isoliert werden. Die IR-spektroskopischen Daten sind in Tabelle 6.2 aufgeführt.

Für die Zuordnung der in den Depositionsspektren bei höheren Temperaturen und während des Tempers beobachteten Spezies erscheint ein Vergleich der beobachteten Carbonyl-Streckschwingungen mit berechneten Wellenzahlen sinnvoll. Diesen Vergleich zeigt Tabelle 6.1, in der die berechneten Wellenzahlen zudem mit einem konstanten Faktor von 0.974 skaliert wurden, der sich am Monomer **11a** orientiert. Die so erhaltenen Wellenzahlen sprechen dafür, dass die Bande bei  $1710\text{ cm}^{-1}$  dem offenkettigen Dimer **11b** zuzuordnen ist und die Bande bei  $1700\text{ cm}^{-1}$  dem cyclischen Dimer **11c**. Die Schwingungen des cyclischen Dimers sind in Tabelle 6.3 aufgeführt.

**Tabelle 6.1:** Vergleich der beobachteten mit den berechneten (B3LYP/cc-pVTZ) Carbonyl-Streckschwingungen des Acetamids **11**. Der verwendete Skalierungsfaktor wurde auf das Monomer **11a** ausgerichtet.

	Monomer <b>11a</b>	Dimer <b>11b</b>	Dimer <b>11c</b>
Argon Matrix	1727.1	1710.4	1700.2
B3LYP/cc-pVTZ	1773.4	1752.2	1744.5
Skalierung 0.974	1727.3	1706.6	1699.1
Literatur <sup>[177]</sup>	1728	1710	1699

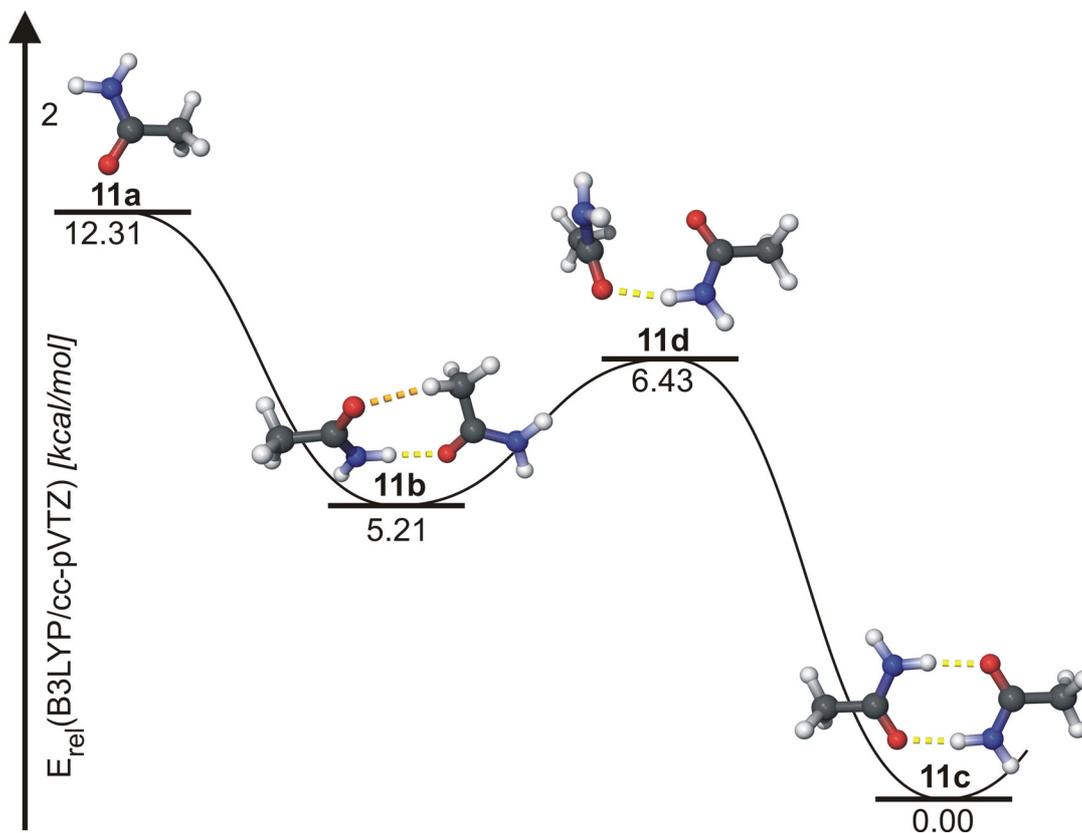
**Tabelle 6.2:** IR-Absorptionen des Acetamid Monomers **11a**, Vergleich der experimentellen Daten mit berechneten Schwingungen und Literaturdaten.<sup>[173]</sup>

Mode	B3LYP/cc-pVTZ			Ar-Matrix		Zuordnung
	$\tilde{\nu}$ (cm <sup>-1</sup> )	I <sub>rel</sub>	Sym.	$\tilde{\nu}_{\text{Exp}}$ (cm <sup>-1</sup> )	$\tilde{\nu}_{\text{Lit}}$ (cm <sup>-1</sup> )	
21	3730.1	9	A'	3553.2	3552	$\nu_{\text{as}}(\text{NH}_2)$
20	3592.7	8	A'	3433.5	3432	$\nu_{\text{s}}(\text{NH}_2)$
19	3124.6	3	A'	3021.7	-	$\nu_{\text{as}}(\text{CH}_3)$
18	3112.5	3	A''	2988.6	2989	$\nu_{\text{as}}(\text{CH}_3)$
17	3046.0	2	A'	2942.1	2943	$\nu_{\text{s}}(\text{CH}_3)$
16	1773.4	100	A'	1727.1	1726	$\nu(\text{C}=\text{O})$
15	1620.0	28	A'	1585.9	1585	$\delta(\text{NH}_2)$
14	1492.0	2	A'	1433.8	1433	$\delta_{\text{s}}(\text{CH}_3)$
13	1474.1	2	A''	1390.3	1390	$\delta_{\text{a}}(\text{CH}_3)$
12	1400.2	15	A'	1367.6	1368	$\gamma(\text{CH}_3)$
11	1342.7	37	A'	1315.4	1315	$\nu(\text{C}-\text{N})$
9	1056.8	1	A''	1035.1	1035	$\rho_{\text{a}}(\text{CH}_3)$
8	985.7	3	A'	968.1	968	$\rho_{\text{s}}(\text{CH}_3)$
7	839.3	0	A'	837.6	838	$\nu(\text{C}-\text{C})$
6	672.3	2	A''	621.3	622	t(C-N)
5	546.1	3	A'	547.1	547	$\delta(\text{C}-\text{C}=\text{O})$
4	523.8	1	A''	508.3	508	t(CN)

**Tabelle 6.3:** IR-Absorptionen des cyclischen Acetamid Dimers **11c**, Vergleich der experimentellen Daten mit berechneten Schwingungen und Literaturdaten<sup>[177]</sup>. Die breite Bandenstruktur zwischen 3100 und 3600 cm<sup>-1</sup> wird durch Fermi-Resonanz hervorgerufen. Die Indices ‚frei‘ bzw. ‚WBB‘ geben an, ob es sich um ein an der Wasserstoffbrückenbindung beteiligtes Amid-Proton handelt. Die berechneten Schwingungen von nicht beobachteten Banden (zu geringe Intensität oder IR-inaktiv) sind nicht aufgeführt.

Mode	B3LYP/cc-pVTZ			Ar-Matrix		Zuordnung
	$\tilde{\nu}$ (cm <sup>-1</sup> )	I <sub>rel</sub>	Sym.	$\tilde{\nu}_{\text{Exp}}$ (cm <sup>-1</sup> )	$\tilde{\nu}_{\text{Lit}}$ (cm <sup>-1</sup> )	
				3525.6	3515	
48	3680.6	7	B <sub>u</sub>	3445.9	-	$\nu_{\text{frei}}(\text{N-H})$
46	3301.7	100	B <sub>u</sub>	3398.9	-	$\nu_{\text{WBB}}(\text{N-H})$
44	3120.3	2	B <sub>u</sub>	3320.6	-	$\nu(\text{H}_2\text{C-H})$
42	3115.6	0	A <sub>u</sub>	3207.0	-	$\nu_{\text{as}}(\text{H-CH-H})$
39	3046.8	1	B <sub>u</sub>	3140.4	3140	$\nu(\text{C-H})$
				3105.2	-	
38	1744.5	42	B <sub>u</sub>	1700.2	1699	$\nu(\text{C=O})$
29	1415.3	15	B <sub>u</sub>	1396.9	1395	$\delta_{\text{WBB}}(\text{C-N-H})$
27	1385.2	2	B <sub>u</sub>	1385.4	1382	$\gamma(\text{CH}_3)$
20	874.8	5	A <sub>u</sub>	832.0	-	$\gamma_{\text{WBB}}(\text{C-N-H})$

Die breite Bande zwischen 1693 und 1665 cm<sup>-1</sup> lässt sich keinem der Aggregate zuordnen. In einem Vergleichsexperiment wurde Acetamid ohne Argon unter den gleichen Bedingungen deponiert. Die Carbonyl-Streckschwingung in dem so erhaltenen Tieftemperaturspektrum von Acetamid besitzt ein Maximum bei 1672 cm<sup>-1</sup> und stimmt in ihrer Lage gut mit der während des Temprens beobachteten Bande überein.



**Abbildung 6.5:** Energetik der Aggregation von Acetamid berechnet auf dem B3LYP/cc-pVTZ Niveau, alle Energien inkl. ZPE.

Neben den berechneten Wellenzahlen sprechen auch die relativen Energien der einzelnen Aggregate (s. Abbildung 6.5) für die getroffene Zuordnung. Die Berechnungen des offenkettigen Dimers **11b** ergaben, dass es einer planaren Gesamtgeometrie ausweicht, um, analog zum linearen Dimer **9b** der Propionsäure (s. S. 79), eine zusätzliche Wasserstoffbrücke vom Typ C-H...O zu bilden. Die Barriere für die Umlagerung des offenkettigen Dimers **11b** in das cyclische Dimer **11c** ist mit 1.22 kcal/mol noch kleiner als die entsprechende Barriere für die Essigsäure **2** (1.76 kcal/mol). Es sollte daher nicht möglich sein, das Dimer **11b** während des *free warm-up* zu beobachten. Dies trifft auf die Bande bei  $1710\text{ cm}^{-1}$  zu.

Es kann daher festgestellt werden, dass bei der Aggregation des Acetamid Monomers **11a** in einer Argon-Matrix, analog zur Essigsäure **2**, nur die Bildung eines cyclischen Dimers **11c**, nicht aber des offenkettigen Dimers **11b** beobachtet werden kann.

## 6.3 Benzoessäure

### 6.3.1 Einführung

Benzoessäure **12** ist die kleinste aromatische Carbonsäure. Reva und Stepanian führten bereits 1995 matrixspektroskopische Untersuchungen an monomerer und dimerer Benzoessäure durch.<sup>[40, 181]</sup> Sie isolierten monomere Benzoessäure **12a** in einer Argon-Matrix, welche sie mit einem *Capping* aus Krypton überzogen. Nach längerem Tempern der Matrix bei 33 K fanden sie neben dem Monomer zwei dimere Spezies, welche sie als ein offenes Dimer **12b** mit einer und ein cyclisches Dimer **12c** mit zwei Wasserstoffbrückenbindungen identifizierten. Sie untermauerten ihre Interpretationen der Ergebnisse mit semiempirischen AM1-Rechnungen.

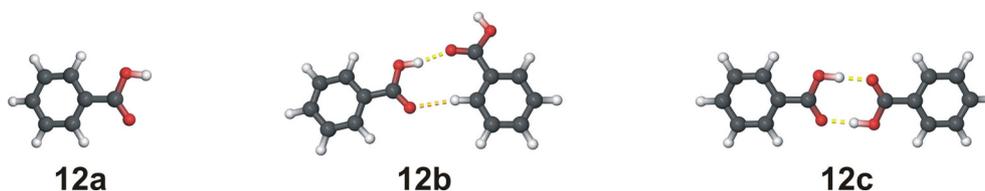
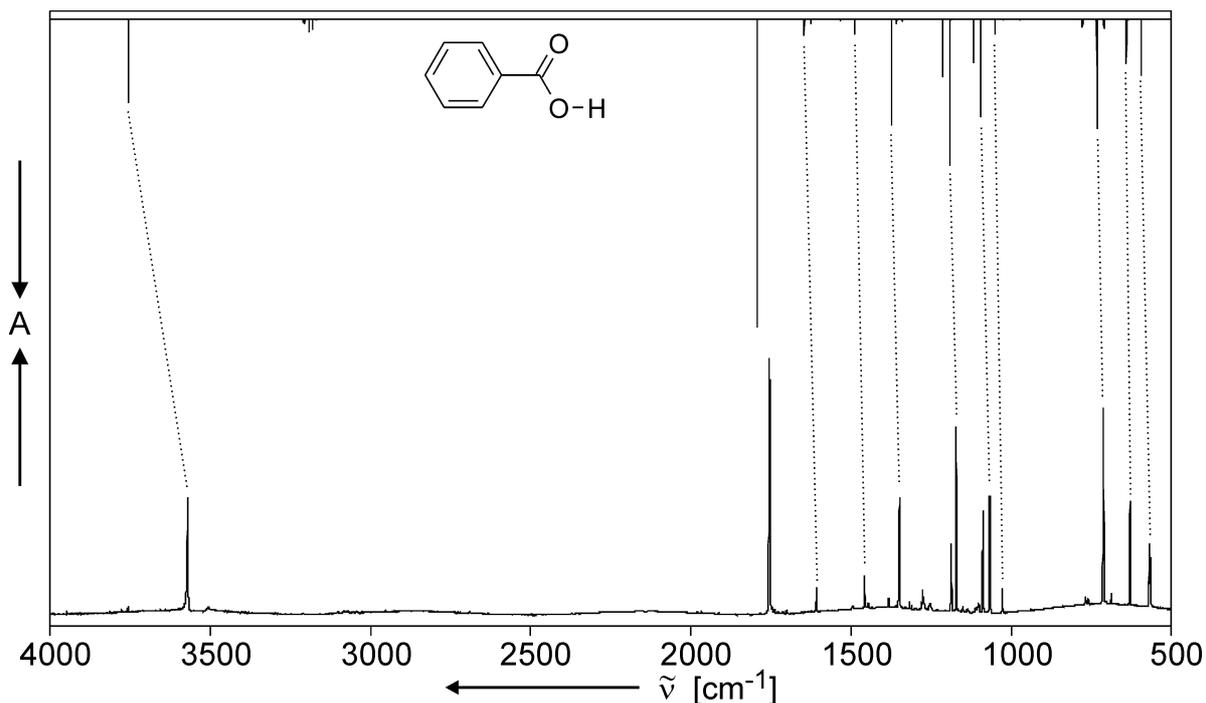


Abbildung 6.6: Benzoessäure Monomer **12a**, offenes **12b** und cyclisches Dimer **12c**.

Dem Tempern bei konstanter Temperatur wird in dieser Arbeit das Tempern mittels *free warm-up* gegenübergestellt. Zudem wurden die einzelnen Aggregate auf einem wesentlich höheren quantenchemischen Niveau als dem von Reva und Stepanian verwendeten AM1 berechnet, um einen besseren Vergleich mit den untersuchten aliphatischen Monocarbonsäuren anstellen zu können.

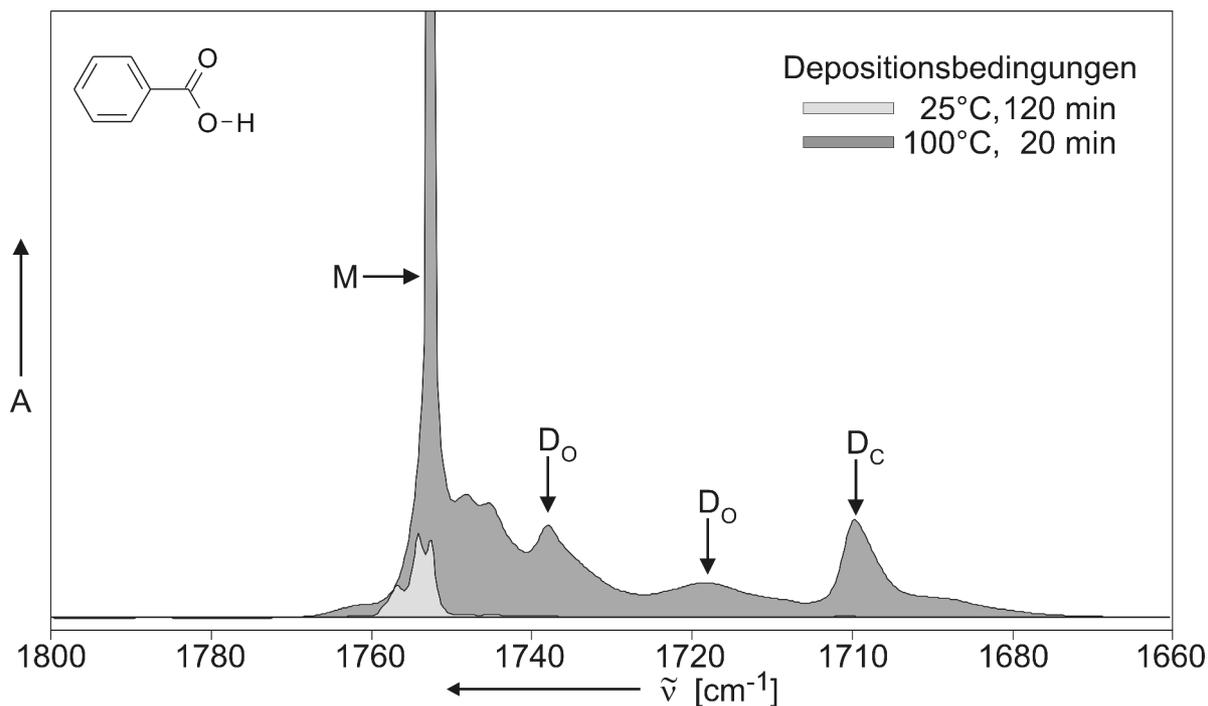
### 6.3.2 Ergebnisse der Experimente

Durch *slow spray-on* Deposition bei Raumtemperatur konnte Benzoessäure **12** monomer matrixisoliert werden (s. Abbildung 6.7). Durch Erhöhung der Temperatur erhält man im Bereich der Carbonyl-Streckschwingungen neben den Banden des Monomers **12a** noch weitere Banden, welche mit den von Reva und Stepanian beobachteten Banden für die Dimere **12b** und **12c** übereinstimmen.



**Abbildung 6.7:** IR-Spektrum der matrixisolierten monomeren Benzoesäure **12a**; **oben:** berechnetes Spektrum (B3LYP/cc-pVTZ); **unten:** experimentelles Spektrum (*slow spray-on* Deposition, RT; MG258A12.0).

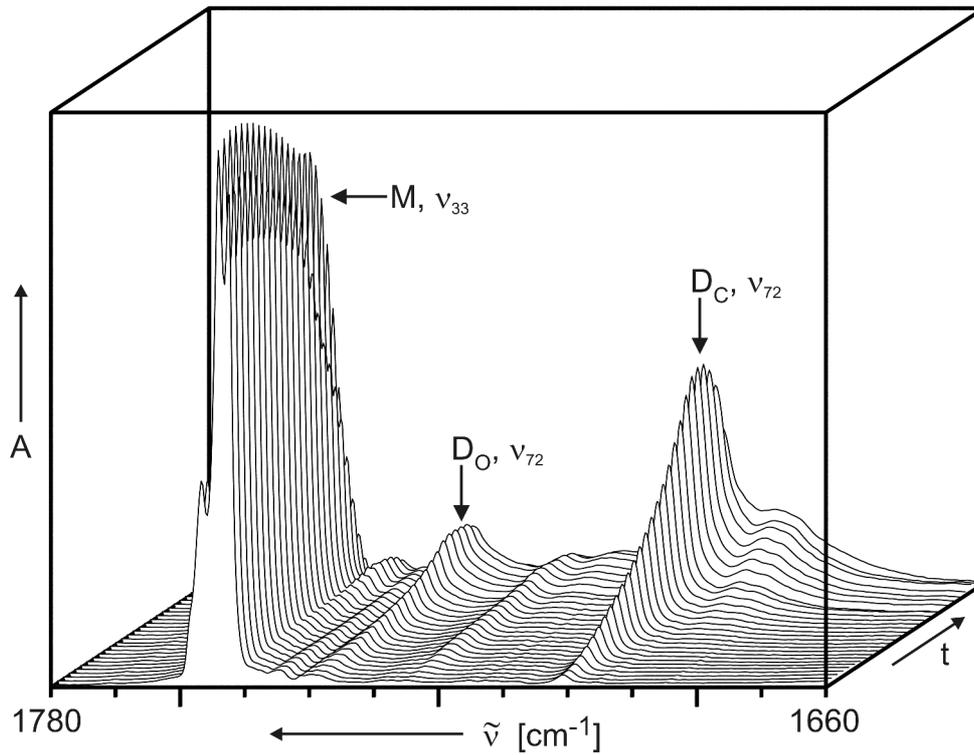
Den Vergleich zwischen der Deposition bei Raumtemperatur und der bei  $100^\circ\text{C}$  zeigt Abbildung 6.8. Hier wird zudem das Problem der *slow spray-on* Deposition deutlich: bereits nach 20 Minuten Deposition bei einer Temperatur von  $100^\circ\text{C}$  überschreitet die Bande der Carbonyl-Streckschwingung des Monomers **12a** bereits das (instrumentell bedingte) Intensitätsmaximum, während die Banden der Dimere im Vergleich eine geringe Intensität aufweisen. Eine Erhöhung des Dimer-Anteils ließe sich durch eine Reduzierung des Verhältnisses von Argon und Benzoesäure erreichen, wodurch aber gleichzeitig der Effekt der Matrixisolation verringert bzw. aufgehoben würde. Es ist daher unter diesen Bedingungen nicht möglich, ein Spektrum zu erhalten, welches nur matrixisolierte Dimere enthält.



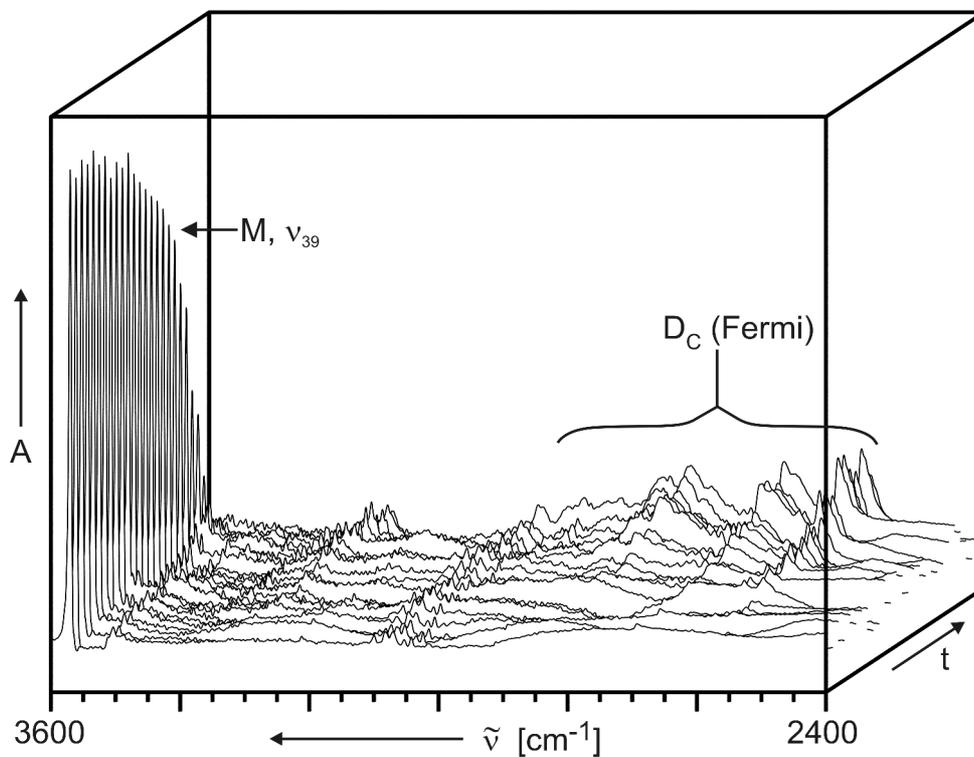
**Abbildung 6.8:** Vergleich des Carbonyl-Streckschwingungsbereichs matrixisolierter Benzoesäure bei verschiedenen Depositionstemperaturen. Neben dem Monomer **12a** (M) wird bei höherer Temperatur offenkettiges **12b** ( $D_o$ ) und cyclisches Dimer **12c** ( $D_c$ ) in geringen Mengen matrixisoliert (25°C: MG258A12.0, 100°C: MG260A01.0).

Für die Untersuchung der Aggregation wurde eine Matrix mit monomerer Benzoesäure **12a** getempert. Im Verlauf dieses *free warm-ups* kann man die Abnahme der Banden des Monomers **12a** beobachten. Gleichzeitig entstehen neue Banden, die sich dem cyclischen Dimer **12c** zuordnen lassen. Gegen Ende des Temper-Experimentes lässt sich ferner die Bildung einer dritten Spezies beobachten, die anhand ihrer Carbonyl-Streckschwingung als offenkettiges Dimer **12b** identifiziert werden kann (s. Abbildung 6.9).

Im Bereich der C-H- und O-H-Streckschwingungen kann man beobachten, dass die Banden des entstehenden Benzoesäure Dimers **12c** analog zu den aliphatischen Carbonsäuren durch Fermi-Resonanz aufgespalten werden (s. Abbildung 6.10).



**Abbildung 6.9:** Tempern (*free warm-up*) von Benzoesäure Monomer **12a** (M) in einer Argon Matrix, Bildung des cyclischen Dimers **12c** (D<sub>C</sub>) und des offenkettigen Dimers **12b** (D<sub>O</sub>); Bereich der Carbonyl-Streckschwingungen (MG258A12.x).



**Abbildung 6.10:** Tempern (*free warm-up*) von Benzoesäure Monomer **12a** (M) in einer Argon Matrix, Bildung des cyclischen Dimers **12c** (D<sub>C</sub>, breite Bandenstruktur aufgrund von Fermi-Resonanz); Bereich der C-H- und O-H-Streckschwingungen (MG258A12.x).

### 6.3.3 Diskussion

Das erhaltene Spektrum monomerer Benzoesäure **12a** stimmt sowohl mit den Literaturdaten als auch den berechneten Spektren sehr gut überein. Die entsprechenden Daten sind in Tabelle 6.4 aufgeführt.

Während des *free warm-up* wird zunächst die Bildung des cyclischen Dimers **12c** beobachtet, nicht jedoch die des linearen Dimers **12b**. Dies entspricht den Beobachtungen, die bei der Aggregation der Essigsäure **2** (Kap. 4.2, S. 30) und dem Acetamid **11** (Kap. 6.2, S. 92) gemacht wurden und steht im Einklang mit der berechneten Barriere von 1.48 kcal/mol für die Umlagerung des offenkettigen Benzoesäure-Dimers **12b** in das cyclische Dimer **12c** (s. Abbildung 6.11). Die spektroskopischen Daten des Dimers **12c** sind in Tabelle 6.5 aufgeführt.

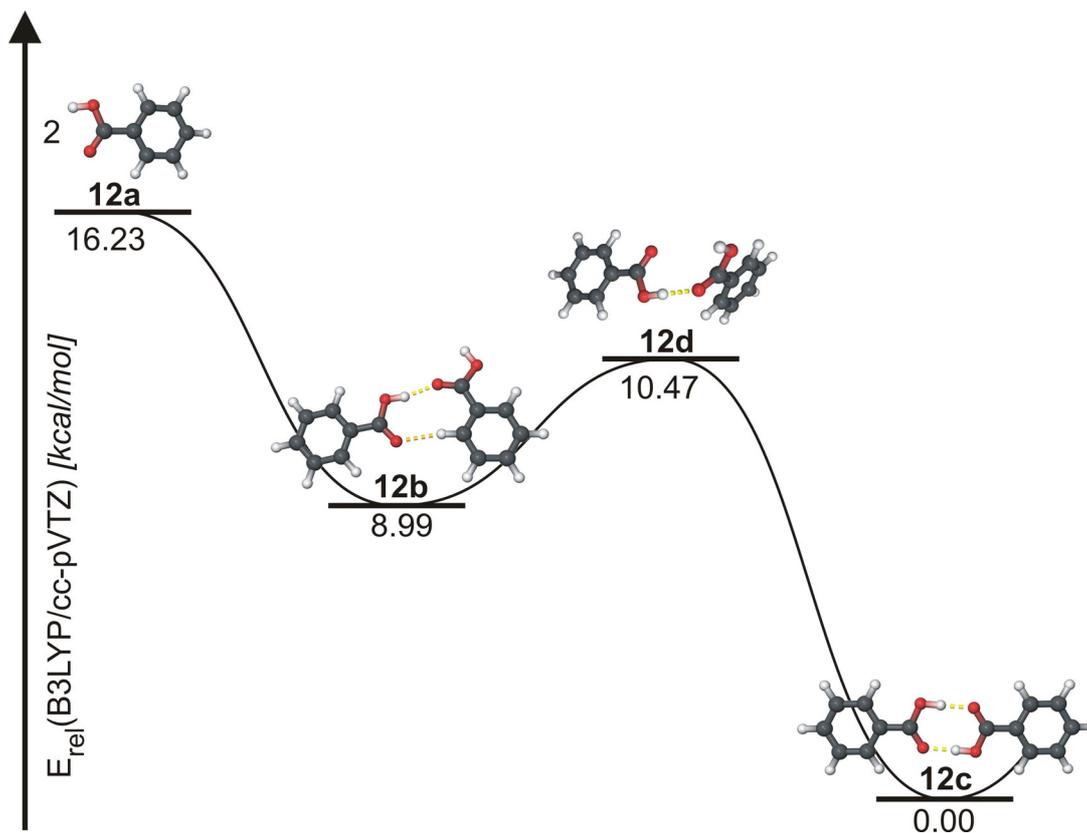
Abweichend von den Beobachtungen bei Essigsäure **2** und Acetamid **11** konnte hier gegen Ende des *free warm-up* zusätzlich die Bildung des linearen Dimers **12b** beobachtet werden. Ein Vergleich der beobachteten mit den berechneten Wellenzahlen dieser Schwingungen (s. Tabelle 6.6, S. 106) schließt eine falsche Zuordnung der Banden aus. Die dem offenkettigen Dimer **12b** zugeordnete  $\nu(\text{C}=\text{O})$ -Schwingung tritt allerdings erst gegen Ende des *free warm-up* auf, zu einem Zeitpunkt, zu dem das Argon einen hohen Dampfdruck aufweist. Gleichzeitig kann auch die Bildung einer breiten Bande bei  $1700 - 1680 \text{ cm}^{-1}$  beobachtet werden. Diese lässt sich anhand eines Vergleichsexperiments, bei dem Benzoesäure ohne Argon unter gleichen Bedingungen deponiert wurde, der Carbonyl-Streckschwingung fester, nicht matrixisolierter Benzoesäure zuordnen.

**Tabelle 6.4:** IR-Absorptionen des Benzoesäure Monomers **12a**, Vergleich der experimentellen Daten mit berechneten Schwingungen und Literaturdaten.<sup>[181]</sup> Die berechneten Schwingungen von nicht beobachteten Banden (zu geringe Intensität) sind nicht aufgeführt.

Mode	B3LYP/cc-pVTZ			Ar-Matrix		Zuordnung
	$\tilde{\nu}$ (cm <sup>-1</sup> )	I <sub>rel</sub>	Sym.	$\tilde{\nu}_{\text{Exp}}$ (cm <sup>-1</sup> )	$\tilde{\nu}_{\text{Lit}}$ (cm <sup>-1</sup> )	
39	3756.3	27	A'	3570.3	3567	v(O-H)
33	1791.8	100	A'	1754.3	1752	v(C=O)
32	1646.3	5	A'	1607.1	1606	v <sub>s</sub> (C <sub>6</sub> )/δ(CH)
29	1488.1	4	A'	1457.1	1456	v <sub>as</sub> (C <sub>6</sub> )/δ(CH)
28	1371.9	33	A'	1348.3	1347	v(C-COOH)
27	1356.3	1	A'	1276.8	1275	v <sub>as</sub> (C <sub>6</sub> )/δ(CH)
26	1340.7	0	A'	1252.7	1251	v <sub>s</sub> (C <sub>6</sub> )/δ(CH)
25	1212.2	18	A'	1186.9	1185	δ(COH)/δ(CH)
24	1190.9	47	A'	1171.1	1169	δ(COH)/δ(CH)
23	1186.9	0	A'	1101.0	1100	δ(C-H)
22	1117.6	12	A'	1087.5	1086	v(C-O)/δ(CH)
21	1093.6	32	A'	1066.8	1066	v(C-O)/δ(CH)
20	1049.6	5	A'	1028.4	1027	δ <sub>s</sub> (C <sub>6</sub> )
16	971.6	0	A''	937.2	937	γ <sub>as</sub> (HCCH)
13	777	2	A'	767.4	767	δ(C <sub>6</sub> )/δ(OCO)
12	732.4	35	A''	711.1	711	γ <sub>s</sub> (HCCH)
11	710.2	3	A''	687.4	687	γ(HCCH)/γ(C <sub>6</sub> )
10	640.1	14	A'	629.1	628	δ(C <sub>6</sub> )/δ(OCO)
8	594.5	18	A''	566.7	565	γ(H-O-C-C)

**Tabelle 6.5:** IR-Absorptionen des cyclischen Benzoessäure Dimers **12c**, Vergleich der experimentellen Daten mit berechneten Schwingungen und Literaturdaten.<sup>[181]</sup> Die breite Bandenstruktur zwischen 2500 und 3500 cm<sup>-1</sup> wird durch Fermi-Resonanz hervorgerufen. Die berechneten Schwingungen von nicht beobachteten Banden (zu geringe Intensität oder IR-inaktiv) sind nicht aufgeführt.

B3LYP/cc-pVTZ				Ar-Matrix		Zuordnung
Mode	$\tilde{\nu}$ (cm <sup>-1</sup> )	I <sub>rel</sub>	Sym.	$\tilde{\nu}_{\text{Exp}}$ (cm <sup>-1</sup> )	$\tilde{\nu}_{\text{Lit}}$ (cm <sup>-1</sup> )	
				3312.9	3312	
83	3212.2	0	B <sub>u</sub>	3080.7	-	$\nu(\text{C}_6\text{-H})$
82	3206.1	0	B <sub>u</sub>	3010.4	-	$\nu(\text{C}_2\text{-H})$
80	3190.4	0	B <sub>u</sub>	2887.4	-	$\nu_{\text{s}}(\text{C}_{3/4/5}\text{-H})$
78	3180.7	0	B <sub>u</sub>	2734.3	-	$\nu_{\text{as}}(\text{C}_{3/5}\text{-H})$
76	3168.3	0	B <sub>u</sub>	2699.2	-	$\nu_{\text{as}}(\text{C}_{3/4/5}\text{-H})$
74	3117.5	100	B <sub>u</sub>	2641.4	-	$\nu(\text{O-H})$
				2607.5	2605	
				2578.7	2575	
72	1733.6	14	B <sub>u</sub>	1700.6	1699	$\nu(\text{C=O})$
61	1467.9	2	B <sub>u</sub>	1433.5	1430	$\delta_{\text{as}}(\text{C-O-H})$
58	1349.1	4	B <sub>u</sub>	1323.1	1322	$\nu_{\text{as}}(\text{C}_6)$
56	1324.8	8	B <sub>u</sub>	1300.3	1296	$\delta_{\text{as}}(\text{C-H})$
40	1010.0	2	A <sub>u</sub>	967.4	960	$\gamma_{\text{as}}(\text{C-O-H})$
27	727.5	2	A <sub>u</sub>	668.8	670	$\gamma(\text{HCCH})$
20	552.9	1	B <sub>u</sub>	550.9	547	$\delta(\text{C-C-O})$



**Abbildung 6.11:** Energetik der Aggregation von Benzoesäure berechnet auf dem B3LYP/cc-pVTZ Niveau, alle Energien inkl. ZPE.

Die Benzoesäure **12** fügt sich, was den Zusammenhang zwischen der Umlagerungs-Barriere und dem Ausbleiben spektroskopischer Hinweise auf das offenkettige Dimer während des Temperns angeht, in das bisher erhaltene Bild von Carbonsäuren und Amiden ein.

**Tabelle 6.6:** Vergleich der beobachteten mit den berechneten (B3LYP/cc-pVTZ) Carbonyl-Streckschwingungen der Benzoesäure **12**. Der verwendete Skalierungsfaktor wurde auf das Monomer **12a** ausgerichtet.

	Monomer <b>12a</b>	Dimer <b>12b</b>	Dimer <b>12c</b>
Argon Matrix	1754.3	1738.2	1700.6
B3LYP/cc-pVTZ	1791.8	1769.5	1733.6
Skalierung 0.979	1754.2	1732.3	1697.2
Literatur <sup>[181]</sup>	1752	1738	1699

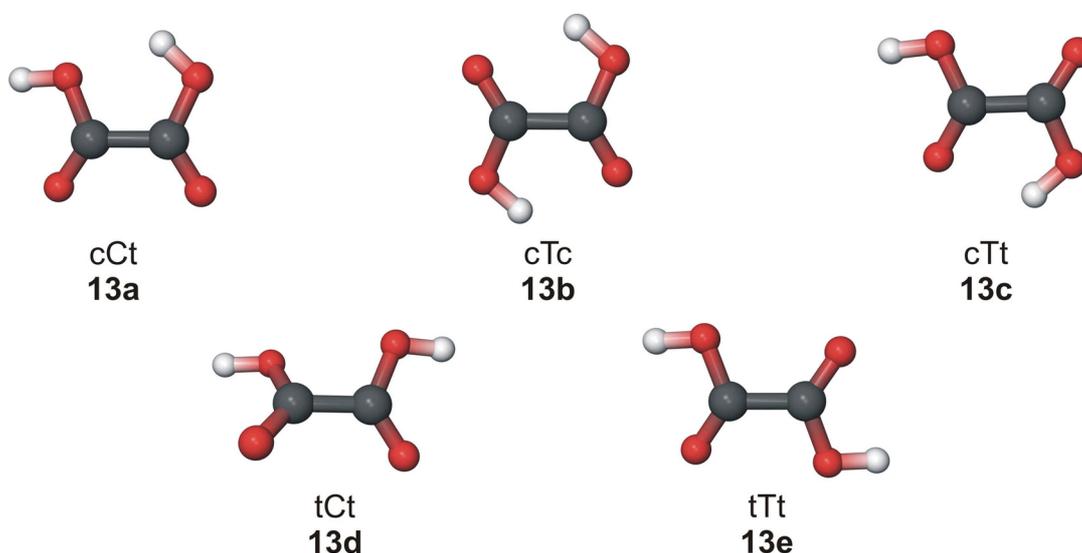
## 6.4 Oxalsäure

### 6.4.1 Einführung

Oxalsäure **13** ist die kleinste aliphatische Dicarbonsäure. Ihre thermische Zersetzung war bereits 1832, im ersten Band von Liebigs Annalen der Chemie, ein Streitpunkt zwischen Gay-Lussac und E. Turner.<sup>[182]</sup> Mehr als 150 Jahre später wurde die Kristallstruktur der Oxalsäure röntgenspektroskopisch untersucht.<sup>[183]</sup>

R. L. und T. E. Redington veröffentlichten 1978 das IR-Spektrum monomerer Oxalsäure sowie ihrer mono- und dideuterierten Derivate in Neon-Matrizes<sup>[48]</sup> und gingen dabei auch auf die Konformation der monomeren Oxalsäure ein. R.L. Redington veröffentlichte 1986 auch quantenchemische Untersuchungen hierzu.<sup>[184]</sup>

Weitere matrixspektroskopische und quantenchemische Untersuchungen der monomeren Oxalsäure wurden von Räsänen und Mitarbeitern durchgeführt. Ihr Interesse galt hierbei vor allem der durch UV- und IR-Strahlung hervorgerufenen Umwandlung einzelner Konformere ineinander.<sup>[44, 185]</sup> Sie initiierten zudem eine Nomenklatur für die Unterscheidung der einzelnen Konformere (s. Abbildung 6.12).



**Abbildung 6.12:** Verschiedene Konformere monomerer Oxalsäure. Die Buchstabenkombinationen beschreiben die relative Konformation bezüglich der C-C-O-H- (kleine Buchstaben) und O-C-C-O-Diederwinkel (großer Buchstabe).

Bei dieser aus drei Buchstaben zusammengesetzten Bezeichnung beschreibt der mittlere (großgeschriebene) die relative Konformation bezüglich des Diederwinkels O-C-C-O während die äußeren (kleingeschriebenen) Buchstaben sich auf die H-O-C-C Diederwinkel beziehen; c kennzeichnet eine *cis*-, t eine *trans*-Konformation.

Räsänen konnte zeigen, dass das matrixisolierte cTc-Konformer **13b** durch Bestrahlung mit Licht der Wellenlänge 270 nm in das cTt-Konformer **13c** überführt wird. Diese Bestrahlung führt aber gleichzeitig auch zu einer Zersetzung der Moleküle. Bestrahlung mit IR-Licht  $> 2000 \text{ cm}^{-1}$  führt zu einer Umkehrung dieses Prozesses, Anregung der Obertöne durch IR-Licht von  $6800\text{-}6700 \text{ cm}^{-1}$  führt zusätzlich zur Bildung des tTt-Konformers **13e**. Räsänens quantenchemische Berechnungen auf den Niveaus B3LYP/6-31G\*\*, HF/6-31G\*\* und MP2/6-311++G\*\* ergaben für alle Konformere eine planare Struktur. Auf allen Niveaus bildete das cTc-Konformer **13b** das energetische Minimum, gefolgt vom cTt- (**13c**) und dem in kristalliner Oxalsäure vorliegenden tTt-Konformer **13e**. Theoretische Untersuchungen der Umwandlungen der einzelnen Konformere ineinander wurden auch von Higgins, Zhou, Liu und Huang veröffentlicht.<sup>[186]</sup>

Aufgrund der verschiedenen Konformationen des Monomers ist theoretisch eine Vielzahl von Dimeren möglich. Die Experimente von Räsänen zeigen zwar, dass in der Matrix primär das cTc-Konformer **13b** vorliegt, welches dann auch entsprechende Dimere bilden sollte, eine quantenchemische Betrachtung der möglichen Dimere erscheint jedoch alles andere als obsolet. Angesichts der vielen möglichen Permutationen beschränkt sich diese Betrachtung jedoch auf Dimere, die sich aus den drei von Räsänen beobachteten und energetisch günstigsten Konformeren zusammensetzen.

#### 6.4.2 Ergebnisse der quantenchemischen Betrachtung

Zunächst wurden die fünf Monomere **13a-e** auf den gleichen quantenchemischen Niveaus berechnet, die auch für die anderen Systeme in dieser Arbeit verwendet wurden. Laut Räsänen liegen alle Monomere in einer planaren Konformation vor.<sup>[185]</sup> Abweichend hiervon ergaben die Berechnungen der planaren  $C_{2v}$ -symmetrischen Struktur des tCt-Konformers **13d** auf allen Niveaus einen Übergangszustand. Die berechnete Minimum-Struktur ist  $C_2$ -symmetrisch mit einem O-C-C-O-Diederwinkel zwischen  $28.7^\circ$  (B3LYP/cc-pVTZ) und  $40.5^\circ$  (B3LYP/6-311++G(d,p)). Auf dem MP2/6-311++G(d,p)-Niveau ist ferner das tTt-Konformer **13e** nur

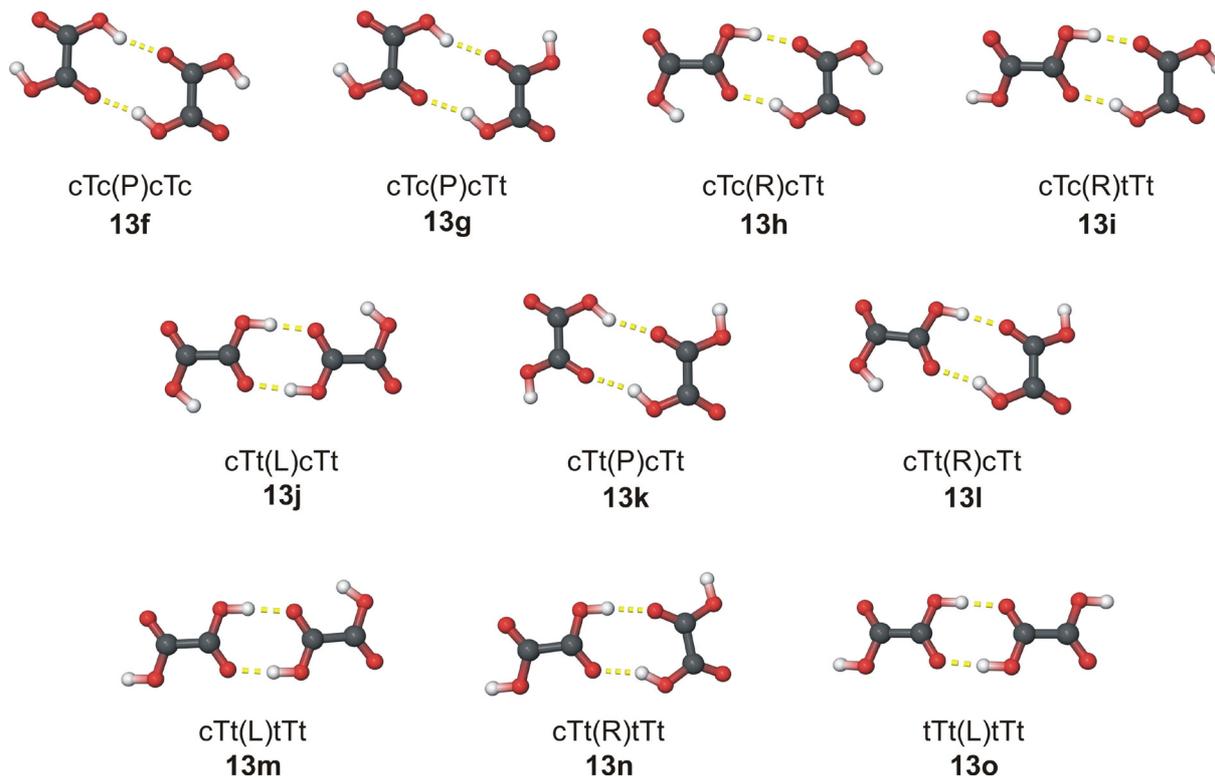
**Tabelle 6.7:** Vergleich der berechneten relativen Energien (in kcal/mol, inkl. ZPE) der verschiedenen Konformere monomerer Oxalsäure auf verschiedenen quantenchemischen Niveaus mit Literaturwerten.<sup>[185]</sup> (a: Das tTt-Monomer **13e** ist auf MP2/6-311++G(d,p) Niveau nur C<sub>2</sub>-symmetrisch).

Methode	Basissatz	Diese Arbeit			Literatur		
		Sym.	B3LYP cc-pVTZ	mPW1LYP 6-311++G(d,p)	MP2	B3LYP 6-31G**	Sym.
<b>13a</b>	cCt	C <sub>s</sub>	5.51	4.34	3.95	5.48	C <sub>s</sub>
<b>13b</b>	cTc	C <sub>2h</sub>	0.00	0.00	0.00	0.00	C <sub>2h</sub>
<b>13c</b>	cTt	C <sub>s</sub>	2.49	1.91	1.71	2.42	C <sub>s</sub>
<b>13d</b>	tCt	C <sub>2</sub>	4.30	3.00	2.36	4.00	C <sub>2v</sub>
<b>13e</b>	tTt	C <sub>2h</sub>	3.91	2.73	2.07 <sup>a</sup>	3.61	C <sub>2h</sub>

C<sub>2</sub>-symmetrisch, der O-C-C-O-Diederwinkel beträgt ca. 26°. Die Ergebnisse sind in Tabelle 6.7 zusammengefasst. Abgesehen von genannten Abweichungen stimmen die Ergebnisse qualitativ mit denen von Räsänen überein.

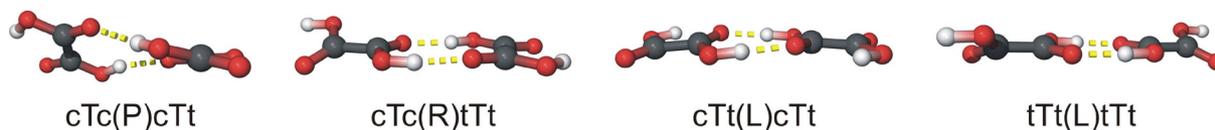
Aus den drei energetisch niedrigsten Konformeren des Monomers lassen sich insgesamt zehn verschiedene Strukturen **13f-o** für cyclische Dimere mit zwei Wasserstoffbrücken ableiten. Für sie wird hier eine Nomenklatur verwendet, bei der die (alphabetisch geordneten) Bezeichnungen der beiden Monomere durch einen weiteren Buchstaben verbunden werden, welcher die relative Anordnung der beiden C-C-Achsen zueinander beschreibt: (P) für parallel, (R) für rechtwinklig und (L) für linear. Die entsprechenden Strukturen sind in Abbildung 6.13 abgebildet und die berechneten relativen Energien in Tabelle 6.8 aufgeführt.

Bei den Berechnungen auf dem MP2/6-311++G(d,p) Niveau zeigte sich hier ein großer Unterschied zu den DFT-Rechnungen bezüglich der Symmetrie. Die Verwendung der symmetrischen Strukturen, welche mit den DFT-Methoden als Minima berechnet wurden, führt auf dem MP2/6-311++G(d,p) Niveau zu Geometrien, deren Schwingungsspektren 2 bis 3 imaginäre Frequenzen kleinen Betrages (< 115 cm<sup>-1</sup>) enthalten.



**Abbildung 6.13:** Die zehn möglichen cyclischen Dimere, die aus den drei energetisch günstigsten Monomer-Konformationen gebildet werden können. In den Bezeichnungen gibt der zentrale Buchstabe die relative Anordnung der C-C-Achsen der beiden Monomere wieder (L = linear, P = parallel, R = rechtwinklig). Es sind die berechneten Geometrien auf dem B3LYP/cc-pVTZ Niveau abgebildet.

Erst durch Aufhebung der Symmetrie konnten energetische Minima berechnet werden. In den berechneten  $C_1$ -symmetrischen Geometrien ist nicht nur die Planarität des jeweiligen Dimers aufgehoben, oft erfolgt auch bei den einzelnen Monomeren eine Rotation um die C-C-Bindung. Die O=C-C-O Diederwinkel erreichen Werte bis zu  $26^\circ$  (s. Abbildung 6.14).



**Abbildung 6.14:** Berechnete Geometrien einiger Dimere der Oxalsäure auf dem MP2/6-311++G(d,p) Niveau.

Auch bei den relativen Energien unterscheiden sich die Ergebnisse von denen, die mit DFT-Methoden erhalten wurden (s. Tabelle 6.8). Hier ist das tTt(L)tTt-Dimer **13o** energetisch am günstigsten, während es auf dem B3LYP/cc-pVTZ Niveau 1.54 kcal/mol über dem Dimer der Konformation cTc(P)cTc **13f** liegt.

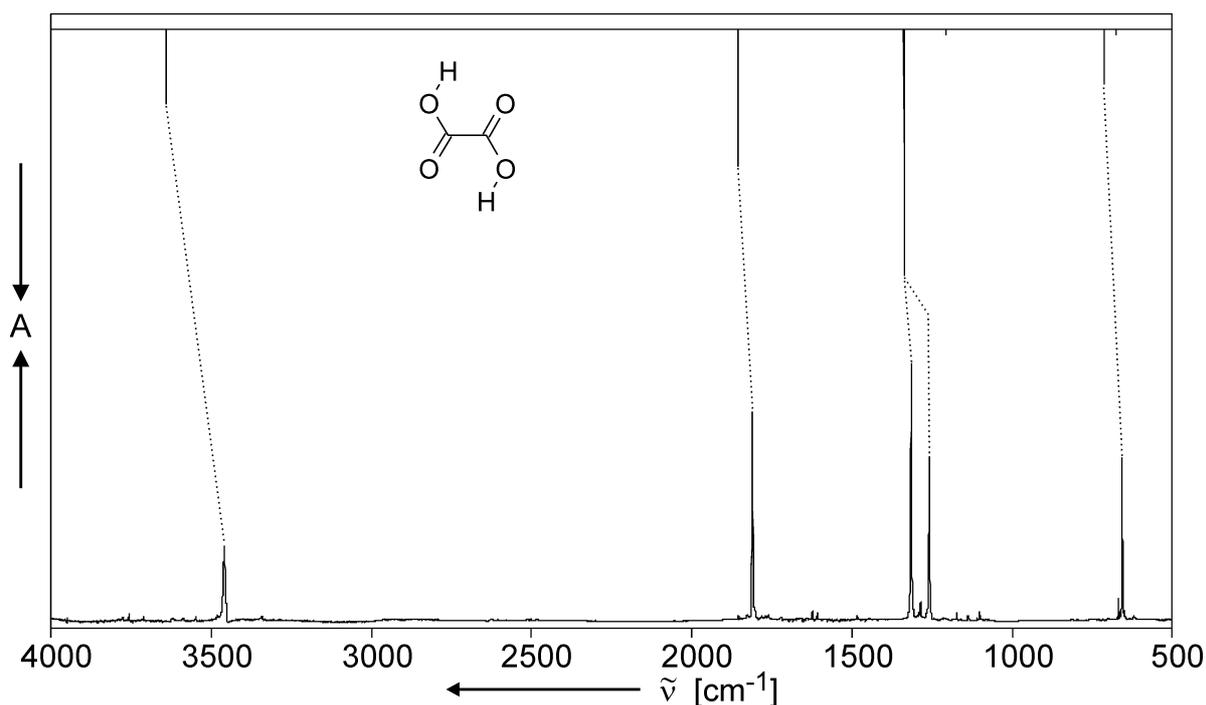
Vergleicht man die auf dem MP2/6-311++G(d,p) Niveau berechneten Energien der unsymmetrischen Dimere mit denen der symmetrischen Dimere, so liegen die C<sub>1</sub>-symmetrischen Dimere um 0.5 - 0.9 kcal/mol über dem jeweiligen symmetrischen Dimer, obwohl die symmetrischen Dimere keine Minima darstellen. Dies spricht dafür, dass die gefundenen lokalen Minima keine globalen Minima sind.

**Tabelle 6.8:** Vergleich der berechneten relativen Energien (in kcal/mol, inkl. ZPE) der verschiedenen Dimere, die aus den drei energetisch günstigsten Monomer-Konformationen gebildet werden können.

Methode		Sym.	B3LYP	mPW1LYP	MP2	Sym.
Basissatz			cc-pVTZ	6-311++G(d,p)	6-311++G(d,p)	
<b>13f</b>	cTc(P)cTc	C <sub>2h</sub>	0.00	0.15	0.16	C <sub>1</sub>
<b>13g</b>	cTc(P)cTt	C <sub>s</sub>	4.11	3.63	3.33	C <sub>1</sub>
<b>13h</b>	cTc(R)cTt	C <sub>s</sub>	0.03	0.00	0.25	C <sub>1</sub>
<b>13i</b>	cTc(R)tTt	C <sub>s</sub>	0.84	0.48	0.29	C <sub>1</sub>
<b>13j</b>	cTt(L)cTt	C <sub>2h</sub>	0.21	0.21	0.24	C <sub>1</sub>
<b>13k</b>	cTt(P)cTt	C <sub>2h</sub>	7.71	6.61	5.64	C <sub>1</sub>
<b>13l</b>	cTt(R)cTt	C <sub>s</sub>	4.57	3.87	3.77	C <sub>1</sub>
<b>13m</b>	cTt(L)tTt	C <sub>s</sub>	0.74	0.39	0.04	C <sub>1</sub>
<b>13n</b>	cTt(R)tTt	C <sub>s</sub>	5.65	4.57	4.00	C <sub>1</sub>
<b>13o</b>	tTt(L)tTt	C <sub>2h</sub>	1.54	0.85	0.00	C <sub>1</sub>

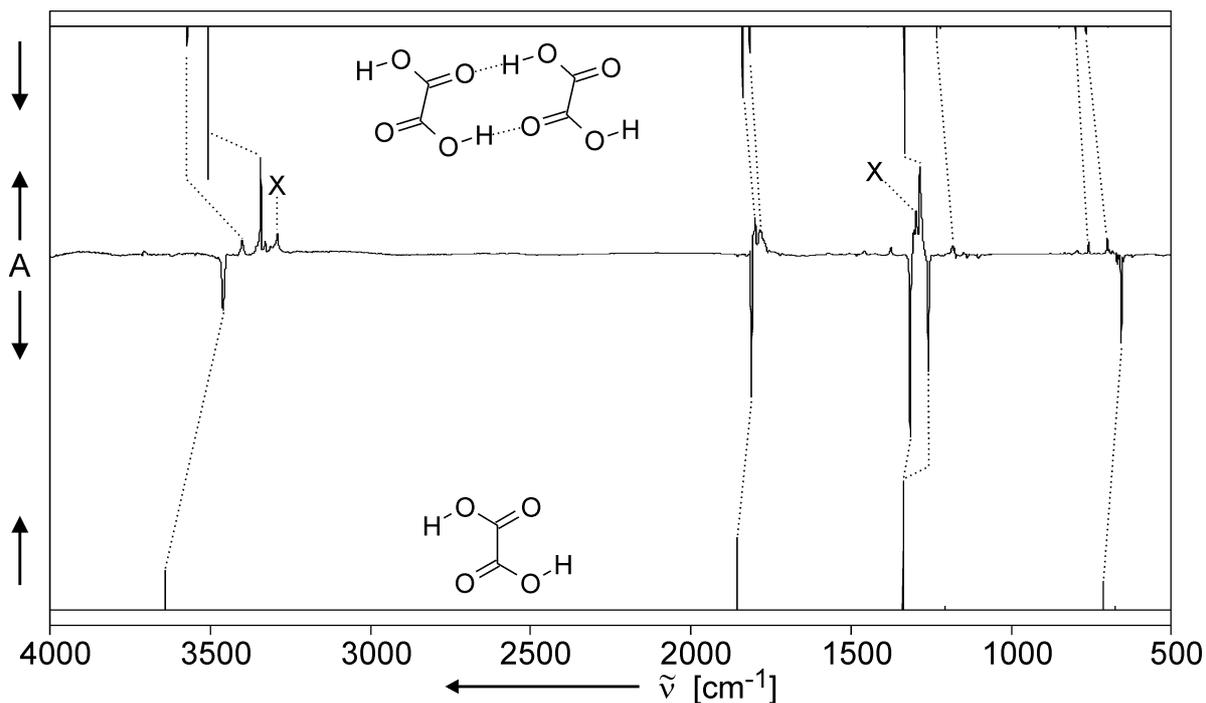
### 6.4.3 Ergebnisse der Experimente

Die Matrixisolation monomerer Oxalsäure gelang durch *slow spray-on* Deposition bei Raumtemperatur (s. Abbildung 6.15). Die Erhöhung der Depositionstemperatur führte zu ähnlich unbefriedigenden Ergebnissen wie bei der Benzoesäure (vgl. S. 101). Es war daher nicht möglich, durch Deposition nur dimere Oxalsäure in der Matrix zu isolieren.



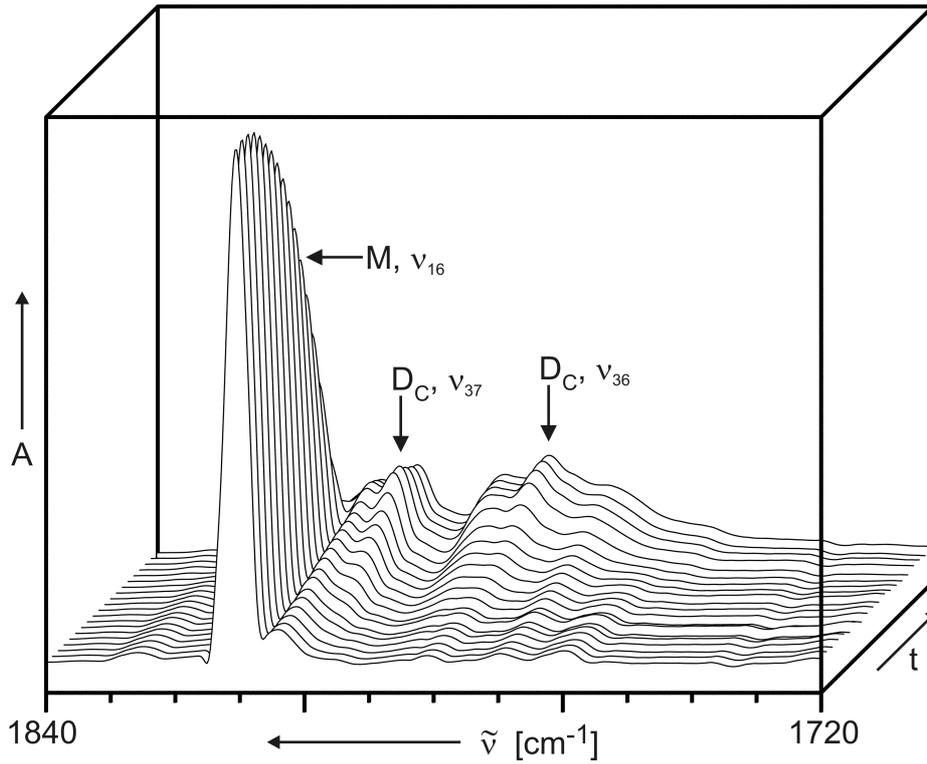
**Abbildung 6.15:** IR-Spektrum der matrixisolierten monomeren Oxalsäure; **oben:** berechnetes Spektrum (B3LYP/cc-pVTZ, cTc-Konformer); **unten:** experimentelles Spektrum (*slow spray-on* Deposition, RT; MG271A12.0).

Das matrixisolierte Monomer wurde mittels *free warm-up* getempert, wobei die Banden des Monomers abnahmen und neue Banden entstanden. Ein Differenzspektrum zwischen dem Depositionsspektrum und einem bei ca. 40 K aufgenommenen Spektrum ist in Abbildung 6.16 dargestellt.

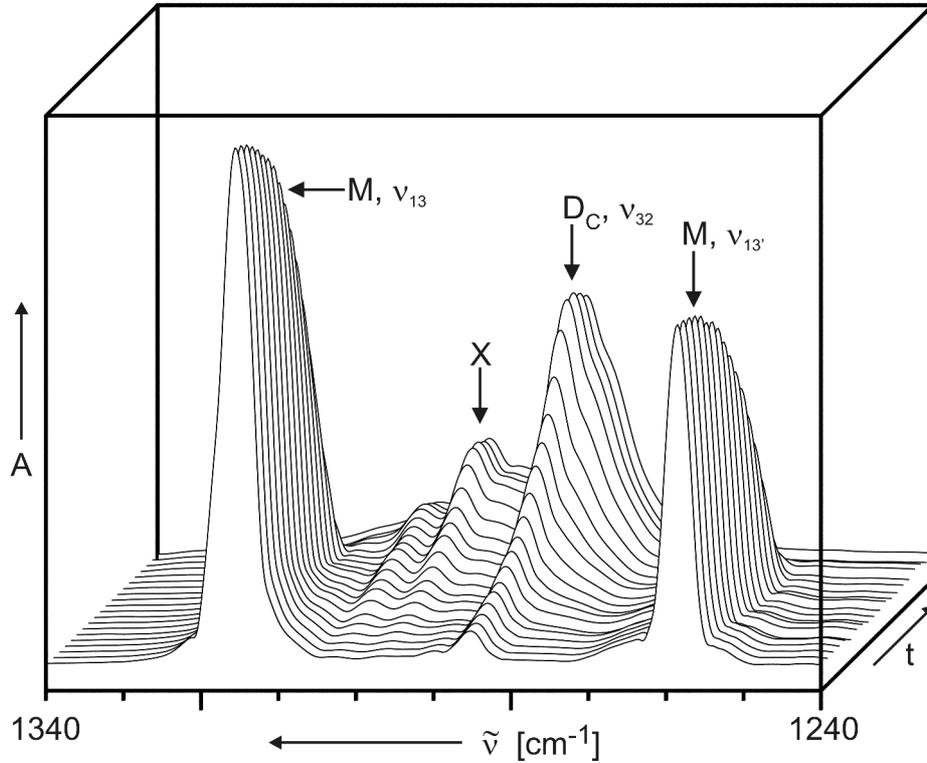


**Abbildung 6.16:** Vergleich eines Differenzspektrums (**Mitte**, Banden des Depositionsspektrums zeigen nach unten, Banden des Temperspektrums bei ca. 40 K nach oben; *MG271A12D00-14.0*) mit berechneten Spektren (B3LYP/cc-pVTZ, **oben**: Dimer cTc(P)cTc, **unten**: Monomer cTc). Zusätzlich auftauchende Banden, die nicht dem cTc(P)cTc-Dimer zugeordnet werden können, sind mit X markiert.

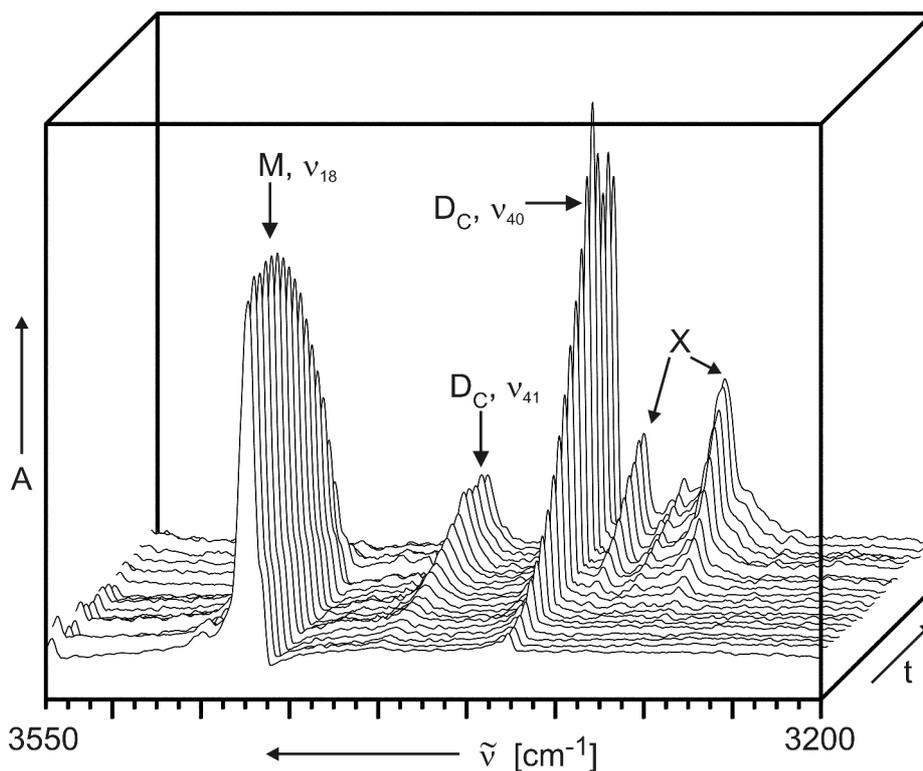
Im Bereich der Carbonyl-Streckschwingungen (s. Abbildung 6.17) entstehen simultan zwei neue, im Vergleich zur Monomerbande bei  $1811\text{ cm}^{-1}$  sehr breite Banden bei  $1800$  und  $1781\text{ cm}^{-1}$ . Im Bereich der C-O-H-Deformationsschwingungen (s. Abbildung 6.18) kann man zwischen den beiden Banden des Monomers bei  $1315$  und  $1259\text{ cm}^{-1}$  die Entstehung neuer Banden bei  $1297$  und  $1286\text{ cm}^{-1}$  beobachten. Betrachtet man den Bereich der O-H-Streckschwingungen (s. Abbildung 6.19), so kann man neben der Abnahme der Monomerbande bei  $3459\text{ cm}^{-1}$  die Bildung mehrerer neuer Banden beobachten.



**Abbildung 6.17:** Tempern (*free warm-up*) von Oxalsäure Monomer (M) in einer Argon Matrix, Bildung des cyclischen Dimers ( $D_C$ ); Bereich der Carbonyl-Streckschwingungen (MG271A12.x).



**Abbildung 6.18:** Tempern (*free warm-up*) von Oxalsäure Monomer (M) in einer Argon Matrix, Bildung des cyclischen Dimers ( $D_C$ ) und weiterer Banden (X); Bereich der C-O-H-Deformationsschwingungen (MG271A12.x).



**Abbildung 6.19:** Tempern (*free warm-up*) von Oxalsäure Monomer (M) in einer Argon Matrix, Bildung des cyclischen Dimers ( $D_C$ ) und weiterer Banden (X); Bereich der O-H-Streckschwingungen (MG271A12.x).

#### 6.4.4 Diskussion

Oxalsäure konnte als reines Monomer matrixisoliert werden. Ein Vergleich mit den berechneten Spektren und mit Literaturdaten zeigt, dass nur das cTc-Konformer **13b** vorliegt. Die spektroskopischen Daten sind in Tabelle 6.9 aufgeführt. Die Bande der  $\delta_{\text{as}}(\text{COH})$  Schwingung erfährt eine Aufspaltung in zwei Banden, wie sie auch bei der monomeren Essigsäure **2a** beobachtet wurde (s. S. 31). Dies steht in Einklang mit in der Literatur beschriebenen Beobachtungen.<sup>[48]</sup>

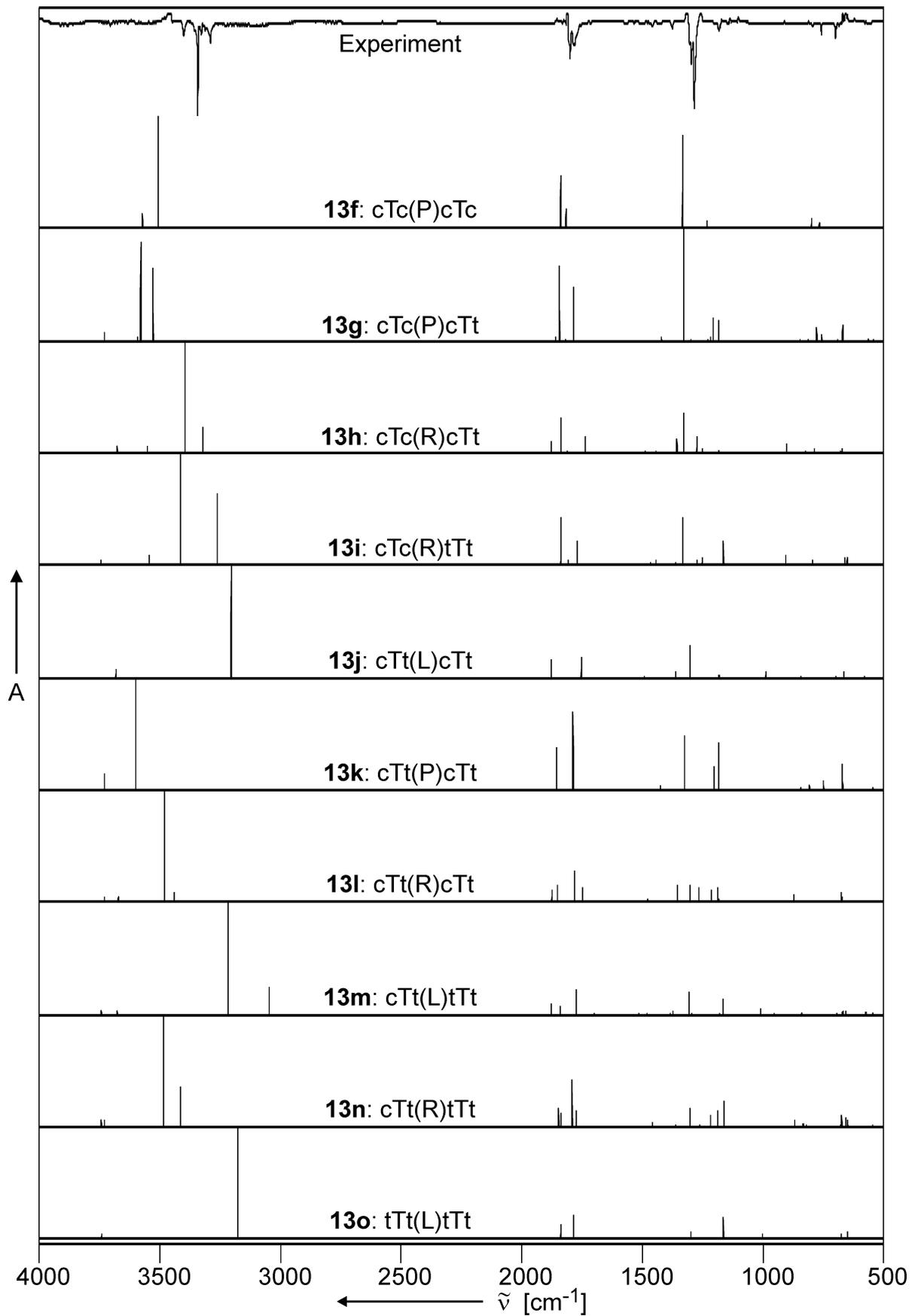
Im Verlauf des Temperns nahmen die Banden des Monomers **13b** ab, gleichzeitig entstanden neue Banden. Durch Vergleich mit den berechneten Spektren der verschiedenen Dimere **13f-o** (s. Abbildung 6.20) wird eine gute Übereinstimmung der Banden mit dem cTc(P)cTc Konformer **13f** gefunden (s. Tabelle 6.10).

**Tabelle 6.9:** IR-Absorptionen des Oxalsäure Monomers, Vergleich der experimentellen Daten mit berechneten Schwingungen des cTc-Konformers **13b** und Literaturdaten.<sup>[48]</sup>

B3LYP/cc-pVTZ				Ar-Matrix		Zuordnung
Mode	$\tilde{\nu}$ (cm <sup>-1</sup> )	I <sub>rel</sub>	Sym.	$\tilde{\nu}_{\text{Exp}}$ (cm <sup>-1</sup> )	$\tilde{\nu}_{\text{Lit}}$ (cm <sup>-1</sup> )	
18	3640.3	30	B <sub>u</sub>	3458.6	3458.8	$\nu_{\text{as}}(\text{O-H})$
16	1855.9	55	B <sub>u</sub>	1810.1	1810.7	$\nu_{\text{as}}(\text{C=O})$
13	1337.3	100	B <sub>u</sub>	{ 1314.9 1258.1	{ 1315.5 1259.0	$\delta_{\text{as}}(\text{COH})$
11	1207.2	2	B <sub>u</sub>	1134.6	1137.4	$\nu_{\text{as}}(\text{C-O})$
8	712.1	22	A <sub>u</sub>	656.9	656.5	$\gamma(\text{COH})$
6	676.1	2	B <sub>u</sub>	620.7	620.8	$\delta_{\text{as}}(\text{OCO})$

**Tabelle 6.10:** IR-Absorptionen des Oxalsäure Dimers, Vergleich der experimentellen Daten mit berechneten Schwingungen des cTc(P)cTc-Konformers **13f**. Die Indizes ‚frei‘ bzw. ‚WBB‘ geben an, ob es sich um eine an der Wasserstoffbrückenbindung beteiligte Gruppe handelt.

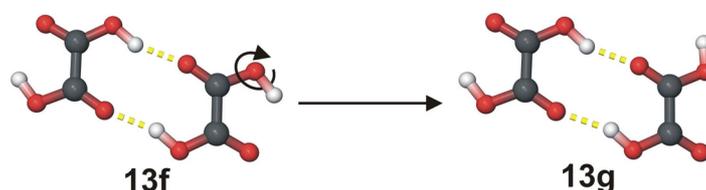
B3LYP/cc-pVTZ				Ar-Matrix		Zuordnung
Mode	$\tilde{\nu}$ (cm <sup>-1</sup> )	I <sub>rel</sub>	Sym.	$\tilde{\nu}_{\text{Exp}}$ (cm <sup>-1</sup> )		
41	3571.8	13	B <sub>u</sub>	3401.2		$\nu_{\text{frei}}(\text{O-H})$
40	3505.9	100	B <sub>u</sub>	3342.2		$\nu_{\text{WBB}}(\text{O-H})$
37	1838.6	47	B <sub>u</sub>	1799.8		$\nu_{\text{WBB}}(\text{C=O})$
36	1816.1	17	B <sub>u</sub>	1780.6		$\nu_{\text{frei}}(\text{C=O})$
32	1333.7	82	B <sub>u</sub>	1284.8		$\delta_{\text{frei+WBB}}(\text{C-O-H})$
29	1231.5	7	B <sub>u</sub>	1184.4		$\delta_{\text{WBB}}(\text{C-O-H})$
28	1222.0	1	B <sub>u</sub>	1176.5		$\delta_{\text{frei}}(\text{C-O-H})$
26	847.9	1	A <sub>u</sub>	793.8		$\tau(\text{O-C-C-O})$
22	798.8	8	A <sub>u</sub>	757.4		$\gamma_{\text{WBB}}(\text{C-O-H})$
20	766.0	5	A <sub>u</sub>	700.4		$\gamma_{\text{frei}}(\text{C-O-H})$



**Abbildung 6.20:** Vergleich der berechneten Spektren aller Dimere (B3LYP/cc-pVTZ) mit dem experimentellen Spektrum (free warm-up Tempern, 40 K, Differenzspektrum MG271A12D00-14.0).

Anders als bei den Monocarbonsäuren und den Amiden wird hier keine breite, durch Fermi-Resonanz hervorgerufene Bandenstruktur beobachtet.

Darüber hinaus wurde im Bereich der C-O-H-Deformationsschwingungen (s. Abbildung 6.18) und der C-H-Streckschwingungen (s. Abbildung 6.19) während des *free warm-up* ab ca. 30 K die Bildung zusätzlicher Banden beobachtet, die nicht dem cTc(P)cTc-Dimer **13f** zugeordnet werden können. Im Vergleich mit den berechneten Spektren der anderen Dimere der Oxalsäure ergibt sich für das cTc(P)cTt-Dimer **13g** die beste Übereinstimmung (s. Tabelle 6.11). Dieses kann aus dem Dimer **13f** entstehen, indem sich eine der beiden freien OH-Gruppen um 180° um die C-O Bindung dreht (s. Abbildung 6.21).



**Abbildung 6.21:** Umlagerung des Dimers **13f** in das Dimer **13g**.

**Tabelle 6.11:** Vergleich der intensivsten ( $I_{\text{rel}} > 20$ ) berechneten Schwingungen des cTc(P)cTt-Konformers **13g** mit den zusätzlich beobachteten Banden. Die Indizes ‚frei‘ bzw. ‚WBB‘ geben an, ob es sich um eine an der Wasserstoffbrückenbindung beteiligte Gruppe handelt, die Indices ‚cTc‘ bzw. ‚cTt‘ geben an, zu welchem Molekül die Schwingung gehört.

Mode	B3LYP/cc-pVTZ			Ar-Matrix	Zuordnung
	$\tilde{\nu}$ (cm <sup>-1</sup> )	$I_{\text{rel}}$	Sym.	$\tilde{\nu}_{\text{Exp}}$ (cm <sup>-1</sup> )	
40	3579.4	87	A'	3328.0	$\nu_{\text{WBB,cTt}}(\text{O-H}) + \nu_{\text{frei,cTc}}(\text{O-H})$
39	3527.6	64	A'	3289.8	$\nu_{\text{WBB,cTc}}(\text{O-H})$
37	1842.9	66	A'	1784.5	$\nu_{\text{WBB,cTc}}(\text{C=O}) + \nu_{\text{frei,cTt}}(\text{C=O})$
35	1785.1	47	A'		$\nu_{\text{WBB,cTt}}(\text{C=O})$
32	1329.3	100	A'	1296.9	$\delta_{\text{as,alle}}(\text{C-O-H})$

## 6.5 Fazit

Mit Hilfe der *slow spray-on* Deposition konnten die drei untersuchten Substanzen Acetamid **11**, Benzoesäure **12** und Oxalsäure **13** in rein monomerer Form in Argon Matrizes isoliert werden. Bei der Oxalsäure liegt in der Matrix nur das cTc-Konformer **13b** vor.

Bei allen drei Substanzen wurde beobachtet, dass sich im Verlauf des *free warm-ups* das jeweilige cyclische, doppelt wasserstoffverbrückte Dimer bildet. Intermediär auftretende, offenkettige Dimere, wie sie bei der Ameisensäure **1** oder dem Formamid **10** auftreten, konnten nicht beobachtet werden. Bei der Benzoesäure **12** wurde ein solches Dimer allerdings gegen Ende des Temperns beobachtet.

Betrachtet man die auf dem B3LYP/cc-pVTZ Niveau berechneten Barrieren für die Umlagerung des jeweiligen offenkettigen in das cyclische Dimer bei Acetamid **11** (1.22 kcal/mol) und Benzoesäure **12** (1.48 kcal/mol), so sind diese ebenfalls deutlich kleiner als die Barrieren bei Ameisensäure **1** (2.69 kcal/mol) und Formamid **10** (2.29 kcal/mol). Es steht daher im Einklang mit den bisherigen Ergebnissen, dass die offenkettigen Dimere von Acetamid **11** und Benzoesäure **12** während des Aggregationsprozesses nicht beobachtet werden konnten.

Für die Oxalsäure ist hervorzuheben, dass das in der cTc-Konformation vorliegende Monomer **13b** seine Konformation während der Dimerisierung beibehält und so das Dimer **13f** (Konformation cTc(P)cTc) bildet. Gegen Ende des Temperns wird zusätzlich die Entstehung weiterer Banden beobachtet, die sich dem Dimer **13g** (Konformation cTc(P)cTt) zuordnen lassen.

Als Nachteil der verwendeten Depositionsmethode ist zu sehen, dass es in keinem Fall möglich war, eine Matrix zu erzeugen, welche nur das jeweilige Dimer enthält. Die Zuordnung der während des Temperns beobachteten Aggregate musste daher hauptsächlich anhand quantenchemischer Rechnungen erfolgen.



## 7 Ein Vergleich quantenchemischer Rechenmethoden

### 7.1 Einleitung

Einem Chemiker stehen heute, wie bereits Eingangs geschildert (vgl. Kapitel 3.4, S. 22), verschiedenste quantenchemische Methoden zur Berechnung von Molekülen und ihren Eigenschaften zur Verfügung. Da nicht jede Methode für jede Problemstellung geeignet ist, sucht man als experimentell arbeitender Chemiker im Allgemeinen den Rat von Theoretikern bezüglich der am besten geeigneten Methode für das eigene Problem. Es zeigt sich dann allerdings, dass die Zahl der erhaltenen Antworten meist nahe bei der der befragten Theoretiker liegt (sofern die Anzahl der Befragten nicht zu groß ist).

Hinsichtlich der Berechnung wasserstoffverbrückter Aggregate findet man, grob gesehen, zwei verschiedene Meinungen. Die einen setzen auf *ab initio* Methoden (zumeist MP2)<sup>[114]</sup>, die anderen auf Hybrid-DFT Funktionale.<sup>[113]</sup> Einige vertreten auch die Ansicht, dass Hybrid-DFT Methoden für starke Wasserstoffbrücken geeignet sind, nicht aber für schwache.<sup>[187-189]</sup> Relative Einigkeit herrscht zumindest hinsichtlich der zu verwendenden Basissätze. Es sollte sich mindestens um triple- $\zeta$  Basissätze mit Polarisation handeln, um die im Vergleich zu kovalenten Bindungen langreichweitigen Wasserstoffbrückenbindungen besser zu berücksichtigen.

Für einen experimentell arbeitenden Chemiker sind bei der Wahl der Rechenmethode mehrere Kriterien wichtig:

1. Eine Rechnung sollte zu einer Geometrie führen, die mit experimentell bestimmten Strukturen (sofern vorhanden) hinreichend übereinstimmt oder zumindest nicht dem chemischen Grundverständnis widerspricht.
2. Aus der Struktur abgeleitete Eigenschaften wie die Energie oder das Schwingungsspektrum sollten ebenfalls gut mit experimentellen Ergebnissen korrelieren. Bei Schwingungsspektren ist neben der Bandenlage auch eine gute Übereinstimmung bei den Intensitäten wünschenswert.
3. Eine Rechnung sollte in einem vertretbaren Zeitrahmen durchgeführt werden können und die für das Experiment aufgewendete Zeit nicht um Größenordnungen übersteigen. Hier spielt neben der Rechenmethode natürlich auch die Rechnerleistung eine Rolle.

Anhand der im Rahmen dieser Arbeit untersuchten wasserstoffverbrückten Systeme sollen daher verschiedene Rechenmethoden (HF, MP2, B3LYP, mPW1LYP, BLYP) verglichen werden. Als Basissatz wurde einheitlich die Pople-Basis 6-311++G(d,p) verwendet,<sup>[118]</sup> eine mittelgroße triple- $\zeta$ -Basis mit Polarisation und diffusen Funktionen. Als zusätzlicher Vergleich dienen die bereits vorgestellten Ergebnisse der Rechnungen auf dem B3LYP/cc-pVTZ Niveau.

## 7.2 Geometrien

Die verschiedenen Rechenmethoden liefern bei den aliphatischen Carbonsäuren zumeist vergleichbare Geometrien, also  $C_s$ -symmetrische Monomere und offene Dimere sowie  $C_{2h}$ -symmetrische cyclische Dimere. Abweichend hiervon ist bei der Essigsäure **2** auf dem MP2/6-311++G(d,p) Niveau das offenkettige Dimer nur  $C_1$ - und das cyclische Dimer nur  $C_2$ -symmetrisch. In beiden Fällen ist eine leichte Rotation der Methylgruppe die Ursache. Die für den Übergangszustand **2d** berechnete Geometrie liegt sehr nahe bei der planaren Geometrie des offenkettigen Dimers, wohingegen alle anderen Rechenmethoden zu Geometrien führen, in denen die Ebenen der beiden Moleküle fast senkrecht zueinander stehen.

Noch stärkere Abweichungen zeigen die MP2-Rechnungen bei den beiden Amid-Gruppen. Sowohl im Formamid **10** als auch im Acetamid **11** liegen die Wasserstoffatome der Amid-Gruppe nicht in der Molekülebene. Die O=C-N-H Diederwinkel betragen  $-12.2^\circ$  bzw.  $-165.7^\circ$  für das Formamid Monomer und  $-14.4^\circ$  bzw.  $-163.2^\circ$  für das Acetamid Monomer. Die planaren Geometrien entsprechen in beiden Fällen Übergangszuständen für die Inversion am Stickstoff. Aufgrund von Resonanzstabilisierung (s. Abbildung 5.14, S. 82) wird der C-N-Bindung aber allgemein ein partieller Doppelbindungscharakter zugesagt, der auch durch experimentelle Befunde<sup>[173]</sup> bestätigt wird. Demnach sollte man eine planare Amid-Gruppe erhalten, was bei allen anderen Rechenmethoden auch der Fall ist. Diese Pyramidalisierung der Amid-Gruppe findet sich bei den mit MP2 berechneten offenkettigen und cyclischen Dimeren der Amide wieder. Zu erwähnen ist hier noch das Acetamid Monomer **11a**, welches auf dem B3LYP/cc-pVTZ Niveau ebenfalls nur  $C_1$ -symmetrisch ist. Ursache ist hier allerdings eine leichte Rotation der Methylgruppe. Die Amid-Gruppe ist hier ebenfalls planar.

Die strukturellen Abweichungen der MP2 Rechnungen bei den Dimeren der Oxalsäure **13** wurden bereits im entsprechenden Kapitel aufgezeigt und diskutiert (s. Kapitel 6.4.2, S. 108).

### 7.3 Energien

Die berechneten relativen Energien der verschiedenen Aggregate der aliphatischen Monocarbonsäuren und Amide sind in Tabelle 7.1 aufgeführt. Für die Monocarbonsäuren sind zum Vergleich experimentell bestimmte Gasphasen-Dissoziationsenergien angegeben.

Der Vergleich zeigt, dass sowohl die Hybrid-DFT-Methoden als auch MP2 Ergebnisse liefern, die nahe bei den experimentellen Werten liegen. Sowohl HF als auch BLYP liefern in allen Fällen Werte, die deutlich unter den experimentellen Werten liegen. Auffällig ist zum einen, dass die Dissoziationsenergien auf den Niveaus B3LYP/cc-pVTZ und mPW1LYP/6-311++G(d,p) immer sehr nahe beieinander liegen. Sie sind zudem systematisch größer als der experimentelle Wert, während die mit MP2/6-311++G(d,p) erhaltenen Werte systematisch zu klein sind.

Einen deutlichen Unterschied zwischen B3LYP/cc-pVTZ und mPW1LYP/6-311++G(d,p) findet man bei den offenen Dimeren. Auf dem letztgenannten Niveau führt eine zusätzlich vorhandene Wasserstoffbrücke vom Typ C-H...O zu einem höheren Energiegewinn als bei ersterem.

Betrachtet man hingegen die berechneten Aggregationsenergien bei den Systemen mit den schwachen C-H...O und C-H... $\pi$  Wasserstoffbrücken (s. Tabelle 7.2), so erhält man mit MP2 durchwegs höhere Werte als mit B3LYP. Die mit der Methode mPW1LYP erhaltenen Ergebnisse unterscheiden sich hier deutlich von denen auf dem B3LYP/cc-pVTZ Niveau. Sie sind hier eher mit den MP2-Werten vergleichbar. Die auf dem BLYP/6-311++G(d,p) Niveau berechneten Aggregationsenergien sind auch hier zumeist deutlich niedriger als auf den anderen Niveaus. Mit HF erhält man hingegen Ergebnisse, die sehr nahe bei den B3LYP-Werten liegen.

### 7.4 Schwingungsspektren

Bei allen in dieser Arbeit beschriebenen Systemen wurde eine gute Übereinstimmung zwischen den experimentellen Spektren und den auf dem B3LYP/cc-pVTZ Niveau berechneten Banden gefunden. Diese sollen daher neben den experimentellen Daten als Referenz für die anderen Methoden dienen.

**Tabelle 7.1:** Vergleich der relativen Energien (in kcal/mol, inkl. ZPE) innerhalb der einzelnen wasserstoffverbrückten Systeme (Mo = Monomer, oD = offenes Dimer, Üz = Übergangszustand, cD = cyclisches Dimer, Ba = Barriere zwischen offenkettigem und cyclischem Dimer) zwischen verschiedenen quantenchemischen Rechenmethoden unter Verwendung des 6-311++G(d,p) Basissatzes (<sup>a</sup>: Vergleichsrechnungen mit cc-pVTZ Basissatz). Zusätzlich sind einige experimentelle Aggregationsenergien<sup>[190]</sup> angegeben.

Molekül	<i>ab-initio</i>		Hybrid-DFT			DFT	Exp.
	HF	MP2	B3LYP	B3LYP <sup>a</sup>	mPW1LYP	BLYP	
<b>Ameisensäure</b>							
Mo <b>1a</b>	10.96	12.72	13.27	14.77	14.31	12.12	14.11
oD <b>1b</b>	4.15	4.95	5.88	6.68	5.85	5.80	
Üz <b>1d</b>	5.91	7.01	8.17	9.37	8.26	7.86	
cD <b>1d</b>	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
Ba	1.76	2.06	2.29	2.69	2.41	2.06	
<b>Essigsäure</b>							
Mo <b>2a</b>	11.78	14.16	14.31	15.63	15.39	13.13	15.27
oD <b>2b</b>	5.23	6.39	7.01	7.83	6.98	6.87	
Üz <b>2d</b>	6.21	6.51	8.69	9.59	8.67	8.49	
cD <b>2c</b>	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
Ba	0.98	0.12	1.68	1.76	1.69	1.62	
<b>Propionsäure</b>							
Mo <b>9a</b>	-	14.11	14.22	15.38	15.31	-	15.18
oD <b>9b</b>	-	5.83	8.34	9.21	8.28	-	
Üz <b>9d</b>	-	6.76	8.66	9.46	8.64	-	
cD <b>9c</b>	-	0.00	0.00	0.00	0.00	-	
Ba	-	0.93	0.32	0.25	0.36	-	

Molekül	<i>ab-initio</i>		Hybrid-DFT			DFT	Exp.
	HF	MP2	B3LYP	B3LYP <sup>a</sup>	mPW1LYP	BLYP	
<b>Formamid</b>							
Mo <b>10a</b>	8.85	11.55	11.00	11.88	12.04	10.07	
oD <b>10b</b>	2.78	3.81	4.04	4.30	4.05	4.04	
Üz <b>10d</b>	4.26	4.92	6.11	6.59	6.15	5.97	
cD <b>10c</b>	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
Ba	1.48	1.11	2.07	2.29	2.10	1.93	
<b>Acetamid</b>							
Mo <b>11a</b>	9.08	12.14	11.45	12.30	12.52	10.54	
oD <b>11b</b>	3.59	3.82	4.95	5.20	4.94	4.90	
Üz <b>11d</b>	4.20	4.20	6.22	6.42	6.17	6.19	
cD <b>11c</b>	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
Ba	0.61	0.38	1.26	1.22	1.23	1.29	

Die den Basissatz 6-311++G(d,p) verwendenden Rechnungen mit den Methoden B3LYP und mPW1LYP liefern Spektren, die gegenüber den berechneten Referenzspektren minimal blauverschoben sind und auch in den relativen Intensitäten kaum abweichen. Die mit MP2 berechneten Spektren führen ebenfalls zu vergleichbaren relativen Intensitäten, die Banden sind etwas stärker zu höheren Wellenzahlen verschoben als bei den Hybrid-DFT-Methoden. Im Vergleich hierzu zeigen die mit HF berechneten Banden eine starke Blauverschiebung, die mit BLYP berechneten eine starke Rotverschiebung. Hier zeigen sich zudem auch stärkere Abweichungen bei den relativen Intensitäten der Banden von denen der Referenzspektren.

**Tabelle 7.2:** Vergleich der Aggregationsenergien (in kcal/mol, inkl. ZPE) schwach verbrückter Aggregate zwischen verschiedenen quantenchemischen Rechenmethoden unter Verwendung des 6-311++G(d,p) Basissatzes (<sup>a</sup>: Vergleichsrechnungen mit cc-pVTZ Basissatz).

Molekül	<i>ab-initio</i>		Hybrid-DFT			DFT
	HF	MP2	B3LYP	B3LYP <sup>a</sup>	mPW1LYP	BLYP
<b>Furan / 1-Hexin</b>						
Dimer <b>5</b>	0.92		0.81	0.00	1.42	0.52
<b>Acetylen</b>						
Dimer <b>6b</b>	0.43	1.34	0.38	0.51	0.84	0.16
Trimer <b>6c</b>	1.41	4.20	1.34	1.63	2.60	0.64
<b>Acetylen / Aceton</b>						
Dimer <b>8a</b>	2.28	2.82	2.28	2,43	2.95	1.90
V-Trimer <b>8b</b>	3.92	5.41	3.91	4.37	5.32	3.07
Z-Trimer <b>8c</b>	4.03	5.65	4.01	4.42	5.42	3.14

Im Vergleich mit den experimentell erhaltenen Spektren sind die Banden der mit *ab initio* oder Hybrid-DFT berechneten Spektren zu höheren Wellenzahlen verschoben. Nur bei BLYP liegt kein einheitliches Verhalten vor, für einige Schwingungen sind die Banden rot-, für andere blauverschoben. In Tabelle 7.3 sind die Skalierungsfaktoren ( $\tilde{\nu}_{\text{exp}}/\tilde{\nu}_{\text{calc}}$ ) einiger wichtiger Schwingungen verschiedener Moleküle, berechnet mit verschiedenen Methoden, aufgelistet.

Diese Beobachtungen treffen sowohl auf die Monomere und die Aggregate mit starken Wasserstoffbrücken zu als auch auf die schwach wasserstoffverbrückten Aggregate.

**Tabelle 7.3:** Vergleich der Skalierungsfaktoren einiger wichtiger Schwingungen zwischen verschiedenen quantenchemischen Rechenmethoden unter Verwendung des 6-311++G(d,p) Basissatzes (<sup>a</sup>: Vergleichsrechnung mit cc-pVTZ Basissatz).

Molekül / Schwingung	<i>ab-initio</i>		Hybrid-DFT			DFT
	HF	MP2	B3LYP	B3LYP <sup>a</sup>	mPW1LYP	BLYP
<b>Ameisensäure Monomer</b>						
v(O-H)	0.865	0.935	0.950	0.954	0.944	0.991
v(C=O)	0.885	0.977	0.973	0.968	0.967	1.048
<b>Ameisensäure cyclisches Dimer</b>						
v(C=O)	0.881	0.966	0.975	0.972	0.968	0.997
<b>Essigsäure Monomer</b>						
v(O-H)	0.867	0.936	0.948	0.952	0.942	0.988
v(C=O)	0.889	0.975	0.979	0.974	0.972	1.026
<b>Essigsäure cyclisches Dimer</b>						
v(C=O)	0.879	0.962	0.976	0.975	0.970	1.027
<b>Formamid Monomer</b>						
v <sub>as</sub> (N-H)	0.895	0.943	0.955	0.954	0.950	0.985
v <sub>s</sub> (N-H)	0.897	0.947	0.957	0.957	0.953	0.988
v(C=O)	0.985	0.967	0.971	0.964	0.965	1.016
<b>Formamid cyclisches Dimer</b>						
v(C=O)	0.963	0.960	0.971	0.966	0.966	1.016
<b>Acetamid Monomer</b>						
v <sub>as</sub> (N-H)	0.896	0.947	0.953	0.953	0.949	0.983
v <sub>s</sub> (N-H)	0.897	0.950	0.956	0.956	0.951	0.986
v(C=O)	0.891	0.967	0.980	0.974	0.974	1.027

Molekül / Schwingung	<i>ab-initio</i>		Hybrid-DFT			DFT
	HF	MP2	B3LYP	B3LYP <sup>a</sup>	mPW1LYP	BLYP
<b>Acetamid cyclisches Dimer</b>						
$\nu(\text{C=O})$	0.893	0.961	0.979	0.975	0.973	1.024
<b>Acetylen Monomer</b>						
$\nu_{\text{as}}(\text{C-H})$	0.924	0.951	0.962	0.963	0.958	0.981
$\delta_{\text{as}}(\text{C-H})$	0.844	0.962	0.953	0.959	0.945	0.996

## 7.5 Rechenaufwand

Die Rechnungen auf dem HF/6-311++G(d,p) Niveau sind erwartungsgemäß die schnellsten unter den hier Vergleichenen. Die Verwendung von DFT- und Hybrid-DFT-Methoden führt bei gleichem Basissatz zu einer leichten Verlängerung der Rechenzeit. Wesentlich länger benötigten die Rechnungen auf dem B3LYP/cc-pVTZ Niveau, was aber neben der vergrößerten Basis auch auf die Verwendung der Option „*Opt=Tight*“ zurückzuführen ist. Noch zeitaufwendiger sind Rechnungen mit MP2/6-311++G(d,p), die zudem für Frequenzrechnungen selbst relativ kleiner Systeme enorm große Auslagerungsdateien benötigen. Das beobachtete gehäufte Auftreten von imaginären Frequenzen insbesondere bei symmetrischen Molekülen und Aggregaten lässt Frequenzrechnungen bei dieser Methode jedoch als eine zwingende Notwendigkeit erscheinen.

## 7.6 Fazit

Der Vergleich der verschiedenen Methoden zeigt, dass sowohl HF als auch BLYP eher ungeeignet für die Berechnung von wasserstoffverbrückten Aggregaten sind, während die anderen Methoden die experimentellen Daten gut reproduzieren.

Vergleicht man die Ergebnisse der MP2-Rechnungen mit denen, die bei Verwendung der Hybrid-DFT-Methoden erhalten werden, so lässt sich bei den Systemen mit starken Wasserstoffbrücken keine systematische Verbesserung finden, die den erhöhten Aufwand für die *ab initio* Methode rechtfertigen würde. Bei den Aggregaten mit schwachen Wasserstoffbrückenbindungen würde zumindest eine Verbesserung bei den

Aggregationsenergien für MP2 sprechen, erhalte man nicht mit mPW1LYP sehr ähnliche Ergebnisse. Gegen die Verwendung von MP2 sprechen auch die teilweise sogar zu anerkannten theoretischen Konzepten in Widerspruch stehenden Abweichungen in der Symmetrie. Diese werden nicht notwendigerweise von der Methode verursacht, sondern können auch ein Ergebnis des verwendeten Basissatzes sein. Die Verwendung einer Dunning-Basis<sup>[119, 120]</sup> könnte eventuell zu besseren Ergebnissen führen, hierdurch würde aber der Rechenaufwand noch weiter steigen.

Die beste Wahl für die Berechnung von Wasserstoffbrückenbindungen ist die Verwendung von Hybrid-DFT-Methoden. Sie lieferten in allen Fällen gute Ergebnisse bei vergleichsweise geringem Rechenaufwand. Sie ermöglichen zudem auch die Berechnung großer, wasserstoffverbrückter Moleküle wie den Dimeren der Benzoesäure **12**.

Das mPW-Funktional erfüllt die Zielsetzung seiner Entwickler<sup>[117]</sup>, nämlich die verbesserte Berücksichtigung von langreichweitigen Wechselwirkungen wie beispielsweise Wasserstoffbrückenbindungen. Man erhält trotz Verwendung einer kleineren Basis Ergebnisse, die mit denen auf dem B3LYP/cc-pVTZ Niveau nahezu übereinstimmen. Im Falle der schwachen Wasserstoffbrücken wie bei den Aggregaten **8** von Acetylen und Aceton liefert das mPW-Funktional wesentlich bessere Ergebnisse. Dies ist darauf zurückzuführen, dass dieses Funktional, anders als andere DFT-Funktionale, dispersive Wechselwirkungen zumindest teilweise berücksichtigt.



## 8 Fazit und Ausblick

### 8.1 Experimentelle Methoden

Im Rahmen dieser Arbeit wurden die Aggregationen verschiedener Substanzen in Argon-Matrizes untersucht. Verschiedene Depositionsmethoden erlaubten hierbei Untersuchungen sowohl an leichtflüchtigen wie auch an schwerflüchtigen Substanzen. Die Untersuchungen umfassen sowohl Einkomponenten- als auch Zweikomponentensysteme.

Mit der gepulsten Deposition steht eine Methode zur Verfügung, die eine starke Kontrolle der in der Matrix isolierten Aggregate ermöglicht. Sie ist zwar auf Substanzen mit hohem Dampfdruck beschränkt, ermöglicht aber die Erzeugung von Matrizes, welche wahlweise nur Monomere oder nur Dimere enthalten. Die vorgestellte modifizierte Form der Pulsdeposition erlaubt eine leichte Ausdehnung des nutzbaren Dampfdruckbereiches, erfüllt die in sie gesetzten Erwartungen allerdings nicht vollständig.

Demgegenüber war es bei den mit der so genannten Standarddeposition untersuchten Substanzen nur möglich, die reinen Monomere in der Matrix zu isolieren. Matrizes mit reinem Dimer konnten nicht erzeugt werden. Für die Untersuchung der Aggregation ist zwar eine Monomer-Matrix ausreichend, eine reine Dimer-Matrix ermöglicht aber zumeist eine genauere Zuordnung der entstehenden Aggregate.

Ein weiterer Vorteil der gepulsten Deposition zeigt sich bei der Untersuchung von Zweikomponentensystemen. Hier ist es möglich, ein Gemisch beider Substanzen so zu depositionieren, dass in der Matrix beide fast ausschließlich monomer vorliegen. Bisherige Untersuchungen der Aggregation in Zweikomponentensystemen verwendeten die *twin jet deposition*, eine parallele Standarddeposition von zwei Substanzen.<sup>[81, 82, 84, 85, 90]</sup> Hierbei erhält man jedoch zumeist schon bei der Deposition Aggregate, und nicht erst bei einem nachfolgenden Tempern.

Die in dieser Arbeit verwendete Methode des Temperns mittels *free warm-up* erlaubt, anders als das Tempern bei konstanter Temperatur, eine genaue Verfolgung der Aggregation. Hierbei sind allerdings solche Banden kritisch zu betrachten, die bei Matrixtemperaturen ab ca. 50 K entstehen, da hier die Matrix bereits abdiffundiert. Dies zeigen die Experimente mit Benzoe- und Oxalsäure (Kapitel 6.3, S. 99 und Kapitel 6.4, S. 107).

## 8.2 Untersuchte Substanzen

Die untersuchten Einkomponentensysteme umfassen kleine, aliphatische Carbonsäuren und Amide sowie Benzoesäure **12** als kleinste aromatische Carbonsäure. Als übereinstimmendes Ergebnis wurde hier die Ausbildung von cyclischen Dimeren mit zwei starken Wasserstoffbrücken von Typ O-H...O bzw. N-H...O beobachtet.

Bei den jeweils kleinsten Vertretern ihrer Substanzklassen, Ameisensäure **1** und Formamid **10**, wurde während des Temperns das Auftreten eines Dimers mit nur einer starken Wasserstoffbrücke beobachtet. Bei anderen Verbindungen wurden solche Dimere nur direkt nach der Deposition, als Folge der gewählten Depositionsbedingungen, beobachtet, nicht aber während des Temperns einer reinen Monomer-Matrix. Quantenchemische Rechnungen deuten darauf hin, dass hierfür die Barriere der Umlagerung des einfach verbrückten zum cyclischen Dimer verantwortlich ist. Diese sind für Ameisensäure und Formamid höher als für die anderen Substanzen.

Als Prototypen für Zweikomponentensysteme wurde die Aggregation zwischen Furan **3** und 1-Hexin **4** sowie zwischen Acetylen **6** und Aceton **7** untersucht. In beiden Fällen bilden sich schwache Wasserstoffbrücken vom Typ C-H...O. Während im ersten Fall nur das gemischte Dimer gebildet wird, gibt es in letzterem System eine Konkurrenzreaktion in Form der Selbstaggregation des Acetylens sowie zusätzlich die Bildung von Trimeren.

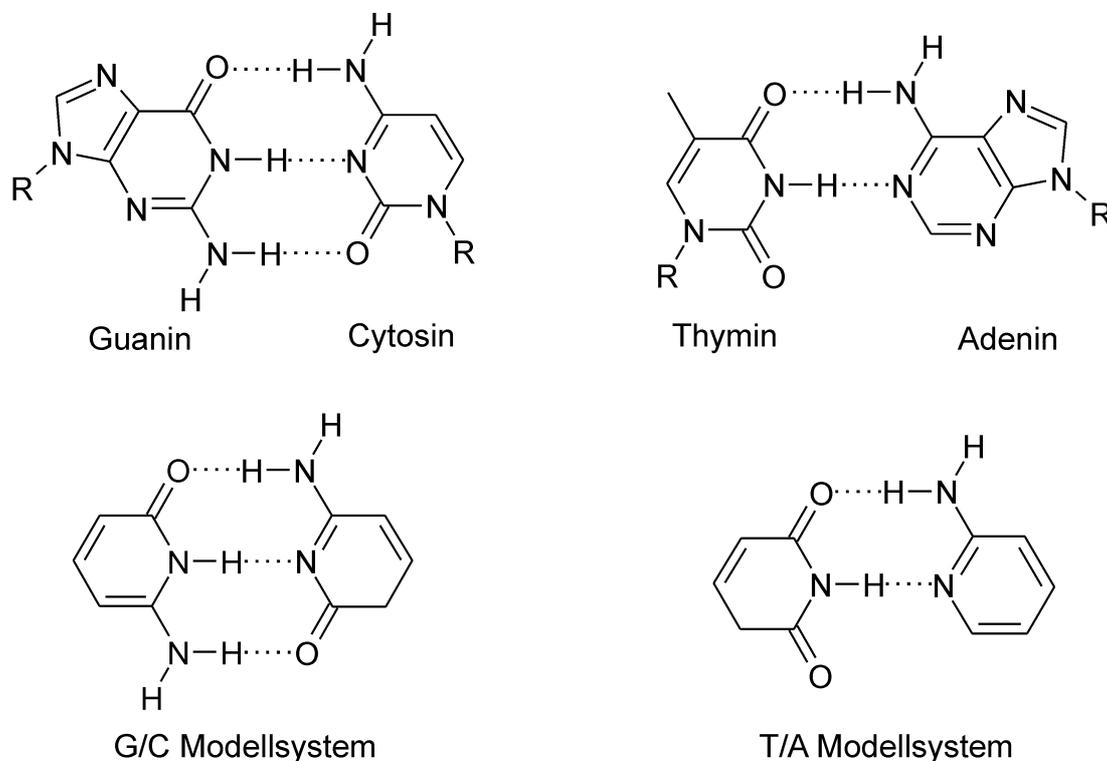
## 8.3 Weiterführende Untersuchungen

Die Aggregation von Carbonsäuren und Amidien wurde in dieser Arbeit ausführlich untersucht. Die erhaltenen Ergebnisse lassen vermuten, dass aus Untersuchungen mit höheren Homologen keine neuen Ergebnisse gewonnen werden können. Die Untersuchung der gemischten Aggregation zwischen diesen beiden Stoffklassen wäre von Interesse, hier dürfte jedoch der große Unterschied in den Dampfdrücken ein schwerwiegendes Problem darstellen.

Die guten Ergebnisse, die mit der gepulsten Deposition erhalten wurden, sprechen für weitere Untersuchungen an leichtflüchtigen Substanzen. Neben Einkomponentensystemen bietet sich hier vor allem das weite Feld von Zweikomponentensystemen an, anhand derer verschiedenste Typen von Wasserstoffbrücken untersucht werden können. Als Beispiele seien hier die Wasserstoffbrücken vom Typ N-H...N (z.B. Dimethylamin / Pyridin), O-H...N (z.B. Methanol / Acetonitril) und C-H...N (z.B. Acetylen / Pyridin) genannt.

Für weitere Untersuchungen an Dicarbonsäuren oder ähnlichen Systemen wären Substanzen vorzuziehen, bei denen die Anzahl möglicher Konformere eingeschränkt ist. Geeignet wäre beispielsweise die Quadratsäure (3,4-Dihydroxy-3-cyclobuten-1,2-dion).

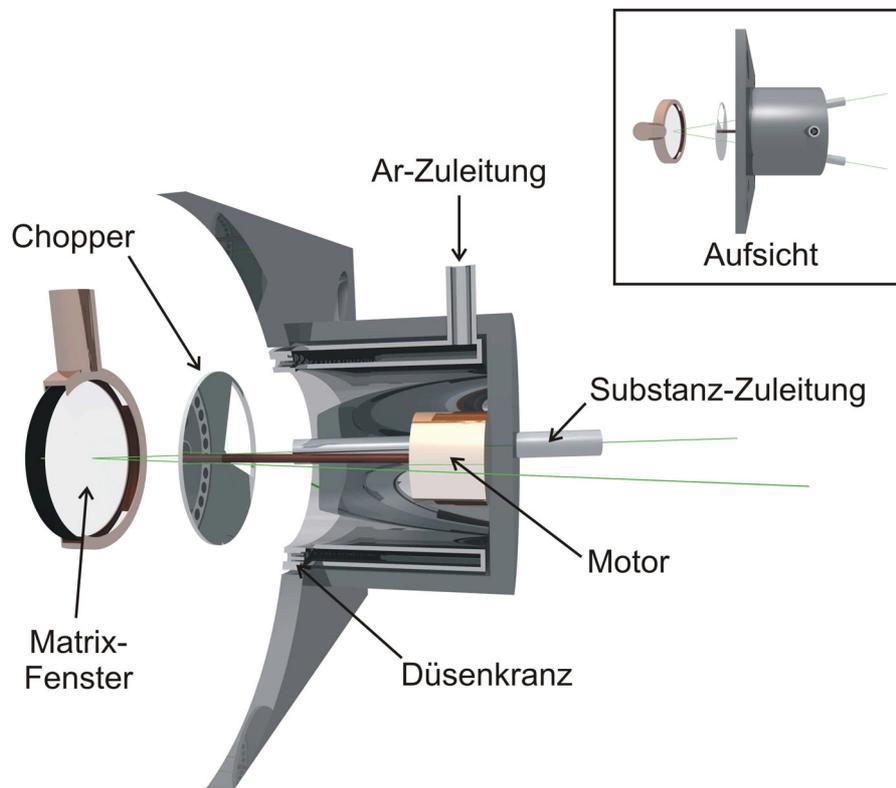
Vom biologischen Standpunkt aus wären zudem solche Moleküle von Interesse, die sich stärker an biologischen Systemen orientieren. Dies wären beispielsweise die Basenpaare Guanin / Cytosin und Adenin / Thymin bzw. an diese angelehnte Modellsysteme (s. Abbildung 8.1), um einen tieferen Einblick in die Entstehung der Watson-Crick Basenpaare zu bekommen.



**Abbildung 8.1:** Die Basenpaare der DNA und an sie angelehnte Modellsysteme.

Bei diesen handelt es sich jedoch um schwerflüchtige Substanzen, so dass man auf eine *twin jet deposition* zurückgreifen müsste. Da es hier jedoch schon bei der Deposition eine teilweise Aggregation erfolgt, erscheint diese einfache Depositionsmethode eher ungeeignet. Besser wäre hier eine Depositionseinrichtung, mit der abwechselnd dünnste Schichten der beiden Substanzen in Argon auf dem Matrixfenster ausgefroren werden. Dies ließe sich bewerkstelligen, indem man zwischen Depositionseinrichtung und Fenster, kurz vor dem Thermoschutzschild, eine rotierende Sektorscheibe einfügt, ähnlich einem Chopper in einem

dispersiven IR-Spektrometer (s. Abbildung 8.2). Dadurch würde abwechselnd eine der beiden Substanzen auf das spektroskopische Fenster treffen, um dort auszufrieren ohne dass es zu einer Aggregation kommt. Die andere Substanz würde hingegen auf den Chopper treffen, nicht ausfrieren und abgepumpt werden.



**Abbildung 8.2:** Schematische Darstellung einer modifizierten *twin jet* Depositionseinrichtung mit Chopper.

Die Anfertigung einer solchen Depositionseinrichtung ist allerdings mit hohem Aufwand verbunden und sie könnte nur für solche Substanzen verwendet werden, die für ihre Deposition keine allzu hohen Temperaturen benötigen.

Insgesamt kann gesagt werden, dass es noch eine Vielzahl von Systemen gibt, aus denen mit Hilfe der Matrixisolationsspektroskopie und den Techniken, die bereits in dieser Arbeit zur Anwendung kamen, neue Erkenntnisse über die Bildung von Wasserstoffbrückenbindungen gewonnen werden können.

## 9 Allgemeine Arbeitsmethoden

### 9.1 Matrixisolationsspektroskopie

#### 9.1.1 Aufbau der Matrixapparatur

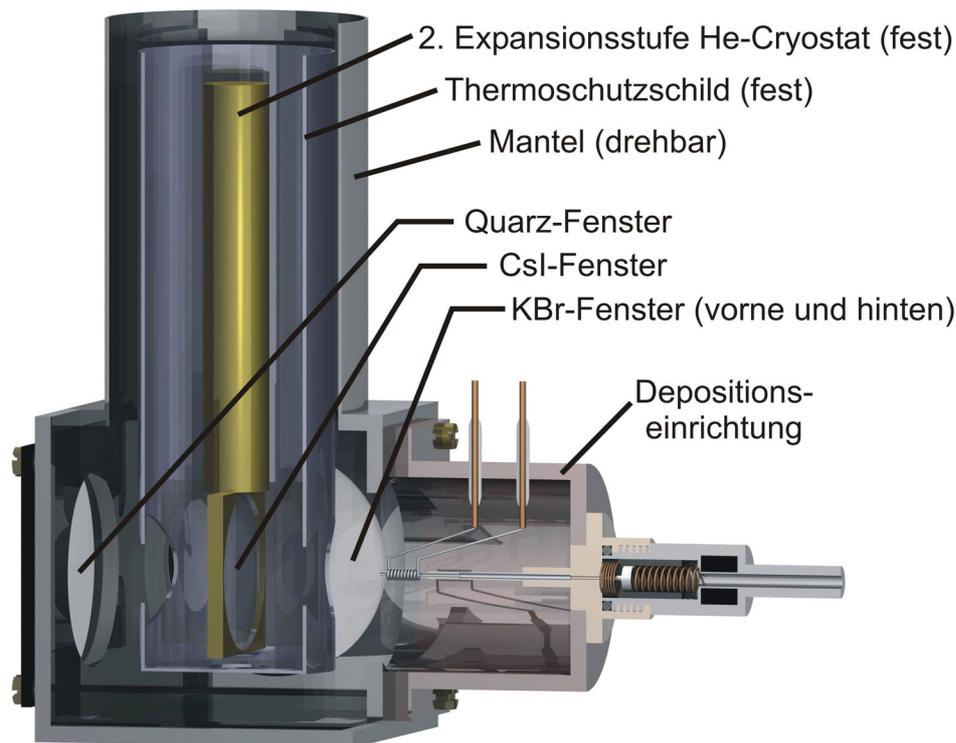
Eine Matrixapparatur ist auf einem fahrbaren Wagen montiert und besteht aus einer Gasmisch- und Dosiereinheit sowie einer Kühleinheit.

Die Gasmisch- und Dosiereinheit für die *slow spray-on* Technik besteht aus zwei Vorratsgefäßen aus Glas, Massenflussreglern (MKS), Messgeräten für Feinvakuum, einer zweistufigen Drehschieberpumpe sowie Anschlüssen für Probekolben. Da bei der gepulsten Deposition auch mit einem Druck über 1 bar gearbeitet wird, bestehen die Vorratsgefäße hierfür aus Edelstahl. Auf Massenflussregler kann hierbei verzichtet werden, da das Pulsventil selbst den Massenfluss regelt.

Die Kühleinheit besteht aus einem Displex Kryostaten mit geschlossenem Heliumkreislauf (APD HC-4) und einem Temperaturcontroller (Oxford ITC 4 oder ITC 503). Am unteren Ende der zweiten Kühlstufe ist ein CsI-Fenster in einem Kupferrahmen montiert. Der Kaltkopf ist an einen Hochvakuumpumpenstand angeschlossen, der aus einer zweistufigen Drehschieberpumpe, einer Öldiffusionspumpe und den zugehörigen Messgeräten für Fein- und Hochvakuum besteht.

Der Matrixkopf verfügt über einen frei drehbaren Mantel (s. Abbildung 9.1), so dass es möglich ist, entweder die Depositionseinrichtung auf das spektroskopische Fenster zu richten oder dieses zusammen mit den beiden KBr-Fenstern im Strahlengang des IR-Spektrometers zu positionieren. Das gegenüber der Depositionseinrichtung angebrachte Quarz-Fenster kann für Belichtungen der Matrix z.B. mit Lasern oder UV-Lampen verwendet werden.

Das spektroskopische Fenster kann über eine Widerstandsheizung erwärmt werden. Die Bestimmung der Temperatur des Kaltkopfes erfolgt mittels einer Siliziumdiode.



**Abbildung 9.1:** Schematische Darstellung eines Matrixkopfes mit Depositionseinrichtung (Pulsventil).

### 9.1.2 Depositionsbedingungen

Zur Erzeugung der Matrizes wurde entweder die Pulsdeposition<sup>[1, 56]</sup> oder die *slow spray-on* Technik<sup>[58]</sup> verwendet. Das Molverhältnis Inertgas/Substanz liegt typischerweise bei 1000:1. Um vorzeitige Aggregation zu vermeiden wurde bei allen Experimenten die Deposition bei der niedrigsten, mit dem jeweiligen Kryostaten möglichen, Temperatur durchgeführt.

Für die Pulsdeposition wurde entweder ein General Valve Serie 9 Pulsventil mit einem General Valve Iota One Controller oder ein Newport BV-100V Pulsventil mit einem Newport BV-100D Controller verwendet. Bei Spektren von Matrizes, die mit dem Newport Pulsventil erzeugt wurden, ist dies in der Abbildungsbeschreibung vermerkt.

Als Edelgas wurde Argon (Messer Griesheim, > 99.9999%) verwendet.

### 9.1.3 IR-Spektroskopie

Es wurden FT-IR-Spektrometer des Typs IFS 66, IFS 66s und Equinox 55 der Firma Bruker verwendet. Zur Steuerung und Auswertung wurde die PC-Software Opus 2.2 unter dem Betriebssystem OS/2 sowie Opus 4.0 unter Windows 2000 verwendet.

Für die Messungen wurden ein stickstoffgekühlter MCT-Detektor und ein Beamsplitter aus KBr verwendet. Alle Spektren wurden standardmäßig mit einer Auflösung von  $0.5 \text{ cm}^{-1}$  im Bereich von  $4000$  bis  $400 \text{ cm}^{-1}$  aufgenommen. Die Dateinamen der in den Abbildungen verwendeten Spektren sind jeweils kursiv in der Abbildungsbeschreibung aufgeführt.

Für die graphische Darstellung der Temper-Spektren wurden die einzelnen Spektren zunächst in XY-Datenfiles geschrieben. Die Grundlinien der Spektren wurden innerhalb des darzustellenden Bereiches mittels des Skriptes `norm` (s. Abschn. 10.2) zunächst auf gleiche Höhe gebracht. Mit dem Skript `mkxy` wurden alle Spektren dann zu einer Datei zusammengefasst, aus welcher dann mittels des Skriptes `povit3d` ein Objektfile für das Programm POV-Ray<sup>[191]</sup> erzeugt wurde.

## 9.2 Quantenchemische Rechnungen

Die quantenchemischen Rechnungen wurden auf PCs (Betriebssystem Windows 2000 bzw. SuSE Linux 8.0) und Workstations (IBM RS/6000 Modell 370 und Modell 260, Betriebssystem AIX 4.3; Silicon Graphics Power-Challenge XL 12, Betriebssystem IRIX 6.4; Silicon Graphics Origin 2000, Betriebssystem IRIX 6.4; HP SuperDome 32000, Betriebssystem HP-UX 11.i) durchgeführt. Mit Ausnahme der CCSD(T)-Rechnungen wurde das Programmpaket Gaussian 98 für Windows bzw. Gaussian 98<sup>[192]</sup> verwendet. Für die CCSD(T)-Rechnungen wurde das Programm Molpro<sup>[193]</sup> verwendet.

Für die graphische Darstellung wurden die Checkpoint-Files der berechneten Geometrien zunächst in das Brookhaven PDB-Format konvertiert, aus dem mittels der Software PovChem<sup>[194]</sup> Objekte für das Programm POV-Ray<sup>[191]</sup> erstellt und mit diesem gerendert wurden.

Die berechneten Spektren wurden mittels des Skriptes `log2dx` in ein File des Formates JCAMP-DX geschrieben, welches von der Spektrometersoftware OPUS gelesen werden kann.

### 9.3 Probenpräparation

Alle verwendeten Substanzen sind kommerziell erhältlich, wurden aber vor ihrer Verwendung zumeist weiter aufgereinigt.

Essigsäure **2** und Propionsäure **9** (beide Riedel-de Haën) wurden zunächst mehrere Stunden mit  $\text{KMnO}_4$  refluxiert, anschließend über eine lange Vigreux-Kolonnen destilliert und über Molsieb  $4\text{\AA}$  getrocknet und gelagert.

Formamid **10** (spektroskopisch, Acros) wurde, da es sehr hygroskopisch ist, in einer *Glove box* unter Argon gehandhabt und über Molsieb  $4\text{\AA}$  getrocknet.

Aceton **7** (spektroskopisch, J.T.Baker) wurde destilliert und über Molsieb  $4\text{\AA}$  getrocknet und gelagert.

Acetamid **11** (Merck), Benzoesäure **12** und Oxalsäure **13** (Fluka) wurden zunächst im Vakuumtrockenschrank ( $p < 50 \text{ mbar}$ ) bei  $50^\circ\text{C}$  getrocknet, anschließend im Ölpumpenvakuum sublimiert und unter Argon gelagert.

Acetylen **6** (Messer Griesheim,  $> 99.5\%$ ), Furan **3** (Fluka) und 1-Hexin **4** (Aldrich) wurden direkt eingesetzt.

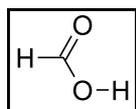
## 10 Anhang

### 10.1 Quantenchemische Rechnungen

Dieser Abschnitt enthält die wichtigsten Daten der quantenchemischen Rechnungen zu den in dieser Arbeit behandelten Molekülen. Mittels Frequenzrechnungen wurde die Natur aller Strukturen überprüft. Sofern nicht anders gekennzeichnet handelt es sich bei den Strukturen um lokale Minima. Die berechneten Übergangszustände haben jeweils genau eine imaginäre Frequenz, die wichtigsten wurden zudem mittels IRC-Rechnungen überprüft. Alle Rechnungen auf dem B3LYP/cc-pVTZ Niveau wurden mit der Option „*Opt=Tight*“ durchgeführt.

#### 10.1.1 Carbonsäuren

##### Ameisensäure



Monomer **1a**

File: b-hcooh-mo.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -189.827769822  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -189.794068  
 Dipolmomente: X=-1.4649 Y=-0.3138 Z=0.0000 Gesamt=1.4981  
 Framework: CS[SG(CH2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.421505	0.000000
2	8	-1.028836	-0.446407	0.000000
3	8	1.159744	0.117265	0.000000
4	1	-0.385644	1.449137	0.000000
5	1	-0.661615	-1.345037	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A'	630.2	44.1	11
2	A''	678.4	160.1	40
3	A''	1050.9	2.5	0
4	A'	1125.7	277.7	69
5	A'	1293.3	9.1	2
6	A'	1403.3	2.3	0
7	A'	1816.0	398.3	100
8	A'	3057.7	44.0	11
9	A'	3737.9	61.9	15

File: bp-hcooh-mo.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -189.840656910  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -189.806936  
 Dipolmomente: X=-1.4734 Y=-0.3329 Z=0.0000 Gesamt=1.5105  
 Framework: CS[SG(CH2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.420536	0.000000
2	8	-1.027957	-0.446402	0.000000
3	8	1.158010	0.117869	0.000000
4	1	-0.386406	1.446790	0.000000
5	1	-0.654014	-1.341740	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A'	630.2	43.7	12
2	A''	686.7	138.9	40
3	A''	1055.7	1.6	0
4	A'	1125.0	250.6	73
5	A'	1306.2	8.5	2
6	A'	1405.7	2.6	0
7	A'	1826.2	339.7	100
8	A'	3043.9	47.7	14
9	A'	3722.1	55.1	16

File: m-hcooh-mo.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -189.754967925  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -189.721057  
 Dipolmomente: X=-1.4684 Y=-0.2923 Z=0.0000 Gesamt=1.4972  
 Framework: CS[SG(CH2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.421628	0.000000
2	8	-1.026898	-0.445606	0.000000
3	8	1.157536	0.116256	0.000000
4	1	-0.383639	1.448380	0.000000
5	1	-0.661461	-1.343346	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A'	635.5	45.1	11
2	A''	680.1	162.8	39
3	A''	1059.3	2.1	0
4	A'	1135.8	282.5	69
5	A'	1301.6	9.3	2
6	A'	1410.5	2.6	0
7	A'	1828.1	408.6	100
8	A'	3074.9	42.5	10
9	A'	3759.4	66.7	16

File: l-hcooh-mo.log  
 Rechenmethode: **RBLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB-LYP): -189.797911042  
 E(RB-LYP)+ZPE: -189.765540  
 Dipolmomente: X=-1.3851 Y=-0.3363 Z=0.0000 Gesamt=1.4253  
 Framework: CS[SG(CH2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.426200	0.000000
2	8	-1.041059	-0.457857	0.000000
3	8	1.173390	0.126474	0.000000
4	1	-0.401404	1.455438	0.000000
5	1	-0.657249	-1.361573	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A'	601.8	35.6	10
2	A''	667.7	144.4	40
3	A''	1000.4	5.4	1
4	A'	1053.0	263.3	74
5	A'	1244.7	2.4	0
6	A'	1359.1	1.4	0
7	A'	1733.1	354.2	100
8	A'	2967.1	47.8	13
9	A'	3582.1	40.3	11

File: mp-hcooh-mo.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -188.822659713  
 E(MP2): -189.3622984  
 E(MP2)+ZPE: -189.328159  
 Dipolmomente: X=-1.6708 Y=-0.0867 Z=0.0000 Gesamt=1.6731  
 Framework: CS[SG(CH2O2)]

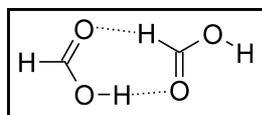
Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.421989	0.000000
2	8	-1.035557	-0.441661	0.000000
3	8	1.164256	0.110212	0.000000
4	1	-0.380828	1.449682	0.000000
5	1	-0.648765	-1.330029	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A'	633.0	42.5	12
2	A''	669.2	156.5	44
3	A''	1060.8	3.8	1
4	A'	1142.5	285.4	81
5	A'	1311.6	12.5	3
6	A'	1428.6	1.4	0
7	A'	1807.6	352.0	100
8	A'	3133.8	39.8	11
9	A'	3798.5	76.0	21

File: h-hcooh-mo.log  
 Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -188.825831488  
 E(RHF)+ZPE: -188.789066  
 Dipolmomente: X=-1.6729 Y=-0.1863 Z=0.0000 Gesamt=1.6832  
 Framework: CS[SG(CH2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.414723	0.000000
2	8	-1.008158	-0.438547	0.000000
3	8	1.137947	0.113469	0.000000
4	1	-0.366314	1.436277	0.000000
5	1	-0.672000	-1.323990	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	688.4	199.0	37
2	A'	695.6	61.0	11
3	A''	1188.0	0.4	0
4	A'	1260.2	318.4	59
5	A'	1413.1	22.3	4
6	A'	1531.4	10.0	1
7	A'	1996.3	537.7	100
8	A'	3261.9	46.3	8
9	A'	4103.3	117.3	21

Offenes Dimer **1b**

File: b-hcooh-dl-cs.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -379.669570761  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -379.599910  
 Dipolmomente: X=-1.7809 Y=-0.6963 Z=0.0000 Gesamt=1.9122  
 Framework: CS[SG(C2H4O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.070866	-1.048837	0.000000
2	8	-1.974755	-2.028019	0.000000
3	8	-1.353281	0.128884	0.000000
4	1	-0.046412	-1.433648	0.000000
5	1	-2.860366	-1.628788	0.000000
6	6	1.894925	1.142520	0.000000
7	8	0.797148	1.891513	0.000000
8	8	1.927204	-0.065328	0.000000
9	1	2.791899	1.776585	0.000000
10	1	0.000000	1.307352	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	62.8	3.9	0
2	A'	101.1	4.4	0
3	A''	107.5	0.1	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
4	A'	149.4	0.4	0
5	A'	182.5	21.8	2
6	A''	195.7	4.2	0
7	A'	648.5	70.6	7
8	A'	680.1	31.0	3
9	A''	700.2	157.0	17
10	A''	898.6	130.7	14
11	A''	1065.6	8.0	0
12	A''	1087.0	3.2	0
13	A'	1157.6	286.9	31
14	A'	1203.7	246.9	27
15	A'	1317.4	32.9	3
16	A'	1372.0	8.1	0
17	A'	1395.8	7.2	0
18	A'	1432.0	2.4	0
19	A'	1750.3	139.0	15
20	A'	1790.2	700.7	77
21	A'	3044.3	90.8	10
22	A'	3107.9	10.4	1
23	A'	3397.1	899.7	100
24	A'	3729.9	70.7	7

File: bp-hcooh-dl-cs.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -379.696545873  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -379.626760  
 Dipolmomente: X=-1.8700 Y=-0.7224 Z=0.0000 Gesamt=2.0047  
 Framework: CS[SG(C2H4O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.073232	-1.018260	0.000000
2	8	-1.964163	-2.007177	0.000000
3	8	-1.368863	0.154649	0.000000
4	1	-0.045111	-1.388177	0.000000
5	1	-2.852319	-1.615016	0.000000
6	6	1.893969	1.117404	0.000000
7	8	0.797558	1.863377	0.000000
8	8	1.933454	-0.088582	0.000000
9	1	2.789114	1.752413	0.000000
10	1	0.000000	1.277779	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	64.2	3.7	0
2	A'	108.2	4.3	0
3	A''	112.5	0.0	0
4	A'	150.9	0.6	0
5	A'	190.1	24.9	2
6	A''	208.7	4.5	0
7	A'	649.6	72.7	7
8	A'	686.5	29.9	3
9	A''	708.5	136.4	14
10	A''	913.0	99.4	10

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
11	A''	1070.4	5.3	0
12	A''	1100.0	1.5	0
13	A'	1156.3	272.5	28
14	A'	1209.4	218.3	23
15	A'	1329.3	27.4	2
16	A'	1384.9	10.0	1
17	A'	1405.0	7.9	0
18	A'	1439.3	0.8	0
19	A'	1755.4	135.6	14
20	A'	1797.5	608.7	64
21	A'	3029.1	105.3	11
22	A'	3103.2	13.8	1
23	A'	3345.7	942.4	100
24	A'	3715.1	64.9	6

File: m-hcooh-dl-cs.log  
 Rechenmethode: **RmPWLLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -379.525720319  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -379.455592  
 Dipolmomente: X=-1.7227 Y=-0.6722 Z=0.0000 Gesamt=1.8492  
 Framework: CS[SG(C2H4O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.066282	-1.043880	0.000000
2	8	-1.970265	-2.020016	0.000000
3	8	-1.346992	0.132437	0.000000
4	1	-0.043068	-1.428290	0.000000
5	1	-2.854621	-1.622146	0.000000
6	6	1.890465	1.133768	0.000000
7	8	0.800384	1.889998	0.000000
8	8	1.911920	-0.072621	0.000000
9	1	2.792210	1.758353	0.000000
10	1	0.000000	1.314373	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	62.8	3.9	0
2	A'	107.0	4.5	0
3	A''	108.9	0.1	0
4	A'	150.1	0.5	0
5	A'	185.3	21.2	2
6	A''	194.8	4.4	0
7	A'	653.3	72.3	8
8	A'	683.9	31.6	3
9	A''	701.2	159.6	17
10	A''	899.1	133.9	15
11	A''	1074.0	6.8	0
12	A''	1096.5	2.8	0
13	A'	1167.9	291.1	32
14	A'	1214.0	250.1	28
15	A'	1325.5	35.4	3
16	A'	1380.4	9.3	1
17	A'	1404.8	7.1	0
18	A'	1440.1	2.2	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
19	A'	1761.7	135.3	15
20	A'	1801.8	725.0	81
21	A'	3061.4	87.0	9
22	A'	3123.4	10.0	1
23	A'	3431.0	891.6	100
24	A'	3753.8	74.8	8

File: l-hcooh-dl.log  
 Rechenmethode: **RBLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB-LYP): -379.608036473  
 E(RB-LYP)+ZPE: -379.541147  
 Dipolmomente: X=-1.8732 Y=-0.7534 Z=0.0000 Gesamt=2.0191  
 Framework: CS[SG(C2H4O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.085337	-1.063238	0.000000
2	8	-1.991455	-2.064342	0.000000
3	8	-1.378854	0.124296	0.000000
4	1	-0.053909	-1.448961	0.000000
5	1	-2.887226	-1.660959	0.000000
6	6	1.917056	1.166582	0.000000
7	8	0.795043	1.912730	0.000000
8	8	1.968313	-0.052690	0.000000
9	1	2.806446	1.823485	0.000000
10	1	0.000000	1.306421	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	58.7	3.4	0
2	A'	89.1	4.0	0
3	A''	100.9	0.0	0
4	A'	144.9	0.2	0
5	A'	174.1	21.9	2
6	A''	190.2	3.2	0
7	A'	621.1	58.9	6
8	A'	651.1	25.2	2
9	A''	686.6	142.5	16
10	A''	869.0	111.2	12
11	A''	1016.8	14.2	1
12	A''	1036.0	6.7	0
13	A'	1093.2	273.7	30
14	A'	1131.2	237.8	26
15	A'	1269.0	14.2	1
16	A'	1322.8	3.8	0
17	A'	1349.6	9.4	1
18	A'	1388.5	3.1	0
19	A'	1669.8	136.9	15
20	A'	1707.9	611.8	69
21	A'	2952.8	105.0	11
22	A'	3018.6	12.9	1
23	A'	3243.8	883.5	100
24	A'	3575.4	47.3	5

File: mp-hcooh-dl.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -377.658577187  
 E(MP2): -378.7392274  
 E(MP2)+ZPE: -378.668693  
 Dipolmomente: X=-1.2680 Y=-0.5848 Z=0.0000 Gesamt=1.3964  
 Framework: CS[SG(C2H4O4)]

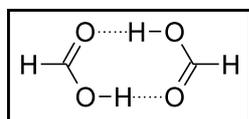
Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.055017	-1.079037	0.000000
2	8	-1.947968	-2.072398	0.000000
3	8	-1.349911	0.099917	0.000000
4	1	-0.029636	-1.457687	0.000000
5	1	-2.825909	-1.660720	0.000000
6	6	1.876879	1.185200	0.000000
7	8	0.763500	1.917430	0.000000
8	8	1.929894	-0.026586	0.000000
9	1	2.760251	1.835740	0.000000
10	1	0.000000	1.298778	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A"	53.0	3.3	0
2	A"	87.2	0.0	0
3	A'	103.8	2.9	0
4	A'	144.2	0.3	0
5	A'	174.2	18.9	2
6	A"	177.7	3.4	0
7	A'	652.3	59.1	7
8	A'	679.8	37.3	4
9	A"	688.5	157.0	18
10	A"	870.3	123.1	14
11	A"	1076.0	8.9	1
12	A"	1092.2	5.7	0
13	A'	1173.0	285.2	34
14	A'	1216.0	254.4	30
15	A'	1335.9	37.0	4
16	A'	1392.0	4.1	0
17	A'	1424.3	5.5	0
18	A'	1456.2	4.4	0
19	A'	1763.6	147.4	17
20	A'	1795.0	620.4	74
21	A'	3118.7	77.1	9
22	A'	3180.6	6.1	0
23	A'	3517.1	829.7	100
24	A'	3789.1	83.4	10

File: h-hcooh-dl.log  
 Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -377.664772362  
 E(RHF)+ZPE: -377.588983  
 Dipolmomente: X=0.5596 Y=1.3291 Z=0.0000 Gesamt=1.4421  
 Framework: CS[SG(C2H4O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.148002	1.041695	0.000000
2	8	2.132022	1.909065	0.000000
3	8	0.000000	1.343941	0.000000
4	1	1.503514	0.019406	0.000000
5	1	1.782091	2.789694	0.000000
6	6	-1.267131	-1.847934	0.000000
7	8	-1.956445	-0.737310	0.000000
8	8	-0.085120	-1.925486	0.000000
9	1	-1.922787	-2.713945	0.000000
10	1	-1.371700	0.020593	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	61.9	4.5	0
2	A'	96.2	5.5	0
3	A''	97.8	1.7	0
4	A'	145.3	0.3	0
5	A'	165.2	15.1	1
6	A''	184.6	6.2	0
7	A'	707.9	82.4	8
8	A''	712.5	188.1	19
9	A'	732.6	50.1	5
10	A''	898.4	188.2	19
11	A''	1198.6	0.0	0
12	A''	1214.9	0.2	0
13	A'	1280.5	328.4	34
14	A'	1320.4	297.6	31
15	A'	1428.5	52.6	5
16	A'	1484.9	15.0	1
17	A'	1529.5	12.1	1
18	A'	1546.8	10.5	1
19	A'	1935.3	148.4	15
20	A'	1973.7	958.2	100
21	A'	3248.8	73.3	7
22	A'	3309.6	9.1	0
23	A'	3897.1	638.3	66
24	A'	4096.7	121.9	12

Cyclisches Dimer **1c**

File: b-hcooh-dc.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -379.679559124  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -379.609277  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C2H4O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-0.127671	1.909061	0.000000
2	8	1.119577	1.497002	0.000000
3	8	-1.119577	1.201277	0.000000
4	1	-0.192046	3.003407	0.000000
5	1	1.158108	0.499866	0.000000
6	6	0.127671	-1.909061	0.000000
7	8	-1.119577	-1.497002	0.000000
8	8	1.119577	-1.201277	0.000000
9	1	0.192046	-3.003407	0.000000
10	1	-1.158108	-0.499866	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	78.0	2.5	0
2	AG	168.1	0.0	0
3	AU	176.7	8.3	0
4	AG	200.2	0.0	0
5	BG	251.0	0.0	0
6	BU	260.9	65.0	3
7	AG	685.1	0.0	0
8	BU	712.0	43.0	1
9	BG	945.6	0.0	0
10	AU	974.7	207.5	9
11	BG	1070.5	0.0	0
12	AU	1091.4	63.3	2
13	AG	1248.7	0.0	0
14	BU	1251.6	374.9	17
15	BU	1391.7	44.0	2
16	AG	1394.3	0.0	0
17	BU	1438.9	1.3	0
18	AG	1461.5	0.0	0
19	AG	1706.7	0.0	0
20	BU	1773.4	878.8	40
21	BU	3069.0	276.1	12
22	AG	3073.9	0.0	0
23	AG	3165.1	0.0	0
24	BU	3261.5	2154.4	100

File: bp-hcooh-dc.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -379.707747321  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -379.637405  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C2H4O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-0.106971	1.891844	0.000000
2	8	1.122942	1.443699	0.000000
3	8	-1.122942	1.219921	0.000000
4	1	-0.140591	2.986509	0.000000
5	1	1.136129	0.441074	0.000000
6	6	0.106971	-1.891844	0.000000
7	8	-1.122942	-1.443699	0.000000

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
8	8	1.122942	-1.219921	0.000000
9	1	0.140591	-2.986509	0.000000
10	1	-1.136129	-0.441074	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	77.6	2.1	0
2	AG	176.2	0.0	0
3	AU	189.6	9.6	0
4	AG	214.4	0.0	0
5	BG	270.9	0.0	0
6	BU	285.3	74.5	3
7	AG	692.5	0.0	0
8	BU	727.1	38.8	1
9	BG	984.4	0.0	0
10	AU	1004.5	137.4	6
11	BG	1080.4	0.0	0
12	AU	1103.3	65.1	3
13	AG	1261.1	0.0	0
14	BU	1263.9	327.3	15
15	BU	1405.5	48.0	2
16	AG	1407.2	0.0	0
17	BU	1452.9	0.5	0
18	AG	1487.6	0.0	0
19	AG	1702.1	0.0	0
20	BU	1778.3	774.2	36
21	AG	3036.3	0.0	0
22	BU	3049.8	577.9	26
23	AG	3062.2	0.0	0
24	BU	3163.7	2150.1	100

File: m-hcooh-dc.log  
 Rechenmethode: **RmPWLLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -379.535673598  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -379.464916  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C2H4O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-0.130774	1.909069	0.000000
2	8	1.116933	1.503034	0.000000
3	8	-1.116933	1.196973	0.000000
4	1	-0.200426	3.001686	0.000000
5	1	1.160977	0.509418	0.000000
6	6	0.130774	-1.909069	0.000000
7	8	-1.116933	-1.503034	0.000000
8	8	1.116933	-1.196973	0.000000
9	1	0.200426	-3.001686	0.000000
10	1	-1.160977	-0.509418	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	78.1	2.6	0
2	AG	168.2	0.0	0
3	AU	174.4	8.5	0
4	AG	201.1	0.0	0
5	BG	248.5	0.0	0
6	BU	259.8	63.2	2
7	AG	688.3	0.0	0
8	BU	713.7	45.4	2
9	BG	942.0	0.0	0
10	AU	973.6	223.8	10
11	BG	1078.6	0.0	0
12	AU	1097.0	51.9	2
13	AG	1256.2	0.0	0
14	BU	1259.3	386.0	18
15	BU	1398.9	46.5	2
16	AG	1402.0	0.0	0
17	BU	1445.2	1.5	0
18	AG	1467.0	0.0	0
19	AG	1720.3	0.0	0
20	BU	1785.8	902.8	42
21	BU	3085.5	238.4	11
22	AG	3089.8	0.0	0
23	AG	3217.2	0.0	0
24	BU	3308.4	2121.9	100

File: l-hcooh-dc.log  
 Rechenmethode: **RBLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB-LYP): -379.617859229  
 E(RB-LYP)+ZPE: -379.550395  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C2H4O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-0.122057	1.924116	0.000000
2	8	1.135975	1.493254	0.000000
3	8	-1.135975	1.224158	0.000000
4	1	-0.168832	3.026316	0.000000
5	1	1.158048	0.481411	0.000000
6	6	0.122057	-1.924116	0.000000
7	8	-1.135975	-1.493254	0.000000
8	8	1.135975	-1.224158	0.000000
9	1	0.168832	-3.026316	0.000000
10	1	-1.158048	-0.481411	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	76.0	2.1	0
2	AG	165.7	0.0	0
3	AU	175.2	6.9	0
4	AG	195.7	0.0	0
5	BG	248.3	0.0	0
6	BU	257.5	65.3	3
7	AG	658.6	0.0	0
8	BU	688.0	32.1	1

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
9	BG	925.7	0.0	0
10	AU	942.0	142.9	7
11	BG	1022.8	0.0	0
12	AU	1053.6	102.1	5
13	AG	1182.7	0.0	0
14	BU	1187.6	340.6	17
15	BU	1344.9	29.9	1
16	AG	1346.2	0.0	0
17	BU	1400.8	2.4	0
18	AG	1420.7	0.0	0
19	AG	1621.6	0.0	0
20	BU	1686.5	774.0	39
21	AG	2969.1	0.0	0
22	BU	2976.3	553.9	28
23	AG	2987.6	0.0	0
24	BU	3080.1	1969.0	100

File: mp-hcooh-dc.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -377.665351128  
 E(MP2): -378.7477509  
 E(MP2)+ZPE: -378.676581  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C2H4O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-0.136847	1.916895	0.000000
2	8	1.121548	1.521587	0.000000
3	8	-1.121548	1.194316	0.000000
4	1	-0.210799	3.009576	0.000000
5	1	1.143325	0.532175	0.000000
6	6	0.136847	-1.916895	0.000000
7	8	-1.121548	-1.521587	0.000000
8	8	1.121548	-1.194316	0.000000
9	1	0.210799	-3.009576	0.000000
10	1	-1.143325	-0.532175	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	55.9	2.6	0
2	AU	159.8	6.3	0
3	AG	162.4	0.0	0
4	AG	188.9	0.0	0
5	BG	216.1	0.0	0
6	BU	243.2	54.5	2
7	AG	683.5	0.0	0
8	BU	702.7	48.4	2
9	BG	895.9	0.0	0
10	AU	925.5	214.2	11
11	BG	1073.9	0.0	0
12	AU	1100.6	51.3	2
13	AG	1252.5	0.0	0
14	BU	1257.6	391.1	20

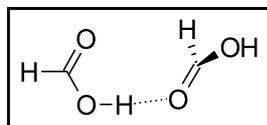
Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
15	BU	1405.2	25.7	1
16	AG	1414.7	0.0	0
17	BU	1460.6	5.6	0
18	AG	1480.9	0.0	0
19	AG	1731.9	0.0	0
20	BU	1788.5	798.6	41
21	BU	3141.3	182.5	9
22	AG	3144.7	0.0	0
23	AG	3335.0	0.0	0
24	BU	3418.4	1941.8	100

File: h-hcooh-dc.log  
 Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -377.672188968  
 E(RHF)+ZPE: -377.595602  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C2H4O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-0.162349	1.953989	0.000000
2	8	1.089647	1.608694	0.000000
3	8	-1.089647	1.207156	0.000000
4	1	-0.279876	3.032450	0.000000
5	1	1.184880	0.654081	0.000000
6	6	0.162349	-1.953989	0.000000
7	8	-1.089647	-1.608694	0.000000
8	8	1.089647	-1.207156	0.000000
9	1	0.279876	-3.032450	0.000000
10	1	-1.184880	-0.654081	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	76.3	4.5	0
2	AU	159.5	10.8	0
3	AG	160.7	0.0	0
4	AG	174.3	0.0	0
5	BU	209.3	41.0	3
6	BG	226.8	0.0	0
7	AG	732.7	0.0	0
8	BU	744.7	88.4	6
9	BG	896.0	0.0	0
10	AU	947.1	362.7	26
11	BG	1202.1	0.0	0
12	AU	1205.8	0.0	0
13	AG	1339.5	0.0	0
14	BU	1343.5	507.3	37
15	BU	1486.2	65.7	4
16	AG	1504.8	0.0	0
17	BU	1544.7	23.2	1
18	AG	1551.6	0.0	0
19	AG	1911.6	0.0	0
20	BU	1962.2	1165.7	85
21	BU	3266.3	137.5	10
22	AG	3268.6	0.0	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
23	AG	3831.0	0.0	0
24	BU	3872.7	1365.6	100

Übergangszustand **1d**

File: b-hcooh-rts.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -379.665172713  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -379.596265  
 Dipolmomente: X=-1.6545 Y=-0.3486 Z=-0.0820 Gesamt=1.6928  
 Framework: C1[X(C2H4O4)]  
 Imaginäre Freq.: **-88.1 cm<sup>-1</sup>**  
 IRC Forward: OK  
 IRC Reverse: OK

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.815872	-0.251291	0.408816
2	8	-2.550689	0.672207	-0.208833
3	8	-0.992622	-0.949886	-0.128857
4	1	-2.071379	-0.291728	1.473762
5	1	-2.273806	0.714063	-1.139108
6	6	2.196031	0.304175	0.006523
7	8	1.835056	-0.976022	-0.107447
8	8	1.447699	1.242804	0.105014
9	1	3.291923	0.386472	-0.000859
10	1	0.856759	-1.038933	-0.104842

File: bp-hcooh-rts.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -379.691370070  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -379.622475  
 Dipolmomente: X=-1.4181 Y=-0.1984 Z=-0.1433 Gesamt=1.4390  
 Framework: C1[X(C2H4O4)]  
 Imaginäre Freq.: **-106.2 cm<sup>-1</sup>**  
 IRC Forward: OK  
 IRC Reverse: OK

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.724528	-0.250633	0.410027
2	8	-2.379947	0.719772	-0.220014
3	8	-0.996078	-1.050036	-0.121083
4	1	-1.949522	-0.227199	1.480946
5	1	-2.120846	0.701912	-1.155542
6	6	2.093636	0.342008	0.005037
7	8	1.814904	-0.956305	-0.107249
8	8	1.290287	1.231309	0.109924
9	1	3.180781	0.494494	-0.010403
10	1	0.841609	-1.075380	-0.098012

File: m-hcooh-rts.log  
 Rechenmethode: **RmPWLLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -379.521111743  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -379.451749  
 Dipolmomente: X=-1.4069 Y=-0.2422 Z=-0.1288 Gesamt=1.4334  
 Framework: C1[X(C2H4O4)]  
 Imaginäre Freq.: **-100.6 cm<sup>-1</sup>**  
 IRC Forward: OK  
 IRC Reverse: OK

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.741472	-0.238550	0.417625
2	8	-2.447973	0.675747	-0.239175
3	8	-0.974264	-1.014106	-0.094038
4	1	-1.961386	-0.193907	1.488745
5	1	-2.198900	0.644673	-1.175867
6	6	2.117444	0.344486	-0.000904
7	8	1.840982	-0.953544	-0.120501
8	8	1.310036	1.228514	0.117947
9	1	3.203219	0.501987	-0.024889
10	1	0.870989	-1.081265	-0.102178

File: l-hcooh-rts.log  
 Rechenmethode: **RBLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB-LYP): -379.604046254  
 E(RB-LYP)+ZPE: -379.537865  
 Dipolmomente: X=-1.8983 Y=-0.4280 Z=-0.0351 Gesamt=1.9463  
 Framework: C1[X(C2H4O4)]  
 Imaginäre Freq.: **-74.5 cm<sup>-1</sup>**  
 IRC Forward: OK  
 IRC Reverse: OK

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.920104	-0.282642	0.390556
2	8	-2.681534	0.686386	-0.164552
3	8	-1.027672	-0.882472	-0.180896
4	1	-2.233458	-0.452395	1.434441
5	1	-2.356593	0.838072	-1.079287
6	6	2.302729	0.260536	0.017502
7	8	1.841189	-1.008391	-0.091237
8	8	1.622373	1.265508	0.095885
9	1	3.408878	0.248886	0.025670
10	1	0.850571	-0.990172	-0.102762

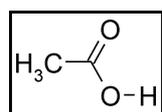
File: mp-hcooh-rts.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -377.655021164  
 E(MP2): -378.7352918  
 E(MP2)+ZPE: -378.665407  
 Dipolmomente: X=-0.8662 Y=-0.0908 Z=0.2156 Gesamt=0.8973  
 Framework: C1[X(C2H4O4)]  
 Imaginäre Freq.: **-107.6 cm<sup>-1</sup>**

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.677273	-0.264863	0.411809
2	8	-2.375249	0.693538	-0.199589
3	8	-0.963811	-1.069026	-0.147153
4	1	-1.848539	-0.226373	1.492390
5	1	-2.147647	0.648234	-1.141040
6	6	2.053425	0.390647	0.006545
7	8	1.875724	-0.932512	-0.085544
8	8	1.175770	1.220447	0.085127
9	1	3.125635	0.623926	0.002056
10	1	0.914167	-1.100071	-0.086258

File: h-hcooh-rts.log  
 Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF) -377.661279937  
 E(RHF)+ZPE -377.586180  
 Dipolmomente: X=-1.0491 Y=-0.1678 Z=-0.1903 Gesamt=1.0793  
 Framework: C1[X(C2H4O4)]  
 Imaginäre Freq.: **-92.1 cm<sup>-1</sup>**  
 IRC Forward: OK  
 IRC Reverse: OK

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.774968	-0.197994	0.421096
2	8	-2.423867	0.678998	-0.302930
3	8	-1.040207	-1.020547	-0.010332
4	1	-2.006470	-0.080644	1.473582
5	1	-2.178183	0.589703	-1.213789
6	6	2.135141	0.330701	-0.009606
7	8	1.857342	-0.940813	-0.167407
8	8	1.344277	1.192402	0.162317
9	1	3.207426	0.499025	-0.057212
10	1	0.915829	-1.084659	-0.124705

## Essigsäure



Monomer **2a**

File: b-hac-mo.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -229.164826976  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -229.103297  
 Dipolmomente: X=-0.2558 Y=-1.7165 Z=0.0000 Gesamt=1.7355  
 Framework: CS[SG(C2H2O2),X(H2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.071609	-0.899289	0.000000
2	6	0.000000	0.156078	0.000000
3	1	2.050215	-0.425028	0.000000
4	1	0.963812	-1.537029	0.880358
5	1	0.963812	-1.537029	-0.880358
6	8	0.175623	1.348120	0.000000
7	8	-1.241800	-0.395283	0.000000
8	1	-1.878080	0.335656	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A"	72.8	0.3	0
2	A'	424.4	4.8	1
3	A"	543.4	32.5	8
4	A'	586.1	37.9	10
5	A"	662.1	99.4	27
6	A'	859.1	4.7	1
7	A'	999.0	78.2	21
8	A"	1067.0	8.1	2
9	A'	1205.2	228.5	62
10	A'	1332.5	36.4	9
11	A'	1406.6	51.3	14
12	A'	1472.3	16.7	4
13	A"	1476.4	10.6	2
14	A'	1818.1	366.3	100
15	A'	3051.6	1.7	0
16	A"	3111.0	4.2	1
17	A'	3161.0	5.1	1
18	A'	3759.9	62.9	17

File: bp-hac-mo.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -229.181173772  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -229.119590  
 Dipolmomente: X=-0.3393 Y=-1.6616 Z=0.0000 Gesamt=1.6959  
 Framework: CS[SG(C2H2O2),X(H2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.064412	-0.904451	0.000000
2	6	0.000000	0.155828	0.000000
3	1	2.043397	-0.436651	0.000000
4	1	0.953322	-1.540940	0.877953
5	1	0.953322	-1.540940	-0.877953
6	8	0.184523	1.344533	0.000000
7	8	-1.242992	-0.387253	0.000000
8	1	-1.868753	0.352024	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A"	77.6	0.3	0
2	A'	423.1	4.3	1
3	A"	547.1	25.0	7
4	A'	585.3	38.4	12

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
5	A''	670.7	90.8	28
6	A'	859.4	3.5	1
7	A'	998.8	73.3	23
8	A''	1070.3	7.6	2
9	A'	1204.8	211.1	67
10	A'	1341.9	26.9	8
11	A'	1408.9	52.4	16
12	A'	1473.2	15.5	4
13	A''	1478.6	8.4	2
14	A'	1825.9	313.5	100
15	A'	3052.7	1.8	0
16	A''	3109.3	4.5	1
17	A'	3160.6	5.1	1
18	A'	3743.7	55.3	17

File: m-hac-mo.log  
 Rechenmethode: **RmPWLLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -229.063604883  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -229.001738  
 Dipolmomente: X=-0.2534 Y=-1.7277 Z=0.0000 Gesamt=1.7462  
 Framework: CS[SG(C2H2O2),X(H2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.069223	-0.900333	0.000000
2	6	0.000000	0.155908	0.000000
3	1	2.047491	-0.427895	0.000000
4	1	0.959635	-1.536829	0.879674
5	1	0.959635	-1.536829	-0.879674
6	8	0.177510	1.345768	0.000000
7	8	-1.240714	-0.391911	0.000000
8	1	-1.876470	0.337245	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	74.4	0.2	0
2	A'	426.4	4.7	1
3	A''	545.8	33.7	8
4	A'	590.0	39.0	10
5	A''	664.1	100.6	26
6	A'	865.4	4.3	1
7	A'	1006.8	76.9	20
8	A''	1074.4	8.0	2
9	A'	1215.0	230.9	61
10	A'	1341.2	37.4	10
11	A'	1416.3	52.4	13
12	A'	1480.0	16.5	4
13	A''	1484.3	10.4	2
14	A'	1830.9	374.3	99
15	A'	3063.4	1.8	0
16	A''	3122.0	4.3	1
17	A'	3172.1	5.2	1
18	A'	3783.8	67.4	18

File: l-hac-mo.log  
 Rechenmethode: **RBLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB-LYP): -229.107543464  
 E(RB-LYP)+ZPE: -229.048053  
 Dipolmomente: X=-0.1700 Y=-1.6632 Z=0.0000 Gesamt=1.6718  
 Framework: CS[SG(C2H2O2),X(H2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.099198	-0.883917	0.000000
2	6	0.000000	0.159005	0.000000
3	1	2.073963	-0.387578	0.000000
4	1	1.005578	-1.528314	0.885327
5	1	1.005578	-1.528314	-0.885327
6	8	0.150025	1.366924	0.000000
7	8	-1.247659	-0.430404	0.000000
8	1	-1.899232	0.301512	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A"	61.2	0.3	0
2	A'	411.6	4.8	1
3	A"	526.8	26.6	8
4	A'	561.4	30.7	9
5	A"	644.1	93.5	28
6	A'	815.5	8.7	2
7	A'	957.1	103.4	31
8	A"	1032.8	5.8	1
9	A'	1149.6	205.2	62
10	A'	1282.0	23.7	7
11	A'	1361.4	31.2	9
12	A'	1437.6	17.7	5
13	A"	1440.6	10.2	3
14	A'	1733.4	326.5	100
15	A'	2978.0	2.5	0
16	A"	3031.3	5.0	1
17	A'	3083.0	6.0	1
18	A'	3606.1	40.8	12

File: mp-hac-mo.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -227.880440497  
 E(MP2): -228.5682806  
 E(MP2)+ZPE: -228.506010  
 Dipolmomente: X=-0.1865 Y=-1.9619 Z=0.0000 Gesamt=1.9708  
 Framework: CS[SG(C2H2O2),X(H2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.067325	-0.902017	0.000000
2	6	0.000000	0.157185	0.000000
3	1	2.047818	-0.429895	0.000000
4	1	0.953250	-1.535438	0.882506
5	1	0.953250	-1.535438	-0.882506

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
6	8	0.178173	1.353921	0.000000
7	8	-1.240073	-0.400280	0.000000
8	1	-1.863066	0.340643	0.000000

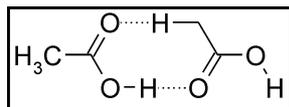
Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	55.1	0.6	0
2	A'	427.8	3.8	1
3	A''	530.0	47.6	15
4	A'	587.7	38.4	12
5	A''	638.9	84.0	27
6	A'	877.5	6.8	2
7	A'	1014.6	71.8	23
8	A''	1071.4	5.2	1
9	A'	1221.3	220.2	72
10	A'	1347.5	43.3	14
11	A'	1427.1	61.9	20
12	A'	1493.5	13.9	4
13	A''	1493.8	9.7	3
14	A'	1825.1	302.6	100
15	A'	3101.3	1.8	0
16	A''	3187.0	2.6	0
17	A'	3225.9	3.3	1
18	A'	3808.1	73.0	24

File: h-hac-mo.log  
 Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -227.883547551  
 E(RHF)+ZPE: -227.817299  
 Dipolmomente: X=-0.3877 Y=-1.8831 Z=0.0000 Gesamt=1.9226  
 Framework: CS[SG(C2H2O2),X(H2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.025892	-0.939314	0.000000
2	6	0.000000	0.155872	0.000000
3	1	2.015840	-0.508252	0.000000
4	1	0.888047	-1.563139	0.876130
5	1	0.888047	-1.563139	-0.876130
6	8	0.228098	1.316652	0.000000
7	8	-1.240502	-0.324853	0.000000
8	1	-1.848050	0.400790	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	101.9	0.1	0
2	A'	454.9	4.6	0
3	A''	582.3	50.1	10
4	A'	640.7	53.4	10
5	A''	707.9	115.7	23
6	A'	931.6	1.8	0
7	A'	1101.6	61.5	12
8	A''	1171.0	12.3	2
9	A'	1340.4	251.6	50

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
10	A'	1454.2	54.1	10
11	A'	1546.6	79.2	15
12	A'	1586.9	14.5	2
13	A''	1595.0	8.3	1
14	A'	2000.9	496.0	100
15	A'	3192.9	3.6	0
16	A''	3256.2	10.0	2
17	A'	3302.3	10.4	2
18	A'	4112.4	117.8	23

Offenes Dimer **2b**

File: b-hac-dl.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -458.342973675  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -458.218229  
 Dipolmomente: X=1.3998 Y=-0.3731 Z=0.0000 Gesamt=1.4486  
 Framework: CS[SG(C4H4O4),X(H4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-3.162259	1.733861	0.000000
2	6	-1.904564	0.903209	0.000000
3	1	-4.034098	1.083437	0.000000
4	1	-3.177691	2.381339	0.879872
5	1	-3.177691	2.381339	-0.879872
6	8	-1.879933	-0.309455	0.000000
7	8	-0.802146	1.664481	0.000000
8	1	0.000000	1.093575	0.000000
9	6	0.998917	-2.085896	0.000000
10	6	1.924335	-0.908007	0.000000
11	1	-0.034817	-1.745824	0.000000
12	1	1.199663	-2.702723	-0.879492
13	1	1.199663	-2.702723	0.879492
14	8	1.600519	0.263124	0.000000
15	8	3.223426	-1.267336	0.000000
16	1	3.751464	-0.453930	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	8.6	1.4	0
2	A''	38.3	4.3	0
3	A''	55.5	0.0	0
4	A'	92.3	4.6	0
5	A''	93.6	0.3	0
6	A''	108.8	0.0	0
7	A'	116.5	0.2	0
8	A'	142.3	13.5	1
9	A'	434.1	3.1	0
10	A'	446.8	19.8	1
11	A''	549.7	28.0	2
12	A''	595.3	0.2	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
13	A'	600.5	37.1	3
14	A'	610.9	34.4	3
15	A''	671.4	102.6	9
16	A'	872.9	3.5	0
17	A''	882.1	109.1	10
18	A'	882.3	7.7	0
19	A'	1017.5	47.0	4
20	A'	1021.1	64.4	6
21	A''	1067.7	6.8	0
22	A''	1077.8	10.3	0
23	A'	1224.1	219.3	21
24	A'	1266.0	295.0	28
25	A'	1350.4	98.0	9
26	A'	1380.0	22.9	2
27	A'	1418.3	63.9	6
28	A'	1425.0	37.4	3
29	A'	1471.8	8.4	0
30	A'	1473.8	20.1	1
31	A''	1477.5	9.2	0
32	A''	1489.6	11.1	1
33	A'	1766.9	94.6	9
34	A'	1792.8	760.2	73
35	A'	3045.6	13.5	1
36	A'	3049.3	2.5	0
37	A''	3106.9	2.7	0
38	A''	3108.3	6.1	0
39	A'	3156.2	7.2	0
40	A'	3156.8	14.8	1
41	A'	3460.6	1035.2	100
42	A'	3751.0	69.5	6

File: bp-hac-dl.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -458.376455546  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -458.251612  
 Dipolmomente: X=1.6019 Y=-0.3415 Z=0.0000 Gesamt=1.6379  
 Framework: CS[SG(C4H4O4),X(H4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-3.155174	1.723522	0.000000
2	6	-1.904051	0.885089	0.000000
3	1	-4.029517	1.080618	0.000000
4	1	-3.166395	2.370336	0.877510
5	1	-3.166395	2.370336	-0.877510
6	8	-1.893767	-0.325999	0.000000
7	8	-0.799561	1.637642	0.000000
8	1	0.000000	1.062587	0.000000
9	6	0.994872	-2.060628	0.000000
10	6	1.926068	-0.890071	0.000000
11	1	-0.034892	-1.716239	0.000000
12	1	1.192373	-2.677974	-0.876959
13	1	1.192373	-2.677974	0.876959
14	8	1.609137	0.281134	0.000000

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
15	8	3.220795	-1.257084	0.000000
16	1	3.749328	-0.444706	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A"	16.1	1.1	0
2	A"	39.1	4.0	0
3	A"	67.6	0.1	0
4	A"	93.5	0.4	0
5	A'	96.9	4.5	0
6	A"	113.8	0.1	0
7	A'	115.0	0.2	0
8	A'	144.5	14.8	1
9	A'	434.4	2.2	0
10	A'	447.2	21.6	1
11	A"	554.7	23.1	2
12	A"	596.9	0.4	0
13	A'	601.3	34.3	3
14	A'	612.4	35.8	3
15	A"	680.2	91.5	8
16	A'	873.8	3.2	0
17	A"	877.2	81.1	7
18	A'	883.1	10.3	0
19	A'	1019.1	40.9	3
20	A'	1022.6	60.7	5
21	A"	1070.4	6.4	0
22	A"	1082.3	8.6	0
23	A'	1223.4	205.6	18
24	A'	1267.0	273.0	25
25	A'	1359.4	76.9	7
26	A'	1383.5	24.8	2
27	A'	1422.5	61.2	5
28	A'	1432.9	33.5	3
29	A'	1473.2	9.5	0
30	A'	1475.8	16.7	1
31	A"	1479.4	7.3	0
32	A"	1492.4	8.0	0
33	A'	1771.2	98.2	9
34	A'	1797.7	676.9	62
35	A'	3046.7	15.7	1
36	A'	3050.5	2.5	0
37	A"	3105.5	2.9	0
38	A"	3106.8	6.5	0
39	A'	3155.8	6.7	0
40	A'	3156.4	18.0	1
41	A'	3422.4	1083.2	100
42	A'	3735.4	62.6	5

File: m-hac-dl.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -458.142332484  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -458.016874  
 Dipolmomente: X=1.3788 Y=-0.3672 Z=0.0000 Gesamt=1.4269  
 Framework: CS[SG(C4H4O4),X(H4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-3.162209	1.719003	0.000000
2	6	-1.900972	0.895600	0.000000
3	1	-4.029620	1.064418	0.000000
4	1	-3.180052	2.365621	0.879160
5	1	-3.180052	2.365621	-0.879160
6	8	-1.870202	-0.315193	0.000000
7	8	-0.803949	1.660621	0.000000
8	6	0.999264	-2.079286	0.000000
9	1	0.000000	1.095806	0.000000
10	6	1.921874	-0.899745	0.000000
11	1	-0.034211	-1.741990	0.000000
12	1	1.202258	-2.694448	-0.878844
13	1	1.202258	-2.694448	0.878844
14	8	1.595466	0.268818	0.000000
15	8	3.219255	-1.255503	0.000000
16	1	3.747117	-0.443957	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A"	11.7	1.2	0
2	A"	38.7	4.5	0
3	A"	61.9	0.0	0
4	A"	93.9	0.2	0
5	A'	95.0	4.8	0
6	A"	108.3	0.0	0
7	A'	117.2	0.2	0
8	A'	145.6	13.2	1
9	A'	436.4	3.0	0
10	A'	449.5	19.9	1
11	A"	552.4	28.8	2
12	A"	598.9	0.3	0
13	A'	604.4	39.3	3
14	A'	614.5	34.6	3
15	A"	673.7	103.9	10
16	A'	878.3	3.2	0
17	A"	884.2	110.6	10
18	A'	888.3	7.7	0
19	A'	1024.9	44.9	4
20	A'	1028.9	65.1	6
21	A"	1075.2	6.8	0
22	A"	1085.1	10.3	0
23	A'	1233.8	220.0	21
24	A'	1276.7	295.1	28
25	A'	1359.4	101.5	9
26	A'	1388.9	23.2	2
27	A'	1427.8	65.6	6
28	A'	1435.0	39.0	3
29	A'	1479.7	8.2	0
30	A'	1481.8	19.9	1
31	A"	1485.3	9.2	0
32	A"	1497.9	11.0	1
33	A'	1778.6	94.1	9
34	A'	1804.8	778.7	74

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
35	A'	3057.1	13.5	1
36	A'	3060.7	2.5	0
37	A''	3117.3	2.9	0
38	A''	3118.8	6.3	0
39	A'	3166.8	8.0	0
40	A'	3168.9	14.3	1
41	A'	3489.2	1038.4	100
42	A'	3774.2	73.9	7

File: l-hac-dl-cl.log  
 Rechenmethode: **RBLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB-LYP): -458.226728943  
 E(RB-LYP)+ZPE: -458.106090  
 Dipolmomente: X=1.3980 Y=-0.2776 Z=0.0959 Gesamt=1.4285  
 Framework: Cl[X(C4H8O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-3.643578	-0.072977	0.000482
2	6	-2.133455	0.089470	-0.013419
3	1	-4.122203	0.909418	-0.054462
4	1	-3.962393	-0.694306	-0.848259
5	1	-3.955815	-0.590958	0.918390
6	8	-1.546204	1.163538	-0.065808
7	8	-1.499374	-1.111816	0.040821
8	1	-0.514393	-0.966676	0.030045
9	6	1.873712	1.391884	0.059756
10	6	2.148894	-0.090286	0.003793
11	1	0.795878	1.572588	-0.003332
12	1	2.267781	1.795581	1.004388
13	1	2.404038	1.901666	-0.756315
14	8	1.314598	-0.990564	0.012636
15	8	3.486352	-0.372053	-0.052403
16	1	3.570700	-1.348692	-0.076090

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	18.5	1.2	0
2	33.7	3.9	0
3	48.8	0.2	0
4	86.7	3.3	0
5	91.3	1.0	0
6	107.2	0.1	0
7	113.2	0.3	0
8	133.8	13.9	1
9	420.9	4.2	0
10	433.2	18.3	1
11	531.0	22.4	2
12	572.6	0.1	0
13	576.9	27.7	2
14	586.0	29.7	2
15	653.6	98.0	9
16	831.9	6.4	0
17	839.8	5.3	0
18	856.3	98.0	9

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
19	981.2	135.1	13
20	982.3	17.4	1
21	1033.2	4.7	0
22	1042.8	7.2	0
23	1170.6	210.7	20
24	1199.7	293.6	29
25	1297.5	70.6	7
26	1339.5	14.4	1
27	1371.5	15.4	1
28	1371.9	42.3	4
29	1436.9	3.1	0
30	1438.3	27.3	2
31	1441.7	8.8	0
32	1452.3	10.4	1
33	1684.2	89.2	8
34	1708.5	678.3	67
35	2971.1	13.8	1
36	2975.5	3.8	0
37	3027.1	4.3	0
38	3028.3	7.4	0
39	3076.9	10.1	1
40	3078.0	11.3	1
41	3310.6	1003.6	100
42	3599.2	46.8	4

File: mp-hac-dl-cl.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -455.772525845  
 E(MP2): -457.1509558  
 E(MP2)+ZPE: -457.024408  
 Dipolmomente: X=1.0025 Y=-0.0907 Z=0.5872 Gesamt=1.1653  
 Framework: Cl[X(C4H8O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-3.579560	-0.029820	0.021783
2	6	-2.080227	0.082651	-0.068241
3	1	-4.032409	0.943681	-0.157747
4	1	-3.932137	-0.748196	-0.722496
5	1	-3.863355	-0.406608	1.006784
6	8	-1.474829	1.090102	-0.383602
7	8	-1.480970	-1.079364	0.237434
8	1	-0.512825	-0.959290	0.141466
9	6	1.811278	1.340521	0.338108
10	6	2.106638	-0.093455	0.017291
11	1	0.763432	1.548628	0.124877
12	1	2.000850	1.494421	1.404885
13	1	2.470694	2.001245	-0.224854
14	8	1.299039	-1.005961	0.006758
15	8	3.413155	-0.306701	-0.239034
16	1	3.505824	-1.257862	-0.399010

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	21.1	0.5	0
2	30.5	3.6	0
3	54.1	0.1	0
4	82.4	1.7	0
5	102.6	1.3	0
6	110.1	0.8	0
7	118.8	0.1	0
8	139.1	12.9	1
9	435.8	2.7	0
10	448.3	13.8	1
11	542.0	28.7	3
12	591.0	0.4	0
13	604.1	38.9	4
14	613.5	37.6	4
15	675.8	106.4	11
16	848.6	101.2	11
17	889.6	6.1	0
18	897.9	5.4	0
19	1030.4	44.1	4
20	1037.3	51.3	5
21	1073.1	4.3	0
22	1085.4	6.6	0
23	1237.8	236.5	25
24	1283.2	272.3	29
25	1367.3	86.6	9
26	1392.4	25.3	2
27	1433.2	93.6	10
28	1444.8	40.1	4
29	1493.4	3.0	0
30	1494.3	18.7	2
31	1495.8	9.9	1
32	1513.9	9.6	1
33	1786.9	84.5	9
34	1807.8	632.7	69
35	3094.6	9.3	1
36	3098.4	2.8	0
37	3183.7	3.9	0
38	3186.0	6.8	0
39	3221.5	5.3	0
40	3223.7	6.7	0
41	3561.8	912.7	100
42	3796.0	78.5	8

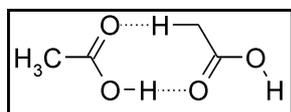
File: h-hac-dl.log  
 Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -455.779221964  
 E(RHF)+ZPE: -455.645039  
 Dipolmomente: X=1.2286 Y=-0.3220 Z=0.0000 Gesamt=1.2701  
 Framework: CS[SG(C4H4O4),X(H4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-3.090162	1.924818	0.000000
2	6	-1.878315	1.036748	0.000000

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
3	1	-3.986150	1.322033	0.000000
4	1	-3.068348	2.564308	0.875536
5	1	-3.068348	2.564308	-0.875536
6	8	-1.913257	-0.151695	0.000000
7	8	-0.756618	1.726486	0.000000
8	1	0.000000	1.143625	0.000000
9	6	0.950078	-2.192799	0.000000
10	6	1.904781	-1.039362	0.000000
11	1	-0.066050	-1.830129	0.000000
12	1	1.137445	-2.804728	-0.875524
13	1	1.137445	-2.804728	0.875524
14	8	1.607381	0.113864	0.000000
15	8	3.171171	-1.422996	0.000000
16	1	3.726303	-0.656395	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A"	25.5	0.6	0
2	A"	38.5	6.0	0
3	A'	79.4	4.8	0
4	A"	87.2	0.0	0
5	A"	97.0	0.0	0
6	A"	107.1	0.0	0
7	A'	111.0	0.2	0
8	A'	127.7	9.1	0
9	A'	461.7	3.3	0
10	A'	472.5	13.8	1
11	A"	586.7	43.8	4
12	A'	648.3	55.8	5
13	A"	649.3	1.1	0
14	A'	657.4	49.3	4
15	A"	714.6	112.6	11
16	A"	887.6	153.1	15
17	A'	938.1	1.6	0
18	A'	949.6	6.2	0
19	A'	1111.8	40.8	4
20	A'	1116.4	61.6	6
21	A"	1171.6	9.8	0
22	A"	1179.0	16.5	1
23	A'	1351.8	231.6	23
24	A'	1390.7	287.9	29
25	A'	1468.0	119.1	12
26	A'	1489.7	5.1	0
27	A'	1554.1	141.3	14
28	A'	1558.8	41.6	4
29	A'	1587.1	3.3	0
30	A'	1588.5	25.3	2
31	A"	1595.8	7.4	0
32	A"	1606.4	9.2	0
33	A'	1955.3	112.2	11
34	A'	1979.3	990.4	100
35	A'	3191.4	8.0	0
36	A'	3191.9	6.2	0
37	A"	3253.5	10.9	1

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
38	A''	3254.3	9.8	0
39	A'	3298.7	13.8	1
40	A'	3318.8	1.5	0
41	A'	3936.0	747.2	75
42	A'	4111.4	121.8	12

Cyclisches Dimer **2c**

File: b-hac-dc-c2h.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -458.354607238  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -458.229404  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C4H4O4),X(H4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-0.010567	3.437298	0.000000
2	6	-0.010567	1.934335	0.000000
3	1	-1.032436	3.809126	0.000000
4	1	0.523601	3.803544	0.879747
5	1	0.523601	3.803544	-0.879747
6	8	-1.036657	1.264753	0.000000
7	8	1.205161	1.412468	0.000000
8	1	1.155239	0.415679	0.000000
9	6	0.010567	-3.437298	0.000000
10	6	0.010567	-1.934335	0.000000
11	1	1.032436	-3.809126	0.000000
12	1	-0.523601	-3.803544	0.879747
13	1	-0.523601	-3.803544	-0.879747
14	8	1.036657	-1.264753	0.000000
15	8	-1.205161	-1.412468	0.000000
16	1	-1.155239	-0.415679	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	39.9	4.3	0
2	BG	46.6	0.0	0
3	AU	66.0	1.3	0
4	AU	76.9	0.0	0
5	BG	119.9	0.0	0
6	AG	159.2	0.0	0
7	BU	172.4	31.2	1
8	AG	174.1	0.0	0
9	AG	442.0	0.0	0
10	BU	479.1	50.0	1
11	AU	599.6	0.4	0
12	BG	602.9	0.0	0
13	AG	625.5	0.0	0
14	BU	632.9	42.2	1
15	AG	901.3	0.0	0
16	BU	904.2	5.9	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
17	BG	955.2	0.0	0
18	AU	995.4	217.1	7
19	AG	1028.2	0.0	0
20	BU	1031.5	37.9	1
21	BG	1070.0	0.0	0
22	AU	1071.8	15.9	0
23	AG	1311.7	0.0	0
24	BU	1326.6	416.2	13
25	BU	1393.4	50.5	1
26	AG	1398.6	0.0	0
27	BU	1454.0	143.4	4
28	AG	1461.2	0.0	0
29	BU	1470.6	68.3	2
30	BG	1477.0	0.0	0
31	AU	1477.1	20.9	0
32	AG	1481.8	0.0	0
33	AG	1712.2	0.0	0
34	BU	1761.6	864.7	28
35	AG	3052.0	0.0	0
36	BU	3052.1	2.6	0
37	BG	3111.3	0.0	0
38	AU	3111.3	7.3	0
39	AG	3145.7	0.0	0
40	BU	3161.3	18.7	0
41	AG	3162.7	0.0	0
42	BU	3241.3	3030.2	100

File: bp-hac-dc.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -458.389364162  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -458.264088  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C4H4O4),X(H4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-0.039397	3.419511	0.000000
2	6	-0.039397	1.917606	0.000000
3	1	-1.058463	3.792009	0.000000
4	1	0.494339	3.784971	0.877396
5	1	0.494339	3.784971	-0.877396
6	8	-1.069316	1.255227	0.000000
7	8	1.171302	1.396095	0.000000
8	1	1.124415	0.395071	0.000000
9	6	0.039397	-3.419511	0.000000
10	6	0.039397	-1.917606	0.000000
11	1	1.058463	-3.792009	0.000000
12	1	-0.494339	-3.784971	0.877396
13	1	-0.494339	-3.784971	-0.877396
14	8	1.069316	-1.255227	0.000000
15	8	-1.171302	-1.396095	0.000000
16	1	-1.124415	-0.395071	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	47.2	4.9	0
2	BG	57.5	0.0	0
3	AU	69.7	0.4	0
4	AU	76.4	0.0	0
5	BG	125.8	0.0	0
6	AG	163.8	0.0	0
7	BU	183.5	33.2	1
8	AG	185.4	0.0	0
9	AG	443.1	0.0	0
10	BU	487.0	58.5	1
11	AU	602.6	0.7	0
12	BG	611.3	0.0	0
13	AG	629.7	0.0	0
14	BU	639.5	39.3	1
15	AG	903.6	0.0	0
16	BU	908.1	8.3	0
17	BG	984.9	0.0	0
18	AU	1023.0	162.0	4
19	AG	1030.6	0.0	0
20	BU	1034.2	30.8	0
21	BG	1074.3	0.0	0
22	AU	1074.7	14.4	0
23	AG	1321.6	0.0	0
24	BU	1336.3	376.8	11
25	BU	1398.1	79.8	2
26	AG	1400.8	0.0	0
27	BU	1465.4	75.9	2
28	AG	1467.0	0.0	0
29	BU	1476.0	100.7	3
30	BG	1479.1	0.0	0
31	AU	1479.1	16.9	0
32	AG	1504.7	0.0	0
33	AG	1708.4	0.0	0
34	BU	1763.7	777.2	23
35	AG	3034.7	0.0	0
36	BU	3053.5	2.8	0
37	AG	3054.0	0.0	0
38	BG	3110.1	0.0	0
39	AU	3110.2	7.6	0
40	BU	3149.5	3277.3	99
41	AG	3160.8	0.0	0
42	BU	3161.2	129.8	3

File: m-hac-dc.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -458.153926881  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -458.027996  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C4H4O4),X(H4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-0.009644	3.433975	0.000000
2	6	-0.009644	1.932312	0.000000

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
3	1	-1.030678	3.805011	0.000000
4	1	0.524318	3.799056	0.879048
5	1	0.524318	3.799056	-0.879048
6	8	-1.033809	1.263242	0.000000
7	8	1.204458	1.410845	0.000000
8	1	1.154975	0.416412	0.000000
9	6	0.009644	-3.433975	0.000000
10	6	0.009644	-1.932312	0.000000
11	1	1.030678	-3.805011	0.000000
12	1	-0.524318	-3.799056	0.879048
13	1	-0.524318	-3.799056	-0.879048
14	8	1.033809	-1.263242	0.000000
15	8	-1.204458	-1.410845	0.000000
16	1	-1.154975	-0.416412	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	42.0	4.5	0
2	BG	49.9	0.0	0
3	AU	67.1	1.1	0
4	AU	77.6	0.1	0
5	BG	119.5	0.0	0
6	AG	160.5	0.0	0
7	BU	173.6	30.7	1
8	AG	176.1	0.0	0
9	AG	444.3	0.0	0
10	BU	481.8	49.4	1
11	AU	603.1	0.6	0
12	BG	606.3	0.0	0
13	AG	629.4	0.0	0
14	BU	636.1	44.8	1
15	AG	907.2	0.0	0
16	BU	909.8	5.6	0
17	BG	956.0	0.0	0
18	AU	997.1	219.9	7
19	AG	1035.2	0.0	0
20	BU	1038.4	39.2	1
21	BG	1077.4	0.0	0
22	AU	1079.3	16.5	0
23	AG	1321.3	0.0	0
24	BU	1336.2	417.6	13
25	BU	1402.5	51.3	1
26	AG	1408.1	0.0	0
27	BU	1463.1	146.4	4
28	AG	1469.6	0.0	0
29	BU	1478.7	69.6	2
30	BG	1484.8	0.0	0
31	AU	1484.9	20.7	0
32	AG	1491.0	0.0	0
33	AG	1724.5	0.0	0
34	BU	1773.9	881.3	29
35	AG	3063.5	0.0	0
36	BU	3063.5	2.6	0
37	BG	3121.7	0.0	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
38	AU	3121.8	7.5	0
39	AG	3170.3	0.0	0
40	BU	3172.0	16.5	0
41	AG	3183.9	0.0	0
42	BU	3274.1	2997.0	100

File: l-hac-dc.log  
 Rechenmethode: **RBLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB-LYP): -458.238021393  
 E(RB-LYP)+ZPE: -458.117037  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C4H4O4),X(H4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-0.028753	3.464642	0.000000
2	6	-0.028753	1.950402	0.000000
3	1	-1.056781	3.838327	0.000000
4	1	0.507466	3.835934	0.884625
5	1	0.507466	3.835934	-0.884625
6	8	-1.066436	1.273686	0.000000
7	8	1.203980	1.425014	0.000000
8	1	1.149296	0.414647	0.000000
9	6	0.028753	-3.464642	0.000000
10	6	0.028753	-1.950402	0.000000
11	1	1.056781	-3.838327	0.000000
12	1	-0.507466	-3.835934	0.884625
13	1	-0.507466	-3.835934	-0.884625
14	8	1.066436	-1.273686	0.000000
15	8	-1.203980	-1.425014	0.000000
16	1	-1.149296	-0.414647	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	30.7	3.4	0
2	BG	35.1	0.0	0
3	AU	62.2	1.9	0
4	AU	74.7	0.0	0
5	BG	118.1	0.0	0
6	AG	156.3	0.0	0
7	BU	169.7	31.4	1
8	AG	170.7	0.0	0
9	AG	429.8	0.0	0
10	BU	467.0	49.7	1
11	AU	577.9	0.1	0
12	BG	580.4	0.0	0
13	AG	601.9	0.0	0
14	BU	611.2	31.9	1
15	AG	862.1	0.0	0
16	BU	864.6	7.2	0
17	BG	936.0	0.0	0
18	AU	972.5	198.3	6
19	AG	995.8	0.0	0
20	BU	999.9	45.3	1
21	BG	1035.9	0.0	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
22	AU	1037.7	7.4	0
23	AG	1245.1	0.0	0
24	BU	1265.7	445.5	14
25	BU	1355.5	44.8	1
26	AG	1358.3	0.0	0
27	BU	1404.2	68.5	2
28	AG	1417.4	0.0	0
29	BU	1435.1	64.5	2
30	BG	1441.2	0.0	0
31	AU	1441.3	20.3	0
32	AG	1441.4	0.0	0
33	AG	1628.9	0.0	0
34	BU	1674.9	769.0	24
35	AG	2959.3	0.0	0
36	BU	2978.3	4.7	0
37	AG	2978.9	0.0	0
38	BG	3031.1	0.0	0
39	AU	3031.1	9.2	0
40	BU	3062.2	3132.0	100
41	AG	3083.1	0.0	0
42	BU	3083.2	35.1	1

File: mp-hac-dc-c2.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -455.781462077  
 E(MP2): -457.1611447  
 E(MP2)+ZPE: -457.034585  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0532 Gesamt=0.0532  
 Framework: C2[X(C4H8O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.778915	2.945269	0.012072
2	6	-0.997766	1.661612	-0.003305
3	1	-1.098823	3.791974	-0.058620
4	1	-2.487233	2.952689	-0.818977
5	1	-2.353743	3.002896	0.939674
6	8	0.228415	1.616583	0.001525
7	8	-1.778915	0.588446	-0.014842
8	1	-1.208131	-0.221172	-0.008140
9	6	1.778915	-2.945269	0.012072
10	6	0.997766	-1.661612	-0.003305
11	1	1.098823	-3.791974	-0.058620
12	1	2.487233	-2.952689	-0.818977
13	1	2.353743	-3.002896	0.939674
14	8	-0.228415	-1.616583	0.001525
15	8	1.778915	-0.588446	-0.014842
16	1	1.208131	0.221172	-0.008140

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A	19.4	1.4	0
2	B	20.2	0.0	0
3	A	33.2	3.4	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
4	A	62.0	0.2	0
5	B	100.1	0.0	0
6	A	153.0	0.0	0
7	B	165.4	27.6	1
8	A	166.3	0.0	0
9	A	444.9	0.0	0
10	B	476.0	38.6	1
11	B	573.4	0.1	0
12	A	589.0	0.1	0
13	A	627.2	0.0	0
14	B	633.9	49.8	1
15	B	858.7	0.0	0
16	A	907.4	216.1	8
17	B	915.1	6.1	0
18	A	916.2	0.0	0
19	A	1039.7	0.1	0
20	B	1042.0	41.9	1
21	B	1069.9	0.1	0
22	A	1074.8	8.3	0
23	A	1322.6	0.1	0
24	B	1339.0	391.1	14
25	B	1405.5	44.5	1
26	A	1413.6	0.2	0
27	B	1471.4	162.4	6
28	A	1481.0	0.3	0
29	B	1492.6	51.5	1
30	A	1494.2	18.9	0
31	B	1494.4	4.8	0
32	A	1502.2	0.1	0
33	A	1746.4	0.0	0
34	B	1787.8	745.5	28
35	A	3100.4	0.0	0
36	B	3100.4	3.1	0
37	B	3186.0	0.3	0
38	A	3186.0	4.4	0
39	A	3225.1	0.0	0
40	B	3225.3	9.2	0
41	A	3303.9	0.0	0
42	B	3387.7	2645.0	99

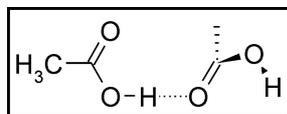
File: h-hac-dc.log  
 Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -455.788285425  
 E(RHF)+ZPE: -455.653366  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C4H4O4),X(H4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-0.011244	3.479910	0.000000
2	6	0.011244	1.980154	0.000000
3	1	-1.031747	3.832335	0.000000
4	1	0.513608	3.845394	0.875574
5	1	0.513608	3.845394	-0.875574

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
6	8	-0.973008	1.299544	0.000000
7	8	1.222921	1.489054	0.000000
8	1	1.203658	0.530005	0.000000
9	6	0.011244	-3.479910	0.000000
10	6	-0.011244	-1.980154	0.000000
11	1	1.031747	-3.832335	0.000000
12	1	-0.513608	-3.845394	0.875574
13	1	-0.513608	-3.845394	-0.875574
14	8	0.973008	-1.299544	0.000000
15	8	-1.222921	-1.489054	0.000000
16	1	-1.203658	-0.530005	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	48.5	6.1	0
2	BG	75.8	0.0	0
3	AU	76.5	0.2	0
4	AU	83.8	0.1	0
5	BG	111.0	0.0	0
6	BU	143.6	22.3	1
7	AG	148.5	0.0	0
8	AG	154.4	0.0	0
9	AG	469.2	0.0	0
10	BU	489.2	29.3	1
11	AU	649.1	1.3	0
12	BG	655.6	0.0	0
13	AG	666.3	0.0	0
14	BU	666.8	83.9	4
15	BG	901.9	0.0	0
16	AU	952.4	293.6	16
17	AG	960.0	0.0	0
18	BU	960.5	3.4	0
19	AG	1116.8	0.0	0
20	BU	1119.0	57.8	3
21	BG	1173.2	0.0	0
22	AU	1175.1	29.3	1
23	AG	1417.0	0.0	0
24	BU	1422.0	451.2	25
25	BU	1495.2	5.5	0
26	AG	1512.5	0.0	0
27	AG	1570.0	0.0	0
28	BU	1572.0	237.9	13
29	BU	1587.0	81.2	4
30	AG	1590.5	0.0	0
31	AU	1595.3	16.1	0
32	BG	1595.3	0.0	0
33	AG	1919.5	0.0	0
34	BU	1956.6	1127.7	63
35	BU	3193.6	6.6	0
36	AG	3193.6	0.0	0
37	BG	3256.8	0.0	0
38	AU	3256.9	18.0	1
39	AG	3303.0	0.0	0
40	BU	3303.0	21.8	1

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
41	AG	3822.1	0.0	0
42	BU	3863.2	1764.1	100

Übergangszustand **2d**

File: b-hac-rts.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -458.339858958  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -458.215551  
 Dipolmomente: X=0.6910 Y=-0.1985 Z=0.3206 Gesamt=0.7872  
 Framework: C1[X(C4H8O4)]  
 Imaginäre Freq.: **-55.0 cm<sup>-1</sup>**  
 IRC Forward: OK  
 IRC Reverse: OK

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-3.421819	-0.295321	0.183230
2	6	-1.930012	-0.144437	0.033014
3	1	-3.675865	-1.346752	0.297724
4	1	-3.763177	0.268453	1.054765
5	1	-3.927708	0.120747	-0.691000
6	8	-1.133800	-1.056855	0.062840
7	8	-1.572973	1.140032	-0.138639
8	1	-0.597772	1.188887	-0.224043
9	6	2.602509	-0.116076	1.237910
10	6	1.971517	0.160395	-0.094094
11	1	2.546469	0.771844	1.863736
12	1	2.044748	-0.928152	1.713605
13	1	3.635689	-0.444471	1.119588
14	8	1.230821	1.089379	-0.342385
15	8	2.302325	-0.758728	-1.016251
16	1	1.793465	-0.568553	-1.819254

File: bp-hac-rts.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -458.373187573  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -458.248813  
 Dipolmomente: X=0.6138 Y=-0.2783 Z=0.0616 Gesamt=0.6767  
 Framework: C1[X(C4H8O4)]  
 Imaginäre Freq.: **-60.6 cm<sup>-1</sup>**  
 IRC Forward: OK  
 IRC Reverse: OK

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-3.363642	-0.331066	0.142031
2	6	-1.874372	-0.141994	0.030802
3	1	-3.598882	-1.390190	0.169098
4	1	-3.730609	0.156215	1.045674
5	1	-3.861938	0.142176	-0.704212

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
6	8	-1.066477	-1.042048	-0.006032
7	8	-1.538500	1.155005	-0.023980
8	1	-0.561943	1.222546	-0.085989
9	6	2.579412	-0.325415	1.170896
10	6	1.925254	0.174261	-0.079985
11	1	2.643200	0.477323	1.898651
12	1	1.955365	-1.125478	1.573848
13	1	3.562863	-0.740932	0.961675
14	8	1.248084	1.176788	-0.161306
15	8	2.152645	-0.627554	-1.129897
16	1	1.626017	-0.293904	-1.871486

File: m-hac-rts.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -458.139215876  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -458.014177  
 Dipolmomente: X=0.5027 Y=-0.3278 Z=0.2897 Gesamt=0.6664  
 Framework: C1[X(C4H8O4)]  
 Imaginäre Freq.: **-61.4 cm<sup>-1</sup>**  
 IRC Forward: OK  
 IRC Reverse: OK

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-3.366023	-0.343531	0.172711
2	6	-1.881232	-0.138574	0.029795
3	1	-3.584464	-1.404876	0.254369
4	1	-3.726782	0.182791	1.058248
5	1	-3.882332	0.080911	-0.690128
6	8	-1.058050	-1.025243	0.015248
7	8	-1.564437	1.160359	-0.081236
8	1	-0.593103	1.244142	-0.164077
9	6	2.563597	-0.213790	1.215709
10	6	1.930404	0.166038	-0.088283
11	1	2.569469	0.641872	1.885674
12	1	1.962952	-1.013410	1.656940
13	1	3.571963	-0.596736	1.063018
14	8	1.229523	1.138502	-0.270257
15	8	2.206812	-0.710418	-1.063743
16	1	1.691034	-0.461155	-1.843733

File: l-hac-rts.log  
 Rechenmethode: **BLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB-LYP): -458.223681194  
 E(RB-LYP)+ZPE: -458.103500  
 Dipolmomente: X=0.9292 Y=-0.0014 Z=0.3554 Gesamt=0.9948  
 Framework: C1[X(C4H8O4)]  
 Imaginäre Freq.: **-49.0 cm<sup>-1</sup>**

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-3.528107	-0.215380	0.201036
2	6	-2.018102	-0.153842	0.050091
3	1	-3.834840	-1.240074	0.431471
4	1	-3.851169	0.461364	1.004858
5	1	-4.013734	0.123885	-0.724662
6	8	-1.256101	-1.100190	0.190497
7	8	-1.598853	1.106334	-0.264056
8	1	-0.611803	1.095559	-0.346233
9	6	2.697689	0.079657	1.252322
10	6	2.048197	0.150082	-0.110070
11	1	2.628303	1.054082	1.745591
12	1	2.153655	-0.664662	1.853727
13	1	3.742013	-0.247154	1.177677
14	8	1.242931	0.998662	-0.474581
15	8	2.445305	-0.872601	-0.921183
16	1	1.923254	-0.803730	-1.748128

File: mp-hac-ts.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -455.772003709  
 E(MP2): -457.1503861  
 E(MP2)+ZPE: -457.024216  
 Dipolmomente: X=-0.8725 Y=0.1252 Z=0.3824 Gesamt=0.9608  
 Framework: C1[X(C4H8O4)]  
 Imaginäre Freq.: **-76.5 cm<sup>-1</sup>**

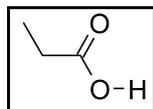
Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	3.524533	0.056526	-0.074532
2	6	2.018493	0.082373	-0.087373
3	1	3.911020	1.038664	-0.341227
4	1	3.881531	-0.238960	0.914324
5	1	3.877311	-0.689277	-0.791337
6	8	1.338389	1.025292	-0.445460
7	8	1.502361	-1.081082	0.344141
8	1	0.526468	-1.014780	0.282808
9	6	-1.789359	1.301349	0.494229
10	6	-2.051020	-0.107645	0.055089
11	1	-0.805812	1.371932	0.950383
12	1	-1.825480	1.957293	-0.378722
13	1	-2.573274	1.614121	1.187515
14	8	-1.279135	-1.047147	0.127095
15	8	-3.291833	-0.253699	-0.454001
16	1	-3.365901	-1.181515	-0.722419

File: h-hac-rts.log  
 Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF) -455.777270897  
 E(RHF)+ZPE -455.643462  
 Dipolmomente: X=0.3397 Y=-0.2872 Z=0.3382 Gesamt=0.5588  
 Framework: C1[X(C4H8O4)]  
 Imaginäre Freq.: **-48.8 cm<sup>-1</sup>**  
 IRC Forward: OK

IRC Reverse: OK

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-3.413136	-0.321274	0.177533
2	6	-1.930018	-0.132718	0.032687
3	1	-3.639887	-1.371767	0.283571
4	1	-3.762632	0.227182	1.045295
5	1	-3.915536	0.085235	-0.693199
6	8	-1.131715	-1.013051	0.040995
7	8	-1.601807	1.137361	-0.107126
8	1	-0.656440	1.225051	-0.191077
9	6	2.613552	-0.164525	1.219017
10	6	1.975052	0.156442	-0.097026
11	1	2.488921	0.665813	1.897788
12	1	2.129174	-1.047434	1.622650
13	1	3.663488	-0.391006	1.078535
14	8	1.278538	1.098725	-0.310007
15	8	2.261035	-0.733835	-1.026970
16	1	1.771804	-0.534215	-1.811966

### Propionsäure

Monomer (C<sub>s</sub>) **9a**

File: b-propi-mo-cs.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -268.489613626  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -268.399525  
 Dipolmomente: X=-1.5345 Y=-0.4893 Z=0.0000 Gesamt=1.6106  
 Framework: CS[SG(C3H2O2),X(H4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.573404	0.000000
2	8	1.172674	0.852059	0.000000
3	8	-0.971118	1.524009	0.000000
4	1	-0.526764	2.385145	0.000000
5	6	-0.590040	-0.817069	0.000000
6	6	0.461503	-1.922779	0.000000
7	1	-1.250036	-0.889894	0.871059
8	1	-1.250036	-0.889894	-0.871059
9	1	1.103597	-1.856371	0.880271
10	1	1.103597	-1.856371	-0.880271
11	1	-0.021578	-2.902488	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	39.1	0.0	0
2	A''	209.3	0.0	0
3	A'	250.2	2.7	0
4	A'	466.4	20.3	6

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
5	A''	517.4	30.1	9
6	A'	614.4	16.8	5
7	A''	647.3	91.2	29
8	A''	814.1	16.4	5
9	A'	814.4	9.5	3
10	A'	1012.9	1.0	0
11	A'	1081.2	93.4	29
12	A''	1110.9	0.3	0
13	A'	1160.6	246.2	78
14	A''	1284.3	0.1	0
15	A'	1301.3	2.8	0
16	A'	1400.5	50.3	16
17	A'	1422.5	3.2	1
18	A'	1460.8	16.5	5
19	A''	1495.5	7.7	2
20	A'	1502.9	10.3	3
21	A'	1813.1	313.6	100
22	A'	3036.9	11.5	3
23	A'	3043.5	20.1	6
24	A''	3062.4	3.2	1
25	A'	3108.3	21.7	6
26	A''	3114.4	23.1	7
27	A'	3759.8	62.8	20

File: bp-propi-mo-cs.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP) -268.509722142  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE -268.419531  
 Dipolmomente: X=-1.5381 Y=-0.3645 Z=0.0000 Gesamt=1.5807  
 Framework: CS[SG(C3H2O2),X(H4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.572539	0.000000
2	8	1.171969	0.846402	0.000000
3	8	-0.967559	1.523207	0.000000
4	1	-0.515868	2.379888	0.000000
5	6	-0.591243	-0.815329	0.000000
6	6	0.458354	-1.918026	0.000000
7	1	-1.250081	-0.888143	0.868870
8	1	-1.250081	-0.888143	-0.868870
9	1	1.099305	-1.849314	0.877809
10	1	1.099305	-1.849314	-0.877809
11	1	-0.020525	-2.896949	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	43.9	0.0	0
2	A''	208.4	0.0	0
3	A'	252.3	2.8	1
4	A'	466.9	19.1	6
5	A''	521.9	24.4	8
6	A'	614.1	17.8	6
7	A''	656.6	81.4	29

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
8	A'	814.5	10.5	3
9	A''	816.5	16.0	5
10	A'	1012.3	0.8	0
11	A'	1082.4	84.7	30
12	A''	1113.8	0.4	0
13	A'	1163.4	229.3	83
14	A''	1286.6	0.1	0
15	A'	1309.0	2.8	1
16	A'	1405.9	45.2	16
17	A'	1425.0	3.9	1
18	A'	1462.9	15.3	5
19	A''	1496.9	6.9	2
20	A'	1504.1	9.9	3
21	A'	1819.6	273.4	100
22	A'	3037.6	11.4	4
23	A'	3046.2	20.0	7
24	A''	3060.9	3.6	1
25	A'	3109.1	21.6	7
26	A''	3114.3	22.3	8
27	A'	3744.3	56.3	20

File: m-propi-mo-cs.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -268.359990558  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -268.269427  
 Dipolmomente: X=-1.5443 Y=-0.4938 Z=0.0000 Gesamt=1.6213  
 Framework: CS[SG(C3H2O2),X(H4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.573011	0.000000
2	8	1.171411	0.848512	0.000000
3	8	-0.967438	1.523698	0.000000
4	1	-0.525086	2.383950	0.000000
5	6	-0.591393	-0.815788	0.000000
6	6	0.460177	-1.920552	0.000000
7	1	-1.250187	-0.887923	0.870573
8	1	-1.250187	-0.887923	-0.870573
9	1	1.101513	-1.853176	0.879481
10	1	1.101513	-1.853176	-0.879481
11	1	-0.022058	-2.899461	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	42.5	0.0	0
2	A''	211.5	0.0	0
3	A'	252.1	2.7	0
4	A'	469.2	20.3	6
5	A''	520.1	30.7	9
6	A'	618.4	17.7	5
7	A''	649.2	92.8	28
8	A''	818.3	16.2	5
9	A'	820.0	9.3	2
10	A'	1017.5	1.0	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
11	A'	1088.8	86.3	26
12	A''	1118.3	0.4	0
13	A'	1170.4	255.0	79
14	A''	1291.5	0.1	0
15	A'	1309.5	2.9	0
16	A'	1410.2	52.7	16
17	A'	1431.0	2.7	0
18	A'	1469.3	15.9	4
19	A''	1503.0	7.7	2
20	A'	1510.6	10.7	3
21	A'	1826.2	320.7	100
22	A'	3049.0	11.8	3
23	A'	3054.8	19.5	6
24	A''	3074.0	3.3	1
25	A'	3118.8	22.4	6
26	A''	3124.6	23.7	7
27	A'	3783.9	67.3	21

File: l-propi-mo-cs.log  
 Rechenmethode: **RBLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB-LYP): -268.405312216  
 E(RB-LYP)+ZPE: -268.318074  
 Dipolmomente: X=-1.4595 Y=-0.5384 Z=0.0000 Gesamt=1.5557  
 Framework: CS[SG(C3H2O2),X(H4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.577087	0.000000
2	8	1.181046	0.872112	0.000000
3	8	-0.998109	1.530613	0.000000
4	1	-0.549246	2.401534	0.000000
5	6	-0.586067	-0.828267	0.000000
6	6	0.477293	-1.938981	0.000000
7	1	-1.250078	-0.907129	0.875971
8	1	-1.250078	-0.907129	-0.875971
9	1	1.122750	-1.871345	0.885738
10	1	1.122750	-1.871345	-0.885738
11	1	-0.006948	-2.925422	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	25.5	0.0	0
2	A''	203.1	0.0	0
3	A'	242.6	2.5	0
4	A'	448.8	19.9	7
5	A''	501.0	26.5	9
6	A'	587.7	11.8	4
7	A''	629.9	85.4	30
8	A'	776.8	7.7	2
9	A''	789.4	12.9	4
10	A'	979.7	4.0	1
11	A'	1030.5	167.4	60
12	A''	1077.5	0.1	0
13	A'	1102.5	167.1	60
14	A''	1248.9	0.0	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
15	A'	1257.5	2.0	0
16	A'	1344.0	24.5	8
17	A'	1383.3	5.8	2
18	A'	1423.3	17.5	6
19	A''	1460.2	7.2	2
20	A'	1467.2	8.3	2
21	A'	1729.9	278.5	100
22	A'	2959.0	11.9	4
23	A'	2971.0	22.8	8
24	A''	2980.5	4.0	1
25	A'	3030.4	23.3	8
26	A''	3036.5	25.1	9
27	A'	3606.7	39.8	14

File: mp-propi-mo-cs.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -266.925010060  
 E(MP2): -267.7641911  
 E(MP2)+ZPE: -267.672819  
 Dipolmomente: X=-1.7237 Y=-0.6092 Z=0.0000 Gesamt=1.8282  
 Framework: CS[SG(C3H2O2),X(H4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.569681	0.000000
2	8	1.181574	0.833335	0.000000
3	8	-0.966598	1.525882	0.000000
4	1	-0.499604	2.373938	0.000000
5	6	-0.602100	-0.813265	0.000000
6	6	0.455986	-1.909964	0.000000
7	1	-1.256951	-0.884548	0.875118
8	1	-1.256951	-0.884548	-0.875118
9	1	1.095284	-1.831867	0.881874
10	1	1.095284	-1.831867	-0.881874
11	1	-0.020180	-2.893550	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	36.1	0.0	0
2	A''	225.7	0.0	0
3	A'	252.6	2.2	0
4	A'	472.1	20.7	7
5	A''	504.2	44.7	17
6	A'	617.9	17.5	6
7	A''	624.8	79.3	30
8	A''	817.6	10.0	3
9	A'	833.2	7.2	2
10	A'	1030.5	1.3	0
11	A'	1105.0	94.1	36
12	A''	1119.3	0.2	0
13	A'	1178.8	236.4	91
14	A''	1294.0	0.0	0
15	A'	1312.2	3.7	1
16	A'	1418.7	64.1	24

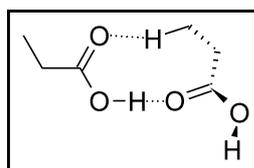
Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
17	A'	1439.3	5.1	1
18	A'	1478.0	12.7	4
19	A''	1514.0	7.0	2
20	A'	1520.7	9.6	3
21	A'	1818.1	258.8	100
22	A'	3089.9	17.0	6
23	A'	3093.7	9.0	3
24	A''	3139.6	2.0	0
25	A'	3179.8	16.8	6
26	A''	3185.7	17.5	6
27	A'	3806.2	72.4	27

File: h-propi-mo-cs.log  
 Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -266.928268148  
 E(RHF)+ZPE: -266.831660  
 Dipolmomente: X=-1.7167 Y=-0.5065 Z=0.0000 Gesamt=1.7898  
 Framework: CS[SG(C3H2O2),X(H4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.576063	0.000000
2	8	1.153031	0.841666	0.000000
3	8	-0.943984	1.515182	0.000000
4	1	-0.528266	2.364755	0.000000
5	6	-0.591277	-0.808667	0.000000
6	6	0.455857	-1.914132	0.000000
7	1	-1.241745	-0.877389	0.867235
8	1	-1.241745	-0.877389	-0.867235
9	1	1.091481	-1.850299	0.875371
10	1	1.091481	-1.850299	-0.875371
11	1	-0.031064	-2.883747	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	61.3	0.0	0
2	A''	231.6	0.0	0
3	A'	267.7	3.1	0
4	A'	501.6	20.7	4
5	A''	553.5	42.7	9
6	A'	671.0	30.6	7
7	A''	683.1	106.6	24
8	A''	881.2	21.1	4
9	A'	882.8	9.2	2
10	A'	1075.8	1.1	0
11	A'	1175.8	43.7	10
12	A''	1212.0	2.2	0
13	A'	1294.8	319.8	74
14	A''	1392.6	0.2	0
15	A'	1417.3	5.6	1
16	A'	1530.2	53.9	12
17	A'	1556.8	27.4	6
18	A'	1585.3	11.2	2
19	A''	1609.4	6.2	1
20	A'	1619.2	14.0	3

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
21	A'	1996.2	429.5	100
22	A'	3179.3	34.2	7
23	A'	3189.6	6.7	1
24	A''	3217.4	4.2	0
25	A'	3243.3	35.1	8
26	A''	3257.0	39.4	9
27	A'	4120.1	119.8	27

Offenes Dimer ( $C_1$ , aus 2  $C_s$ -Monomeren) **9b**

File: b-propi-dl-cl.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -536.990151931  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -536.808411  
 Dipolmomente: X=-1.5615 Y=-0.2017 Z=0.1854 Gesamt=1.5854  
 Framework: C1[X(C6H12O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-2.559608	-0.390273	-0.115627
2	8	-1.625996	-1.018635	0.335947
3	8	-3.610317	-1.014356	-0.687829
4	1	-3.431170	-1.966949	-0.664663
5	6	-2.718901	1.107808	-0.127942
6	6	-1.659252	1.855155	0.677302
7	1	-2.700490	1.411964	-1.180981
8	1	-3.732551	1.328278	0.221425
9	1	-0.661294	1.673520	0.276349
10	1	-1.671386	1.548484	1.725863
11	1	-1.855301	2.928957	0.637554
12	6	1.870011	-0.248352	0.054006
13	8	1.382023	0.600281	-0.659547
14	8	1.140412	-1.114585	0.775559
15	1	0.185480	-0.959467	0.613186
16	6	3.354759	-0.470707	0.250781
17	6	4.229654	0.496208	-0.541715
18	1	3.564915	-1.511782	-0.016832
19	1	3.553855	-0.402225	1.325640
20	1	4.043327	0.408139	-1.613821
21	1	4.028910	1.531541	-0.259247
22	1	5.286748	0.288868	-0.358333

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	16.1	0.7	0
2	24.1	3.6	0
3	37.9	0.6	0
4	53.2	0.5	0
5	71.2	0.6	0
6	77.7	1.1	0

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
7	96.7	0.1	0
8	125.0	9.4	1
9	210.1	0.3	0
10	232.0	0.1	0
11	253.2	1.7	0
12	264.4	11.4	1
13	469.2	25.2	2
14	488.9	4.3	0
15	523.2	24.6	2
16	561.9	0.1	0
17	617.9	14.9	1
18	624.6	23.5	2
19	660.9	90.0	10
20	811.9	0.0	0
21	817.9	12.7	1
22	823.8	9.7	1
23	830.6	25.3	2
24	844.1	116.3	13
25	1013.8	0.7	0
26	1017.1	1.8	0
27	1090.1	77.9	8
28	1092.6	28.7	3
29	1110.1	0.2	0
30	1117.2	3.1	0
31	1180.9	266.6	30
32	1205.9	307.1	34
33	1283.5	0.1	0
34	1288.6	0.2	0
35	1308.2	5.6	0
36	1342.9	11.7	1
37	1409.6	88.5	10
38	1416.7	26.6	3
39	1421.6	6.9	0
40	1428.3	1.2	0
41	1457.9	21.6	2
42	1462.3	17.2	1
43	1494.3	7.1	0
44	1500.3	7.1	0
45	1503.2	12.0	1
46	1518.2	9.4	1
47	1775.0	115.2	13
48	1792.7	635.7	71
49	3035.0	7.1	0
50	3035.5	15.3	1
51	3040.5	21.2	2
52	3040.7	26.3	2
53	3060.9	4.1	0
54	3065.1	7.8	0
55	3103.2	20.7	2
56	3104.0	27.6	3
57	3111.6	26.0	2
58	3124.2	2.3	0
59	3532.9	884.8	100
60	3753.9	69.5	7

File: bp-propi-dl-cl.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -537.030836177  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -536.848904  
 Dipolmomente: X=-1.6808 Y=-0.2713 Z=0.1754 Gesamt=1.7116  
 Framework: C1[X(C6H12O4)]

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	14.6	1.3	0
2	25.6	3.1	0
3	40.8	0.6	0
4	58.1	0.1	0
5	74.4	0.6	0
6	83.4	1.1	0
7	97.0	0.2	0
8	130.8	10.8	1
9	216.9	0.3	0
10	236.6	0.2	0
11	254.1	1.7	0
12	266.5	12.3	1
13	471.0	22.5	2
14	490.3	4.8	0
15	526.2	20.6	2
16	564.0	0.2	0
17	617.9	13.7	1
18	625.4	21.7	2
19	667.1	81.7	8
20	813.5	0.8	0
21	820.5	13.2	1
22	824.2	10.4	1
23	831.6	26.1	2
24	840.6	96.2	10
25	1013.3	0.6	0
26	1017.6	2.2	0
27	1091.1	72.8	7
28	1094.1	25.1	2
29	1113.0	0.3	0
30	1120.1	2.0	0
31	1182.9	241.7	26
32	1211.7	284.8	30
33	1286.6	0.1	0
34	1291.9	0.1	0
35	1315.5	4.4	0
36	1348.5	9.8	1
37	1415.9	76.8	8
38	1422.6	7.8	0
39	1427.1	28.0	3
40	1430.0	2.4	0
41	1459.3	21.7	2
42	1463.7	16.3	1
43	1496.1	6.4	0
44	1501.4	6.1	0
45	1504.6	11.7	1
46	1519.9	8.3	0
47	1778.0	101.0	10

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
48	1795.1	586.0	63
49	3036.3	13.9	1
50	3037.5	9.0	0
51	3043.4	23.7	2
52	3044.4	22.8	2
53	3059.9	4.5	0
54	3063.1	7.2	0
55	3104.9	17.8	1
56	3105.1	29.6	3
57	3112.2	25.1	2
58	3125.7	2.1	0
59	3496.5	922.1	100
60	3738.7	64.3	6

File: m-propi-dl-cl.log  
 Rechenmethode: **RmPWLLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -536.732786273  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -536.550048  
 Dipolmomente: X=-1.4729 Y=-0.1341 Z=0.1570 Gesamt=1.4873  
 Framework: C1[X(C6H12O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-2.524793	-0.387979	-0.121360
2	8	-1.621189	-1.023084	0.375203
3	8	-3.547598	-1.001680	-0.746496
4	1	-3.379581	-1.954470	-0.718162
5	6	-2.672800	1.110276	-0.134890
6	6	-1.633425	1.846432	0.704971
7	1	-2.620611	1.417389	-1.184566
8	1	-3.693979	1.335151	0.185477
9	1	-0.628046	1.668276	0.324592
10	1	-1.671239	1.526521	1.747893
11	1	-1.827833	2.919723	0.673503
12	6	1.838086	-0.254639	0.067673
13	8	1.329853	0.554832	-0.674104
14	8	1.130546	-1.098036	0.832242
15	1	0.173313	-0.965087	0.674106
16	6	3.327093	-0.445002	0.255240
17	6	4.174948	0.497449	-0.592754
18	1	3.550153	-1.492947	0.033508
19	1	3.537671	-0.322733	1.321992
20	1	3.975542	0.356648	-1.655800
21	1	3.960500	1.540317	-0.355713
22	1	5.236552	0.315725	-0.414858

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	13.7	1.2	0
2	25.8	3.3	0
3	39.6	0.7	0
4	54.3	0.2	0
5	71.6	0.7	0
6	82.5	1.2	0
7	99.4	0.2	0

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
8	131.9	9.8	1
9	217.3	0.2	0
10	232.9	0.0	0
11	254.1	1.9	0
12	267.0	11.6	1
13	472.3	24.7	2
14	492.2	4.9	0
15	525.5	24.8	2
16	565.6	0.1	0
17	621.7	15.8	1
18	628.7	22.8	2
19	662.9	91.9	10
20	816.7	0.2	0
21	822.6	13.7	1
22	829.1	9.0	1
23	836.5	23.6	2
24	847.8	118.4	13
25	1018.8	0.7	0
26	1021.9	1.8	0
27	1097.3	71.6	7
28	1099.4	27.2	3
29	1117.7	0.3	0
30	1124.9	2.7	0
31	1191.3	270.7	30
32	1217.8	304.7	34
33	1291.6	0.1	0
34	1296.4	0.2	0
35	1316.8	5.9	0
36	1353.7	11.6	1
37	1419.3	91.1	10
38	1426.3	22.6	2
39	1431.9	14.9	1
40	1436.1	0.9	0
41	1466.1	21.5	2
42	1470.3	17.1	1
43	1502.3	7.0	0
44	1507.2	7.0	0
45	1511.0	12.6	1
46	1526.3	9.2	1
47	1786.3	99.7	11
48	1804.1	662.3	73
49	3047.4	15.5	1
50	3047.8	7.4	0
51	3051.9	21.2	2
52	3052.2	25.6	2
53	3072.3	4.1	0
54	3076.1	7.7	0
55	3113.4	21.6	2
56	3114.5	28.1	3
57	3121.9	26.7	2
58	3136.3	2.1	0
59	3555.0	895.7	100
60	3777.4	74.4	8

File: l-propi-dl-cl.log  
 Rechenmethode: **RBLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB-LYP): -536.819909934  
 E(RB-LYP)+ZPE: -536.643915  
 Dipolmomente: X=-1.5622 Y=-0.2028 Z=0.1676 Gesamt=1.5842  
 Framework: Cl[X(C6H12O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-2.606433	-0.394590	-0.111453
2	8	-1.645882	-1.028811	0.306977
3	8	-3.702575	-1.030222	-0.632702
4	1	-3.513234	-1.991696	-0.603461
5	6	-2.765257	1.115103	-0.143697
6	6	-1.707622	1.880713	0.669841
7	1	-2.728753	1.407807	-1.206927
8	1	-3.788935	1.346681	0.188449
9	1	-0.697685	1.689650	0.286631
10	1	-1.737607	1.593492	1.730238
11	1	-1.902711	2.960119	0.605354
12	6	1.915154	-0.243737	0.039283
13	8	1.435795	0.659577	-0.632507
14	8	1.161799	-1.156406	0.715553
15	1	0.201252	-0.970612	0.554000
16	6	3.406913	-0.502301	0.235472
17	6	4.312890	0.505595	-0.490888
18	1	3.607345	-1.533310	-0.098152
19	1	3.599991	-0.505641	1.320378
20	1	4.135804	0.489895	-1.574569
21	1	4.127270	1.530205	-0.141776
22	1	5.370296	0.265612	-0.310079

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	17.1	0.4	0
2	23.2	3.4	0
3	33.4	0.4	0
4	44.1	0.6	0
5	66.7	0.6	0
6	71.1	1.0	0
7	91.6	0.2	0
8	115.5	9.1	1
9	195.8	0.3	0
10	218.0	0.0	0
11	245.1	1.5	0
12	255.9	10.7	1
13	450.3	24.4	2
14	470.4	3.9	0
15	508.7	22.0	2
16	542.7	0.3	0
17	593.8	10.9	1
18	598.5	19.3	2
19	645.7	84.3	10
20	786.4	7.9	0
21	789.0	0.2	0
22	791.8	11.7	1

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
23	794.7	20.6	2
24	816.8	101.1	12
25	980.8	0.5	0
26	983.6	1.6	0
27	1044.9	143.6	17
28	1051.5	53.3	6
29	1076.5	0.0	0
30	1082.6	8.0	0
31	1121.3	206.6	24
32	1137.8	292.5	35
33	1248.3	0.0	0
34	1252.3	0.3	0
35	1264.9	4.1	0
36	1299.0	9.3	1
37	1352.3	44.3	5
38	1359.0	12.3	1
39	1381.4	7.1	0
40	1389.6	3.6	0
41	1421.3	22.8	2
42	1425.8	17.2	2
43	1458.6	6.7	0
44	1464.6	6.3	0
45	1467.1	9.3	1
46	1481.0	7.5	0
47	1692.6	115.1	13
48	1709.5	560.9	67
49	2954.8	7.5	0
50	2958.1	15.1	1
51	2968.2	26.6	3
52	2968.5	25.6	3
53	2979.6	5.2	0
54	2986.7	10.5	1
55	3025.6	19.7	2
56	3026.1	33.0	3
57	3033.8	28.0	3
58	3047.1	2.7	0
59	3390.7	831.4	100
60	3601.1	45.7	5

File: mp-propil-dl-cl.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -533.859491450  
 E(MP2): -535.5435367  
 E(MP2)+ZPE: -535.358831  
 Dipolmomente: X=-0.1708 Y=0.6819 Z=-0.2117 Gesamt=0.7342  
 Framework: Cl[X(C6H12O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-2.218577	-0.374126	-0.156385
2	8	-1.686065	-1.002763	0.741897
3	8	-3.048617	-0.966317	-1.038502
4	1	-3.052698	-1.908565	-0.812439
5	6	-2.044733	1.092166	-0.437162

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
6	6	-1.569145	1.877425	0.781199
7	1	-1.306679	1.152813	-1.244856
8	1	-2.989648	1.478019	-0.829356
9	1	-0.602972	1.508999	1.128707
10	1	-2.282533	1.796105	1.605611
11	1	-1.459573	2.933658	0.523493
12	6	1.579216	-0.291616	0.198713
13	8	0.934535	0.006812	-0.789619
14	8	1.023930	-0.745886	1.336422
15	1	0.057055	-0.806261	1.187852
16	6	3.083339	-0.201932	0.310320
17	6	3.734849	0.363638	-0.945974
18	1	3.451416	-1.209230	0.534540
19	1	3.311362	0.405646	1.192695
20	1	3.507732	-0.258630	-1.814225
21	1	3.366469	1.370608	-1.154609
22	1	4.820107	0.408743	-0.823266

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	22.5	0.7	0
2	31.4	1.4	0
3	39.7	1.7	0
4	65.0	0.6	0
5	83.4	0.5	0
6	99.0	0.9	0
7	117.3	0.4	0
8	148.8	12.0	1
9	219.0	0.0	0
10	229.9	0.2	0
11	259.2	1.7	0
12	269.4	9.8	1
13	462.2	16.4	2
14	492.9	8.3	1
15	531.7	31.9	4
16	563.3	0.1	0
17	627.1	51.1	6
18	631.4	11.5	1
19	670.4	58.0	7
20	814.8	32.5	4
21	817.9	3.0	0
22	837.4	87.7	11
23	845.0	20.6	2
24	848.2	8.6	1
25	1030.7	1.3	0
26	1037.5	1.0	0
27	1107.1	61.7	8
28	1115.5	22.8	3
29	1119.1	0.4	0
30	1122.7	0.8	0
31	1201.8	263.8	35
32	1227.6	253.6	34
33	1294.9	0.1	0
34	1302.4	0.3	0

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
35	1323.8	7.7	1
36	1365.3	13.7	1
37	1426.0	47.0	6
38	1429.8	32.4	4
39	1440.6	64.2	8
40	1447.7	22.5	3
41	1472.7	18.5	2
42	1478.3	16.9	2
43	1514.7	7.3	0
44	1515.5	5.7	0
45	1520.2	9.3	1
46	1523.2	13.2	1
47	1785.0	16.6	2
48	1799.9	550.5	74
49	3087.3	20.7	2
50	3089.3	17.3	2
51	3091.4	8.3	1
52	3100.0	9.5	1
53	3137.0	2.3	0
54	3154.2	3.4	0
55	3174.6	13.7	1
56	3176.0	20.4	2
57	3182.9	19.0	2
58	3194.4	15.6	2
59	3565.2	738.5	100
60	3795.2	78.3	10

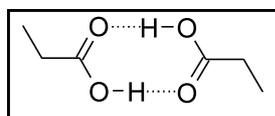
File: h-propi-dl-cl.log  
 Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -533.867083208  
 E(RHF)+ZPE: -533.672411  
 Dipolmomente: X=-0.2453 Y=0.1412 Z=-0.3498 Gesamt=0.4500  
 Framework: C1[X(C6H12O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-2.228094	-0.464298	-0.164441
2	8	-1.676253	-0.945590	0.775398
3	8	-2.788785	-1.216311	-1.096990
4	1	-2.637411	-2.127164	-0.890019
5	6	-2.370150	1.003622	-0.452039
6	6	-2.041660	1.896167	0.737436
7	1	-1.701407	1.205835	-1.283987
8	1	-3.378923	1.171633	-0.814490
9	1	-1.017657	1.755196	1.058473
10	1	-2.693319	1.687805	1.579460
11	1	-2.169477	2.936959	0.459090
12	6	1.688667	-0.226372	0.220893
13	8	1.031775	0.235495	-0.655820
14	8	1.165408	-0.838750	1.265714
15	1	0.214807	-0.861530	1.194121
16	6	3.194408	-0.189641	0.286531
17	6	3.841599	0.514932	-0.897906
18	1	3.534118	-1.218263	0.369992

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
19	1	3.460708	0.287089	1.225800
20	1	3.587324	0.025399	-1.831013
21	1	3.513878	1.545936	-0.966833
22	1	4.921581	0.505892	-0.789866

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	23.1	1.0	0
2	32.6	2.9	0
3	40.8	1.8	0
4	53.4	1.4	0
5	56.5	0.4	0
6	71.3	0.3	0
7	107.8	0.3	0
8	138.5	10.0	1
9	233.9	0.3	0
10	235.6	0.2	0
11	270.2	2.5	0
12	282.6	9.7	1
13	498.9	17.9	2
14	519.2	11.0	1
15	561.8	37.0	4
16	607.7	0.1	0
17	669.2	60.5	7
18	678.8	24.8	3
19	705.2	79.2	9
20	833.6	108.0	13
21	880.0	19.5	2
22	886.2	46.2	5
23	892.6	22.1	2
24	896.7	13.8	1
25	1078.0	1.1	0
26	1079.9	1.2	0
27	1178.8	40.9	5
28	1180.2	19.2	2
29	1211.6	1.8	0
30	1214.3	4.3	0
31	1313.7	308.7	38
32	1335.7	292.9	36
33	1392.4	0.2	0
34	1398.7	1.4	0
35	1425.5	9.8	1
36	1459.0	7.9	0
37	1532.5	46.3	5
38	1535.2	34.0	4
39	1561.3	61.0	7
40	1564.8	34.5	4
41	1582.2	17.0	2
42	1586.2	18.7	2
43	1609.3	6.2	0
44	1612.4	4.9	0
45	1619.7	15.6	1
46	1620.7	19.9	2
47	1949.7	112.1	14

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
48	1971.8	794.7	100
49	3175.8	37.4	4
50	3179.4	30.7	3
51	3187.2	7.2	0
52	3195.8	7.7	0
53	3213.8	4.2	0
54	3228.8	9.8	1
55	3238.4	39.0	4
56	3239.9	29.5	3
57	3252.7	42.4	5
58	3266.6	36.7	4
59	3968.2	578.4	72
60	4114.7	120.9	15

Cyclisches Dimer (C<sub>2h</sub>) **9c**

File: b-propi-dc-c2h.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -537.003914941  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -536.821704  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C6H4O4),X(H8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.626138	1.051434	0.000000
2	8	-1.626138	-0.173603	0.000000
3	8	-0.523022	1.783339	0.000000
4	1	0.283221	1.195898	0.000000
5	6	-2.885873	1.884057	0.000000
6	6	-4.173547	1.065374	0.000000
7	1	-2.830745	2.546685	0.870381
8	1	-2.830745	2.546685	-0.870381
9	1	-4.233491	0.422885	0.880402
10	1	-4.233491	0.422885	-0.880402
11	1	-5.041149	1.729169	0.000000
12	6	1.626138	-1.051434	0.000000
13	8	1.626138	0.173603	0.000000
14	8	0.523022	-1.783339	0.000000
15	1	-0.283221	-1.195898	0.000000
16	6	2.885873	-1.884057	0.000000
17	6	4.173547	-1.065374	0.000000
18	1	2.830745	-2.546685	-0.870381
19	1	2.830745	-2.546685	0.870381
20	1	4.233491	-0.422885	-0.880402
21	1	4.233491	-0.422885	0.880402
22	1	5.041149	-1.729169	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	31.6	0.3	0
2	BG	44.8	0.0	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
3	AU	49.6	4.0	0
4	AU	74.6	0.0	0
5	BG	98.4	0.0	0
6	BU	107.5	8.2	0
7	AG	124.3	0.0	0
8	AG	156.5	0.0	0
9	AU	201.9	0.4	0
10	BG	205.0	0.0	0
11	AG	290.8	0.0	0
12	BU	307.7	59.2	1
13	AG	488.7	0.0	0
14	BU	509.4	21.0	0
15	AU	565.7	0.1	0
16	BG	572.5	0.0	0
17	AG	638.5	0.0	0
18	BU	647.3	36.5	1
19	BG	815.1	0.0	0
20	AU	815.5	11.4	0
21	AG	847.9	0.0	0
22	BU	855.5	18.7	0
23	BG	941.3	0.0	0
24	AU	987.7	209.9	6
25	BU	1016.8	2.8	0
26	AG	1016.9	0.0	0
27	AG	1096.8	0.0	0
28	BU	1097.4	22.2	0
29	BG	1112.1	0.0	0
30	AU	1113.0	0.2	0
31	AG	1257.1	0.0	0
32	BU	1269.0	427.5	13
33	BG	1286.1	0.0	0
34	AU	1286.3	0.1	0
35	BU	1379.1	89.6	2
36	AG	1384.1	0.0	0
37	AG	1420.9	0.0	0
38	BU	1421.0	17.8	0
39	BU	1453.7	87.1	2
40	AG	1457.1	0.0	0
41	BU	1460.6	66.7	2
42	AG	1475.9	0.0	0
43	BG	1494.3	0.0	0
44	AU	1494.3	15.5	0
45	AG	1503.3	0.0	0
46	BU	1503.6	37.0	1
47	AG	1709.3	0.0	0
48	BU	1756.3	741.9	22
49	AG	3037.6	0.0	0
50	BU	3037.8	23.4	0
51	BU	3043.1	53.1	1
52	AG	3043.2	0.0	0
53	BG	3063.1	0.0	0
54	AU	3063.1	5.4	0
55	AG	3107.3	0.0	0
56	BU	3107.3	56.0	1
57	BG	3114.4	0.0	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
58	AU	3114.4	46.1	1
59	AG	3158.4	0.0	0
60	BU	3248.8	3256.4	99

File: bp-propi-dc-c2h.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP) -537.045889188  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE -536.863577  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C6H4O4),X(H8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.634655	1.009620	0.000000
2	8	-1.634655	-0.214790	0.000000
3	8	-0.538845	1.744029	0.000000
4	1	0.275753	1.162137	0.000000
5	6	-2.897974	1.834448	0.000000
6	6	-4.178226	1.010623	0.000000
7	1	-2.846802	2.496113	0.868212
8	1	-2.846802	2.496113	-0.868212
9	1	-4.233108	0.368764	0.878091
10	1	-4.233108	0.368764	-0.878091
11	1	-5.048758	1.666284	0.000000
12	6	1.634655	-1.009620	0.000000
13	8	1.634655	0.214790	0.000000
14	8	0.538845	-1.744029	0.000000
15	1	-0.275753	-1.162137	0.000000
16	6	2.897974	-1.834448	0.000000
17	6	4.178226	-1.010623	0.000000
18	1	2.846802	-2.496113	-0.868212
19	1	2.846802	-2.496113	0.868212
20	1	4.233108	-0.368764	-0.878091
21	1	4.233108	-0.368764	0.878091
22	1	5.048758	-1.666284	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	33.1	0.3	0
2	BG	49.7	0.0	0
3	AU	51.2	3.5	0
4	AU	75.0	0.1	0
5	BG	103.0	0.0	0
6	BU	112.8	8.2	0
7	AG	128.4	0.0	0
8	AG	163.1	0.0	0
9	AU	202.8	0.5	0
10	BG	206.4	0.0	0
11	AG	296.3	0.0	0
12	BU	316.6	65.8	1
13	AG	491.3	0.0	0
14	BU	516.1	22.7	0
15	AU	569.3	0.0	0
16	BG	578.4	0.0	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
17	AG	641.0	0.0	0
18	BU	651.8	39.0	1
19	AU	817.3	12.0	0
20	BG	817.7	0.0	0
21	AG	850.1	0.0	0
22	BU	859.9	21.0	0
23	BG	967.2	0.0	0
24	AU	1007.0	159.1	4
25	AG	1016.6	0.0	0
26	BU	1016.7	1.9	0
27	AG	1098.7	0.0	0
28	BU	1099.2	18.5	0
29	BG	1115.4	0.0	0
30	AU	1115.8	0.3	0
31	AG	1268.3	0.0	0
32	BU	1279.7	388.7	10
33	BG	1288.5	0.0	0
34	AU	1288.6	0.1	0
35	BU	1385.9	107.8	2
36	AG	1387.6	0.0	0
37	AG	1424.1	0.0	0
38	BU	1424.2	14.7	0
39	AG	1460.4	0.0	0
40	BU	1461.0	31.0	0
41	BU	1468.7	97.2	2
42	AG	1495.6	0.0	0
43	BG	1495.7	0.0	0
44	AU	1495.7	13.9	0
45	BU	1505.5	40.5	1
46	AG	1506.6	0.0	0
47	AG	1704.5	0.0	0
48	BU	1757.5	673.0	18
49	AG	3037.5	0.0	0
50	BU	3039.1	23.2	0
51	BU	3045.8	64.8	1
52	AG	3045.9	0.0	0
53	AG	3057.3	0.0	0
54	BG	3062.4	0.0	0
55	AU	3062.4	5.7	0
56	BU	3108.2	78.3	2
57	AG	3108.3	0.0	0
58	BG	3114.2	0.0	0
59	AU	3114.2	44.6	1
60	BU	3164.8	3628.8	100

File: m-propi-dc-c2h.log  
 Rechenmethode: **RmpW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -536.746472204  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -536.563250  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C6H4O4),X(H8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.623815	1.054987	0.000000
2	8	-1.623815	-0.167884	0.000000
3	8	-0.521517	1.785448	0.000000
4	1	0.282408	1.200555	0.000000
5	6	-2.882296	1.887369	0.000000
6	6	-4.167863	1.066729	0.000000
7	1	-2.827486	2.548757	0.869909
8	1	-2.827486	2.548757	-0.869909
9	1	-4.225727	0.424654	0.879578
10	1	-4.225727	0.424654	-0.879578
11	1	-5.035825	1.728251	0.000000
12	6	1.623815	-1.054987	0.000000
13	8	1.623815	0.167884	0.000000
14	8	0.521517	-1.785448	0.000000
15	1	-0.282408	-1.200555	0.000000
16	6	2.882296	-1.887369	0.000000
17	6	4.167863	-1.066729	0.000000
18	1	2.827486	-2.548757	-0.869909
19	1	2.827486	-2.548757	0.869909
20	1	4.225727	-0.424654	-0.879578
21	1	4.225727	-0.424654	0.879578
22	1	5.035825	-1.728251	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	32.3	0.4	0
2	BG	46.9	0.0	0
3	AU	50.2	3.9	0
4	AU	75.3	0.0	0
5	BG	98.4	0.0	0
6	BU	107.7	8.1	0
7	AG	124.2	0.0	0
8	AG	158.2	0.0	0
9	AU	204.4	0.4	0
10	BG	207.3	0.0	0
11	AG	292.2	0.0	0
12	BU	309.3	57.7	1
13	AG	491.5	0.0	0
14	BU	511.5	20.4	0
15	AU	568.8	0.1	0
16	BG	575.7	0.0	0
17	AG	642.2	0.0	0
18	BU	650.3	38.8	1
19	BG	819.4	0.0	0
20	AU	819.6	10.8	0
21	AG	852.9	0.0	0
22	BU	859.9	18.1	0
23	BG	937.7	0.0	0
24	AU	984.6	214.1	6
25	BU	1021.6	2.8	0
26	AG	1021.7	0.0	0
27	AG	1103.2	0.0	0
28	BU	1103.8	22.6	0
29	BG	1119.4	0.0	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
30	AU	1120.3	0.4	0
31	AG	1265.1	0.0	0
32	BU	1276.8	432.1	13
33	BG	1293.3	0.0	0
34	AU	1293.4	0.2	0
35	BU	1386.7	84.6	2
36	AG	1393.1	0.0	0
37	AG	1429.4	0.0	0
38	BU	1429.5	18.0	0
39	BU	1461.8	91.3	2
40	AG	1465.2	0.0	0
41	BU	1469.1	68.8	2
42	AG	1483.5	0.0	0
43	BG	1501.8	0.0	0
44	AU	1501.8	15.5	0
45	AG	1511.1	0.0	0
46	BU	1511.4	39.3	1
47	AG	1723.0	0.0	0
48	BU	1769.4	755.2	23
49	AG	3049.6	0.0	0
50	BU	3049.8	24.0	0
51	BU	3054.4	49.3	1
52	AG	3054.5	0.0	0
53	BG	3074.6	0.0	0
54	AU	3074.6	5.4	0
55	BU	3117.8	55.4	1
56	AG	3117.8	0.0	0
57	BG	3124.5	0.0	0
58	AU	3124.5	47.5	1
59	AG	3210.8	0.0	0
60	BU	3297.0	3159.6	100

File: l-propi-dc-c2h.log  
 Rechenmethode: **RBLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB-LYP): -536.833226808  
 E(RB-LYP)+ZPE: -536.656813  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C6H4O4),X(H8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.651255	1.043110	0.000000
2	8	-1.651255	-0.195543	0.000000
3	8	-0.535854	1.787324	0.000000
4	1	0.279421	1.188968	0.000000
5	6	-2.920434	1.883614	0.000000
6	6	-4.221755	1.064617	0.000000
7	1	-2.865561	2.550994	0.875299
8	1	-2.865561	2.550994	-0.875299
9	1	-4.286220	0.419037	0.885811
10	1	-4.286220	0.419037	-0.885811
11	1	-5.090498	1.737669	0.000000
12	6	1.651255	-1.043110	0.000000
13	8	1.651255	0.195543	0.000000

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
14	8	0.535854	-1.787324	0.000000
15	1	-0.279421	-1.188968	0.000000
16	6	2.920434	-1.883614	0.000000
17	6	4.221755	-1.064617	0.000000
18	1	2.865561	-2.550994	-0.875299
19	1	2.865561	-2.550994	0.875299
20	1	4.286220	-0.419037	-0.885811
21	1	4.286220	-0.419037	0.885811
22	1	5.090498	-1.737669	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	29.7	0.2	0
2	BG	39.6	0.0	0
3	AU	48.7	3.8	0
4	AU	70.3	0.0	0
5	BG	96.5	0.0	0
6	BU	105.3	8.2	0
7	AG	122.9	0.0	0
8	AG	151.3	0.0	0
9	AU	195.5	0.3	0
10	BG	198.6	0.0	0
11	AG	283.9	0.0	0
12	BU	300.2	59.4	1
13	AG	472.1	0.0	0
14	BU	492.9	21.3	0
15	AU	547.0	0.3	0
16	BG	553.4	0.0	0
17	AG	613.6	0.0	0
18	BU	624.0	27.8	0
19	BG	791.0	0.0	0
20	AU	791.6	10.7	0
21	AG	812.4	0.0	0
22	BU	820.5	16.8	0
23	BG	917.6	0.0	0
24	AU	961.3	184.7	5
25	BU	983.8	2.0	0
26	AG	984.2	0.0	0
27	AG	1059.5	0.0	0
28	BU	1060.5	26.2	0
29	BG	1078.7	0.0	0
30	AU	1079.7	0.0	0
31	AG	1193.5	0.0	0
32	BU	1210.9	467.0	13
33	BG	1251.3	0.0	0
34	AU	1251.4	0.0	0
35	BU	1332.2	68.5	2
36	AG	1332.5	0.0	0
37	AG	1382.6	0.0	0
38	BU	1382.6	15.7	0
39	BU	1401.6	49.8	1
40	AG	1415.8	0.0	0
41	BU	1422.9	48.5	1
42	AG	1429.4	0.0	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
43	BG	1459.0	0.0	0
44	AU	1459.0	14.4	0
45	AG	1467.1	0.0	0
46	BU	1467.3	22.8	0
47	AG	1625.1	0.0	0
48	BU	1669.4	659.5	19
49	AG	2957.9	0.0	0
50	BU	2959.9	25.2	0
51	BU	2970.7	77.7	2
52	AG	2970.7	0.0	0
53	AG	2973.1	0.0	0
54	BG	2981.1	0.0	0
55	AU	2981.1	7.0	0
56	BU	3029.5	89.7	2
57	AG	3029.7	0.0	0
58	BG	3036.7	0.0	0
59	AU	3036.7	50.2	1
60	BU	3069.6	3352.6	100

File: mp-propi-dc-cl.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -533.870197690  
 E(MP2): -535.5530501  
 E(MP2)+ZPE: -535.368125  
 Dipolmomente: X=0.0017 Y=-0.0005 Z=0.0045 Gesamt=0.0048  
 Framework: Cl[X(C6H12O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.909073	0.328989	0.040964
2	8	1.421586	-0.795989	0.096434
3	8	1.193272	1.443908	-0.043076
4	1	0.231612	1.205034	-0.044326
5	6	3.393566	0.591515	0.080372
6	6	4.228294	-0.672366	-0.091154
7	1	3.618214	1.337283	-0.688203
8	1	3.600188	1.075201	1.042409
9	1	4.030234	-1.140758	-1.058105
10	1	3.993423	-1.401394	0.686694
11	1	5.292756	-0.430947	-0.035586
12	6	-1.909085	-0.329013	-0.041564
13	8	-1.421682	0.795797	-0.101187
14	8	-1.193351	-1.443703	0.045728
15	1	-0.231502	-1.205401	0.044508
16	6	-3.393627	-0.591591	-0.079272
17	6	-4.228088	0.672464	0.092298
18	1	-3.617561	-1.336936	0.689903
19	1	-3.601208	-1.075739	-1.040881
20	1	-4.029060	1.141405	1.058794
21	1	-3.993868	1.401012	-0.686190
22	1	-5.292633	0.431143	0.037918

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	20.9	0.9	0
2	28.6	1.8	0
3	35.9	0.0	0
4	53.1	0.8	0
5	79.9	0.0	0
6	107.8	8.2	0
7	123.9	0.0	0
8	149.8	0.0	0
9	228.4	0.1	0
10	231.3	0.0	0
11	293.6	0.0	0
12	306.6	50.2	1
13	487.9	0.0	0
14	506.9	17.8	0
15	567.3	3.5	0
16	568.9	0.0	0
17	647.2	0.0	0
18	656.2	39.2	1
19	815.7	0.0	0
20	818.1	7.0	0
21	864.1	0.0	0
22	867.4	15.7	0
23	868.7	0.1	0
24	924.2	205.8	7
25	1034.7	4.0	0
26	1035.1	0.0	0
27	1119.1	0.0	0
28	1119.5	20.2	0
29	1120.8	0.0	0
30	1122.2	0.4	0
31	1266.7	0.0	0
32	1278.8	391.3	13
33	1295.7	0.0	0
34	1296.0	9.8	0
35	1392.3	100.4	3
36	1398.4	0.0	0
37	1433.9	16.9	0
38	1434.5	0.0	0
39	1470.4	66.4	2
40	1473.4	0.0	0
41	1480.7	84.1	2
42	1495.6	0.0	0
43	1515.1	11.2	0
44	1515.1	3.4	0
45	1522.3	0.0	0
46	1522.7	37.5	1
47	1740.9	0.0	0
48	1781.0	639.3	22
49	3088.8	37.7	1
50	3088.9	0.3	0
51	3091.2	0.9	0
52	3091.3	19.1	0
53	3142.5	1.6	0
54	3142.6	2.5	0

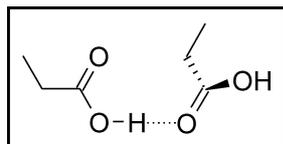
Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
55	3176.9	31.2	1
56	3177.0	12.1	0
57	3186.7	8.3	0
58	3186.7	25.1	0
59	3300.3	0.1	0
60	3382.8	2856.4	100

File: h-propi-dc-c2h.log  
 Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -533.877534367  
 E(RHF)+ZPE: -533.681936  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C6H4O4),X(H8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.625729	1.134598	0.000000
2	8	-1.625729	-0.062281	0.000000
3	8	-0.530367	1.849832	0.000000
4	1	0.245751	1.286474	0.000000
5	6	-2.870651	1.981418	0.000000
6	6	-4.163393	1.177054	0.000000
7	1	-2.807578	2.633692	0.866508
8	1	-2.807578	2.633692	-0.866508
9	1	-4.229291	0.541450	0.875470
10	1	-4.229291	0.541450	-0.875470
11	1	-5.015692	1.848791	0.000000
12	6	1.625729	-1.134598	0.000000
13	8	1.625729	0.062281	0.000000
14	8	0.530367	-1.849832	0.000000
15	1	-0.245751	-1.286474	0.000000
16	6	2.870651	-1.981418	0.000000
17	6	4.163393	-1.177054	0.000000
18	1	2.807578	-2.633692	-0.866508
19	1	2.807578	-2.633692	0.866508
20	1	4.229291	-0.541450	-0.875470
21	1	4.229291	-0.541450	0.875470
22	1	5.015692	-1.848791	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	32.0	0.5	0
2	AU	49.3	4.5	0
3	BG	55.7	0.0	0
4	AU	82.8	0.1	0
5	BG	95.1	0.0	0
6	BU	95.2	7.6	0
7	AG	115.2	0.0	0
8	AG	144.8	0.0	0
9	AU	237.3	0.4	0
10	BG	239.0	0.0	0
11	AG	298.8	0.0	0
12	BU	306.3	39.6	2
13	AG	519.1	0.0	0
14	BU	529.7	18.5	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
15	AU	609.8	0.1	0
16	BG	617.7	0.0	0
17	AG	686.2	0.0	0
18	BU	688.4	67.1	3
19	AU	877.3	0.4	0
20	BG	878.4	0.0	0
21	BG	904.2	0.0	0
22	AG	906.8	0.0	0
23	BU	910.0	19.2	1
24	AU	956.9	299.5	15
25	BU	1079.7	3.1	0
26	AG	1079.9	0.0	0
27	AG	1182.7	0.0	0
28	BU	1183.3	30.4	1
29	BG	1213.1	0.0	0
30	AU	1213.7	5.0	0
31	AG	1361.6	0.0	0
32	BU	1370.1	523.3	27
33	BG	1393.5	0.0	0
34	AU	1393.7	0.6	0
35	BU	1473.3	25.9	1
36	AG	1495.0	0.0	0
37	BU	1539.7	45.3	2
38	AG	1540.5	0.0	0
39	AG	1574.3	0.0	0
40	BU	1574.9	90.6	4
41	BU	1587.6	85.8	4
42	AG	1589.9	0.0	0
43	BG	1610.0	0.0	0
44	AU	1610.0	12.4	0
45	AG	1620.9	0.0	0
46	BU	1621.7	63.8	3
47	AG	1914.3	0.0	0
48	BU	1950.4	972.2	51
49	BU	3177.7	72.1	3
50	AG	3177.8	0.0	0
51	AG	3188.8	0.0	0
52	BU	3188.9	12.2	0
53	BG	3216.1	0.0	0
54	AU	3216.1	6.6	0
55	BU	3241.1	75.3	3
56	AG	3241.1	0.0	0
57	BG	3254.7	0.0	0
58	AU	3254.8	79.2	4
59	AG	3825.4	0.0	0
60	BU	3865.6	1896.7	100

Übergangszustand (aus 2 C<sub>s</sub> Monomeren) **9d**

File: b-propi-rts-C1.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -536.989233282  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -536.807910  
 Dipolmomente: X=0.7385 Y=-0.0709 Z=-0.4024 Gesamt=0.8440  
 Framework: C1[X(C6H12O4)]  
 Imaginäre Freq.: **-37.4 cm<sup>-1</sup>**

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.108267	0.565348	0.168064
2	8	1.516388	0.161224	1.147511
3	8	2.194389	1.874781	-0.125871
4	1	1.659808	2.358941	0.521700
5	6	2.816212	-0.290324	-0.849741
6	6	2.895410	-1.764790	-0.464311
7	1	2.272738	-0.154134	-1.791714
8	1	3.807864	0.141610	-1.016702
9	1	1.899836	-2.189956	-0.327330
10	1	3.446475	-1.901924	0.468318
11	1	3.404026	-2.330096	-1.248232
12	6	-1.786048	-0.076033	0.263491
13	8	-1.176518	0.471059	-0.628899
14	8	-1.204698	-0.501368	1.399052
15	1	-0.247887	-0.292609	1.362952
16	6	-3.271198	-0.368271	0.253967
17	6	-3.980222	0.102004	-1.012745
18	1	-3.699254	0.096090	1.148779
19	1	-3.390254	-1.446862	0.402810
20	1	-3.876035	1.180609	-1.145740
21	1	-3.563000	-0.378435	-1.899853
22	1	-5.045329	-0.136416	-0.961677

File: bp-propi-rts-cl.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -537.030022166  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -536.848504  
 Dipolmomente: X=0.6489 Y=0.0386 Z=-0.4093 Gesamt=0.7682  
 Framework: C1[X(C6H12O4)]  
 Imaginäre Freq.: **-43.5 cm<sup>-1</sup>**

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.037549	0.557806	0.211269
2	8	1.536553	0.059297	1.196868
3	8	2.037214	1.882012	-0.000495
4	1	1.513745	2.289754	0.705302
5	6	2.712045	-0.193438	-0.903659
6	6	2.921491	-1.671800	-0.605113

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
7	1	2.079002	-0.052902	-1.784380
8	1	3.651161	0.314233	-1.132115
9	1	1.974607	-2.166921	-0.396787
10	1	3.564901	-1.812158	0.262847
11	1	3.386351	-2.165885	-1.457706
12	6	-1.731481	-0.114450	0.268187
13	8	-1.127803	0.552188	-0.541658
14	8	-1.154100	-0.669830	1.344131
15	1	-0.201577	-0.437119	1.344534
16	6	-3.209267	-0.426289	0.204104
17	6	-3.909489	0.184366	-1.001875
18	1	-3.654277	-0.083092	1.141365
19	1	-3.312219	-1.514165	0.218163
20	1	-3.817730	1.269696	-1.000660
21	1	-3.474669	-0.177347	-1.932718
22	1	-4.969298	-0.070596	-0.996097

File: m-propi-rts-cl.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -536.731815573  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -536.549482  
 Dipolmomente: X=0.5263 Y=-0.0486 Z=-0.5177 Gesamt=0.7398  
 Framework: C1[X(C6H12O4)]  
 Imaginäre Freq.: **-42.8 cm<sup>-1</sup>**

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.045407	0.560204	0.198501
2	8	1.517058	0.081177	1.178967
3	8	2.057466	1.881076	-0.034161
4	1	1.520263	2.308961	0.647398
5	6	2.744962	-0.212244	-0.887630
6	6	2.914863	-1.694838	-0.571745
7	1	2.148085	-0.064599	-1.793661
8	1	3.703445	0.276563	-1.081406
9	1	1.949790	-2.174019	-0.405399
10	1	3.517176	-1.841817	0.325888
11	1	3.409767	-2.200363	-1.402402
12	6	-1.742439	-0.105567	0.279231
13	8	-1.116605	0.516094	-0.548989
14	8	-1.185843	-0.618927	1.387351
15	1	-0.231289	-0.404702	1.391871
16	6	-3.223601	-0.402013	0.208479
17	6	-3.899416	0.157440	-1.039123
18	1	-3.677041	-0.005044	1.121744
19	1	-3.340444	-1.487823	0.275059
20	1	-3.794015	1.241793	-1.091041
21	1	-3.457257	-0.257495	-1.945778
22	1	-4.963753	-0.084707	-1.033895

File: l-propi-rtS-C1.log  
 Rechenmethode: **RBLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB-LYP): -536.819003216  
 E(RB-LYP)+ZPE: -536.643378  
 Dipolmomente: X=-1.0282 Y=0.1520 Z=-0.2673 Gesamt=1.0732  
 Framework: C1[X(C6H12O4)]  
 Imaginäre Freq.: **-31.1 cm<sup>-1</sup>**

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-2.216171	-0.565387	0.148545
2	8	-1.525973	-0.226528	1.102240
3	8	-2.397856	-1.877502	-0.185963
4	1	-1.844340	-2.408910	0.423864
5	6	-2.959526	0.363581	-0.795056
6	6	-2.912858	1.842835	-0.377755
7	1	-2.512916	0.216984	-1.792502
8	1	-3.994364	-0.003535	-0.880111
9	1	-1.879276	2.208813	-0.328375
10	1	-3.369363	1.994007	0.609667
11	1	-3.460142	2.455696	-1.107050
12	6	1.870761	0.040709	0.234434
13	8	1.289396	-0.464075	-0.715768
14	8	1.239727	0.412472	1.386807
15	1	0.276568	0.199591	1.299229
16	6	3.366355	0.338176	0.302241
17	6	4.135185	-0.051917	-0.970905
18	1	3.764897	-0.184560	1.186755
19	1	3.478192	1.411569	0.525046
20	1	4.042082	-1.126370	-1.177876
21	1	3.751582	0.486855	-1.847609
22	1	5.202252	0.186938	-0.858587

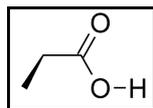
File: mp-propi-rtS-C1.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -533.859746459  
 E(MP2): -535.5415180  
 E(MP2)+ZPE: -535.357351  
 Dipolmomente: X=0.0411 Y=-0.2416 Z=1.0143 Gesamt=1.0435  
 Framework: C1[X(C6H12O4)]  
 Imaginäre Freq.: **-50.0 cm<sup>-1</sup>**

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.958398	0.536433	-0.258598
2	8	-1.536783	-0.087277	-1.216209
3	8	-1.884267	1.874868	-0.169502
4	1	-1.347197	2.170745	-0.919185
5	6	-2.602377	-0.070364	0.958648
6	6	-2.855871	-1.565608	0.807948
7	1	-1.925287	0.138638	1.795264
8	1	-3.523869	0.483837	1.164352
9	1	-1.922595	-2.098494	0.613615
10	1	-3.534667	-1.765103	-0.024482
11	1	-3.300883	-1.966126	1.722124

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
12	6	1.672405	-0.157576	-0.316391
13	8	1.047756	0.709314	0.265449
14	8	1.141839	-0.936439	-1.278419
15	1	0.208640	-0.667784	-1.383771
16	6	3.122228	-0.498326	-0.063970
17	6	3.737447	0.338753	1.051058
18	1	3.657035	-0.362584	-1.010462
19	1	3.172989	-1.569196	0.160143
20	1	3.689294	1.402692	0.809502
21	1	3.201244	0.188005	1.990614
22	1	4.784328	0.061777	1.199563

File: h-propi-rtis-C1.log  
 Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -533.866532918  
 E(RHF)+ZPE: -533.672096  
 Dipolmomente: X=0.3775 Y=-0.1290 Z=-0.4571 Gesamt=0.6067  
 Framework: C1[X(C6H12O4)]  
 Imaginäre Freq.: **-35.4 cm<sup>-1</sup>**

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.107830	0.569842	0.170390
2	8	1.558697	0.163990	1.146144
3	8	2.138379	1.853178	-0.136906
4	1	1.611211	2.335333	0.483413
5	6	2.838174	-0.272297	-0.838359
6	6	2.887026	-1.751222	-0.479898
7	1	2.339225	-0.110654	-1.789661
8	1	3.834544	0.146663	-0.945607
9	1	1.889488	-2.167982	-0.404895
10	1	3.386448	-1.909302	0.469235
11	1	3.427756	-2.297462	-1.245681
12	6	-1.788837	-0.081089	0.280462
13	8	-1.172057	0.459572	-0.579673
14	8	-1.238631	-0.503612	1.403410
15	1	-0.304981	-0.312368	1.403600
16	6	-3.268073	-0.369152	0.236644
17	6	-3.945991	0.104875	-1.041594
18	1	-3.708978	0.094150	1.114922
19	1	-3.387882	-1.440066	0.375461
20	1	-3.839292	1.176289	-1.167014
21	1	-3.514690	-0.373146	-1.913656
22	1	-5.004721	-0.132212	-1.009784

Monomer (C<sub>1</sub>) **9e**

File: b-propi-mo.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -268.488205494  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -268.397797  
 Dipolmomente: X=1.3131 Y=1.2468 Z=0.4276 Gesamt=1.8605  
 Framework: C1[X(C3H6O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-0.616632	-0.136881	0.077078
2	8	-0.910205	1.190450	0.089478
3	1	-1.811042	1.286218	-0.254529
4	8	-1.407134	-0.964648	-0.302307
5	6	0.784040	-0.406429	0.571569
6	1	0.895381	0.062924	1.553617
7	1	0.878186	-1.485668	0.693774
8	6	1.860739	0.132855	-0.385437
9	1	2.855015	-0.099798	0.002011
10	1	1.770431	-0.322944	-1.374524
11	1	1.781853	1.215587	-0.496973

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	32.1	0.4	0
2	223.7	0.1	0
3	244.0	0.2	0
4	435.7	3.8	1
5	564.5	40.4	11
6	608.4	88.3	24
7	736.2	33.1	9
8	807.6	3.1	0
9	823.5	10.7	2
10	988.9	22.4	6
11	1057.1	120.2	32
12	1096.1	7.2	1
13	1201.3	145.1	39
14	1276.0	3.7	1
15	1334.6	18.8	5
16	1361.5	33.0	9
17	1414.8	5.7	1
18	1481.0	5.8	1
19	1500.8	8.4	2
20	1509.6	12.7	3
21	1811.5	364.9	100
22	3037.7	20.1	5
23	3049.5	11.4	3
24	3099.7	13.7	3
25	3105.8	12.3	3
26	3123.7	24.9	6
27	3759.7	64.6	17

File: bp-propi-mo.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -268.508085847  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -268.417603  
 Dipolmomente: X=1.1664 Y=1.2882 Z=0.3842 Gesamt=1.7798  
 Framework: C1[X(C3H6O2)]

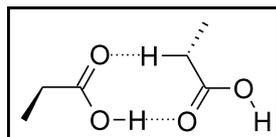
Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-0.612581	-0.136788	0.082088
2	8	-1.374911	-0.988043	-0.296503
3	8	-0.937676	1.181125	0.074277
4	1	-1.834788	1.243769	-0.285303
5	6	0.787391	-0.365581	0.592592
6	1	0.897727	0.159002	1.543222
7	1	0.891953	-1.433105	0.773124
8	6	1.853562	0.126558	-0.395906
9	1	1.759228	1.196750	-0.573605
10	1	2.849920	-0.067117	0.000276
11	1	1.766427	-0.389092	-1.352539

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	29.0	0.4	0
2	227.2	0.1	0
3	243.8	0.2	0
4	434.4	3.4	1
5	565.1	38.3	12
6	612.7	77.3	24
7	743.4	31.4	10
8	809.5	2.6	0
9	824.5	10.3	3
10	989.0	17.2	5
11	1056.4	115.5	37
12	1097.4	6.7	2
13	1202.1	137.2	43
14	1278.7	3.2	1
15	1336.2	10.2	3
16	1368.3	36.4	11
17	1417.9	5.9	1
18	1483.7	5.0	1
19	1502.4	7.3	2
20	1511.5	11.0	3
21	1819.5	312.1	100
22	3040.5	18.8	6
23	3052.3	12.1	3
24	3099.8	9.4	3
25	3106.2	15.9	5
26	3123.4	24.8	7
27	3742.7	57.1	18

File: m-propi-mo.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP) -268.358578099  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE -268.267699  
 Dipolmomente: X=1.3390 Y=1.2379 Z=0.4423 Gesamt=1.8764  
 Framework: C1[X(C3H6O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-0.617334	-0.136320	0.075141
2	8	-0.895059	1.191689	0.096394
3	1	-1.795093	1.302380	-0.240415
4	8	-1.417862	-0.951621	-0.304354
5	6	0.781199	-0.424882	0.561607
6	1	0.893350	0.018475	1.554470
7	1	0.870505	-1.506174	0.655928
8	6	1.858635	0.135792	-0.380521
9	1	2.851378	-0.107731	0.001022
10	1	1.767608	-0.294999	-1.379624
11	1	1.780617	1.219973	-0.465059

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	34.6	0.4	0
2	223.2	0.1	0
3	246.5	0.2	0
4	439.1	3.8	1
5	567.8	41.9	11
6	609.8	89.2	23
7	738.9	33.8	9
8	812.7	3.5	0
9	828.9	10.4	2
10	994.3	21.0	5
11	1065.3	116.6	31
12	1103.6	7.7	2
13	1211.2	148.6	39
14	1283.9	4.0	1
15	1343.2	19.7	5
16	1371.3	33.6	8
17	1423.4	5.8	1
18	1489.0	5.7	1
19	1508.3	8.4	2
20	1517.3	13.2	3
21	1824.5	373.9	100
22	3049.1	20.3	5
23	3060.5	11.5	3
24	3109.9	15.5	4
25	3116.6	11.1	2
26	3134.7	24.8	6
27	3783.6	69.5	18

Offenes Dimer ( $C_1$ , aus 2  $C_1$ -Monomeren) **9f**

File: b-propil-dl.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -536.989616223  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -536.807130  
 Dipolmomente: X=-1.3260 Y=-0.4077 Z=-0.2160 Gesamt=1.4039  
 Framework: C1[X(C6H12O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-2.239667	-0.644307	0.151177
2	8	-3.458079	-1.210202	0.265585
3	1	-3.387904	-2.122499	-0.055880
4	8	-1.296996	-1.278790	-0.282289
5	6	-2.219381	0.797662	0.575539
6	1	-2.796227	0.892790	1.499033
7	1	-1.181154	1.070336	0.766242
8	6	-2.821763	1.710883	-0.510210
9	1	-2.775923	2.749896	-0.178553
10	1	-2.258761	1.633152	-1.443148
11	1	-3.865539	1.460557	-0.710713
12	6	1.873102	0.343580	-0.105317
13	8	1.420873	-0.809328	-0.617764
14	1	0.451327	-0.889515	-0.464964
15	8	1.157727	1.152656	0.448565
16	6	3.365062	0.508675	-0.295730
17	1	3.573817	0.458257	-1.369248
18	1	3.627228	1.507149	0.055463
19	6	4.183397	-0.565758	0.437911
20	1	5.251485	-0.401236	0.277221
21	1	3.997437	-0.533792	1.514676
22	1	3.931517	-1.564196	0.076879

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	13.0	0.9	0
2	21.6	0.2	0
3	30.9	0.8	0
4	43.8	1.9	0
5	77.0	2.2	0
6	92.0	2.0	0
7	110.7	0.2	0
8	131.3	9.9	0
9	216.3	0.1	0
10	225.5	1.0	0
11	239.1	0.2	0
12	266.5	3.1	0
13	442.9	2.0	0
14	454.3	20.5	1
15	581.5	39.9	3
16	590.4	21.4	1

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
17	627.4	90.5	8
18	721.5	3.8	0
19	758.1	34.6	3
20	809.1	0.5	0
21	819.2	0.6	0
22	833.4	9.4	0
23	839.8	18.7	1
24	888.8	103.1	9
25	992.3	4.2	0
26	996.7	7.5	0
27	1072.3	94.1	8
28	1076.7	74.7	6
29	1097.0	29.8	2
30	1100.1	9.4	0
31	1215.8	167.9	15
32	1244.8	144.0	13
33	1281.1	4.6	0
34	1297.8	90.8	8
35	1345.0	1.2	0
36	1360.7	26.8	2
37	1373.2	77.3	7
38	1399.2	1.9	0
39	1415.6	22.5	2
40	1422.6	9.5	0
41	1480.3	5.6	0
42	1492.9	1.8	0
43	1499.9	8.6	0
44	1500.8	8.9	0
45	1509.8	22.3	2
46	1510.3	6.6	0
47	1759.6	99.4	9
48	1785.6	765.4	70
49	3035.1	25.3	2
50	3038.8	20.4	1
51	3043.1	14.8	1
52	3057.1	15.0	1
53	3095.2	24.4	2
54	3102.3	9.1	0
55	3102.9	25.6	2
56	3110.3	18.1	1
57	3121.7	29.6	2
58	3128.2	1.8	0
59	3453.4	1092.0	100
60	3750.0	70.1	6

File: bp-propi-dl.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -537.030214964  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -536.847610  
 Dipolmomente: X=-1.4449 Y=-0.5003 Z=-0.2732 Gesamt=1.5533  
 Framework: C1[X(C6H12O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-2.250551	-0.630591	0.152458
2	8	-3.461066	-1.193881	0.321147
3	1	-3.405912	-2.100620	-0.017325
4	8	-1.334235	-1.258342	-0.338992
5	6	-2.202130	0.804783	0.586697
6	1	-2.872542	0.940262	1.434573
7	1	-1.179264	1.023514	0.887034
8	6	-2.615548	1.736633	-0.565304
9	1	-2.555153	2.773027	-0.236536
10	1	-1.948763	1.616062	-1.418486
11	1	-3.636913	1.540366	-0.891179
12	6	1.838654	0.334438	-0.085942
13	8	1.355644	-0.755017	-0.692567
14	1	0.388256	-0.836306	-0.523760
15	8	1.155322	1.105332	0.552525
16	6	3.330348	0.481318	-0.279730
17	1	3.539550	0.447008	-1.350830
18	1	3.610814	1.463834	0.093746
19	6	4.124452	-0.620768	0.433016
20	1	5.193496	-0.480283	0.273472
21	1	3.940890	-0.601604	1.507893
22	1	3.848872	-1.604881	0.057317

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	10.4	0.5	0
2	20.7	0.5	0
3	27.3	0.4	0
4	39.8	2.4	0
5	74.7	1.6	0
6	96.4	2.4	0
7	110.4	0.1	0
8	135.3	11.3	0
9	218.1	0.1	0
10	225.6	1.4	0
11	238.7	0.4	0
12	264.6	2.8	0
13	442.1	1.8	0
14	454.6	22.4	1
15	584.6	37.7	3
16	593.7	20.4	1
17	636.5	80.3	7
18	730.4	3.2	0
19	771.0	33.2	2
20	810.5	0.5	0
21	820.4	0.4	0
22	835.6	8.0	0
23	841.7	22.4	1
24	888.3	78.4	6
25	991.6	2.3	0
26	995.9	4.7	0
27	1077.7	25.8	2
28	1078.5	130.5	11
29	1097.6	31.8	2

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
30	1100.6	9.1	0
31	1215.2	161.5	14
32	1248.3	142.6	12
33	1286.1	3.2	0
34	1298.9	83.6	7
35	1345.1	1.3	0
36	1356.3	12.4	1
37	1384.2	75.8	6
38	1405.1	0.5	0
39	1418.9	28.6	2
40	1430.3	10.4	0
41	1483.0	4.8	0
42	1494.4	1.1	0
43	1501.4	7.2	0
44	1502.2	8.7	0
45	1511.3	16.7	1
46	1512.8	9.0	0
47	1763.3	104.2	9
48	1790.2	668.7	58
49	3037.6	24.3	2
50	3041.3	20.7	1
51	3046.8	14.6	1
52	3064.7	19.5	1
53	3095.7	19.5	1
54	3102.0	30.2	2
55	3102.3	4.8	0
56	3112.6	17.4	1
57	3121.1	30.3	2
58	3127.9	2.6	0
59	3410.7	1136.5	100
60	3731.5	62.7	5

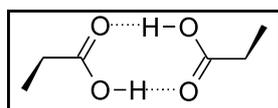
File: m-propi-dl.log  
 Rechenmethode: **RmpW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmpW+HF-LYP): -536.732185991  
 E(RmpW+HF-LYP)+ZPE: -536.548735  
 Dipolmomente: X=-1.2800 Y=-0.3899 Z=-0.2036 Gesamt=1.3535  
 Framework: C1[X(C6H12O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-2.236081	-0.643124	0.152529
2	8	-3.458689	-1.197380	0.248631
3	1	-3.396439	-2.106300	-0.078965
4	8	-1.295886	-1.281600	-0.275508
5	6	-2.207273	0.794830	0.586850
6	1	-2.803329	0.891601	1.496439
7	1	-1.171388	1.055328	0.798753
8	6	-2.774707	1.717664	-0.508413
9	1	-2.727297	2.753819	-0.171706
10	1	-2.189793	1.637962	-1.426421
11	1	-3.814593	1.477440	-0.734723
12	6	1.859161	0.338970	-0.106862
13	8	1.417204	-0.823608	-0.599993

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
14	1	0.448854	-0.906638	-0.454293
15	8	1.136377	1.152201	0.427274
16	6	3.349705	0.510719	-0.292122
17	1	3.559668	0.466852	-1.364688
18	1	3.606920	1.507367	0.064392
19	6	4.169024	-0.565170	0.436129
20	1	5.235900	-0.396705	0.279033
21	1	3.980331	-0.540133	1.511614
22	1	3.920148	-1.560837	0.068664

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	14.0	0.8	0
2	22.0	0.5	0
3	29.8	0.4	0
4	42.9	2.1	0
5	78.0	1.7	0
6	95.5	2.8	0
7	111.9	0.1	0
8	133.7	9.4	0
9	217.0	0.1	0
10	226.5	0.9	0
11	240.1	0.2	0
12	269.8	3.4	0
13	445.3	2.1	0
14	457.9	20.9	1
15	585.2	42.7	3
16	593.7	21.1	1
17	629.4	91.6	8
18	723.8	4.0	0
19	763.8	34.8	3
20	813.7	0.5	0
21	823.8	0.6	0
22	838.7	8.7	0
23	845.5	18.5	1
24	891.7	104.9	9
25	997.2	3.8	0
26	1002.1	7.4	0
27	1080.1	87.4	7
28	1084.0	73.6	6
29	1104.2	32.7	2
30	1107.8	9.7	0
31	1225.1	170.1	15
32	1254.7	137.4	12
33	1288.9	4.9	0
34	1306.6	98.0	8
35	1354.0	1.4	0
36	1369.0	26.0	2
37	1383.0	82.7	7
38	1408.7	2.0	0
39	1423.7	23.7	2
40	1432.0	10.2	0
41	1488.1	5.6	0
42	1500.5	1.6	0

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
43	1507.6	8.4	0
44	1508.3	9.1	0
45	1517.5	23.7	2
46	1518.1	6.0	0
47	1771.5	96.3	8
48	1797.8	786.0	71
49	3046.4	24.4	2
50	3049.7	20.4	1
51	3053.9	15.0	1
52	3070.0	15.3	1
53	3105.3	26.2	2
54	3113.2	34.5	3
55	3113.3	0.5	0
56	3120.8	18.5	1
57	3132.6	29.9	2
58	3141.6	1.8	0
59	3481.4	1096.6	100
60	3773.4	74.3	6

Cyclisches Dimer ( $C_2$ , aus 2  $C_1$ -Monomeren) **9g**

File: b-propi-dc-c2.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -537.001606787  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -536.818732  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.1623 Gesamt=0.1623  
 Framework: C2[X(C6H12O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.984767	1.664282	-0.253856
2	8	-0.240770	1.617525	-0.245480
3	8	1.755576	0.589251	-0.261248
4	1	1.198756	-0.240093	-0.256177
5	6	1.755576	2.961924	-0.265168
6	6	2.759492	3.084458	0.891053
7	1	2.288863	3.012015	-1.220829
8	1	1.026484	3.772203	-0.246000
9	1	3.495903	2.280400	0.858399
10	1	2.252268	3.045268	1.858454
11	1	3.287430	4.038509	0.827806
12	6	-0.984767	-1.664282	-0.253856
13	8	0.240770	-1.617525	-0.245480
14	8	-1.755576	-0.589251	-0.261248
15	1	-1.198756	0.240093	-0.256177
16	6	-1.755576	-2.961924	-0.265168
17	6	-2.759492	-3.084458	0.891053
18	1	-1.026484	-3.772203	-0.246000
19	1	-2.288863	-3.012015	-1.220829
20	1	-2.252268	-3.045268	1.858454
21	1	-3.495903	-2.280400	0.858399
22	1	-3.287430	-4.038509	0.827806

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	B	25.0	0.1	0
2	A	25.6	1.1	0
3	A	51.2	1.2	0
4	A	73.6	0.5	0
5	B	93.4	1.2	0
6	A	138.0	0.2	0
7	B	145.1	17.8	0
8	A	165.8	0.0	0
9	A	231.0	0.1	0
10	B	235.0	2.0	0
11	A	272.5	0.8	0
12	B	286.4	10.6	0
13	A	458.3	0.2	0
14	B	488.4	64.0	1
15	A	602.0	0.0	0
16	B	603.8	28.8	0
17	A	714.1	0.3	0
18	B	721.5	4.9	0
19	A	813.3	1.1	0
20	B	814.3	1.2	0
21	A	852.4	0.2	0
22	B	858.7	21.8	0
23	B	955.4	0.0	0
24	A	996.4	153.4	4
25	B	1003.5	8.0	0
26	A	1007.4	52.8	1
27	A	1085.8	0.0	0
28	B	1086.6	51.1	1
29	A	1106.2	0.0	0
30	B	1106.6	22.9	0
31	A	1265.6	0.0	0
32	B	1270.0	65.4	1
33	A	1326.4	1.2	0
34	B	1333.4	289.3	8
35	A	1352.4	0.4	0
36	B	1352.9	58.3	1
37	B	1411.8	0.4	0
38	A	1414.9	2.3	0
39	B	1450.6	72.8	2
40	A	1471.6	0.3	0
41	B	1477.7	9.3	0
42	A	1477.7	6.5	0
43	B	1501.4	15.9	0
44	A	1501.9	3.3	0
45	A	1509.9	2.3	0
46	B	1510.6	37.7	1
47	A	1703.8	0.1	0
48	B	1753.3	890.6	26
49	B	3037.2	19.4	0
50	A	3037.3	2.3	0
51	B	3040.6	14.9	0
52	A	3040.7	40.7	1
53	B	3098.9	36.7	1

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
54	A	3098.9	15.0	0
55	A	3106.3	1.9	0
56	B	3106.5	7.6	0
57	A	3122.9	1.4	0
58	B	3125.7	54.7	1
59	A	3130.9	1.0	0
60	B	3223.7	3394.1	100

File: bp-propi-dc-c2.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -537.043423831  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -536.860510  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.1310 Gesamt=0.1310  
 Framework: C2[X(C6H12O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.948881	1.666196	-0.252242
2	8	-0.276071	1.625337	-0.240157
3	8	1.717075	0.595045	-0.263599
4	1	1.162265	-0.240772	-0.254958
5	6	1.717075	2.963909	-0.264004
6	6	2.722915	3.084643	0.886038
7	1	2.246634	3.016384	-1.218794
8	1	0.989783	3.772286	-0.240905
9	1	3.453787	2.279081	0.852031
10	1	2.219926	3.048062	1.852909
11	1	3.253746	4.034010	0.821016
12	6	-0.948881	-1.666196	-0.252242
13	8	0.276071	-1.625337	-0.240157
14	8	-1.717075	-0.595045	-0.263599
15	1	-1.162265	0.240772	-0.254958
16	6	-1.717075	-2.963909	-0.264004
17	6	-2.722915	-3.084643	0.886038
18	1	-0.989783	-3.772286	-0.240905
19	1	-2.246634	-3.016384	-1.218794
20	1	-2.219926	-3.048062	1.852909
21	1	-3.453787	-2.279081	0.852031
22	1	-3.253746	-4.034010	0.821016

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	B	24.1	0.0	0
2	A	26.0	0.9	0
3	A	51.6	1.2	0
4	A	71.3	0.2	0
5	B	97.1	1.1	0
6	A	142.9	0.2	0
7	B	152.0	17.7	0
8	A	174.1	0.1	0
9	A	229.6	0.1	0
10	B	234.5	2.5	0
11	A	276.7	0.8	0
12	B	292.9	12.1	0
13	A	459.7	0.2	0

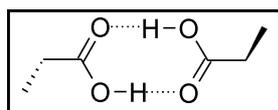
Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
14	B	496.3	74.7	2
15	A	605.9	0.0	0
16	B	609.3	26.1	1
17	A	717.5	0.6	0
18	B	727.9	3.7	0
19	A	815.1	1.4	0
20	B	816.6	1.5	0
21	A	854.9	0.3	0
22	B	863.7	25.8	1
23	B	983.1	0.1	0
24	A	1004.1	9.5	0
25	B	1004.4	5.7	0
26	A	1023.9	147.8	5
27	A	1088.0	0.0	0
28	B	1088.8	44.4	1
29	A	1108.6	0.1	0
30	B	1109.4	19.0	0
31	A	1271.6	0.0	0
32	B	1275.3	46.3	1
33	A	1332.7	0.9	0
34	B	1339.4	236.7	9
35	A	1354.1	0.3	0
36	B	1357.4	118.7	4
37	B	1416.7	1.0	0
38	A	1418.6	1.8	0
39	B	1466.2	56.9	2
40	A	1479.3	4.7	0
41	B	1479.5	8.7	0
42	A	1495.0	2.2	0
43	B	1502.9	15.0	0
44	A	1504.8	1.1	0
45	B	1512.3	37.1	1
46	A	1512.3	1.8	0
47	A	1699.4	0.1	0
48	B	1755.4	808.3	32
49	A	3011.9	0.0	0
50	B	3038.2	14.7	0
51	A	3038.6	0.4	0
52	B	3042.6	40.3	1
53	A	3042.8	42.1	1
54	B	3099.2	69.5	2
55	A	3099.4	14.4	0
56	B	3106.6	5.0	0
57	A	3106.7	2.2	0
58	B	3124.7	1314.1	52
59	A	3126.4	2.2	0
60	B	3130.2	2512.4	100

File: m-propil-dc-c2.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -536.744128579  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -536.560247  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.1621 Gesamt=0.1621  
 Framework: C2[X(C6H12O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.989031	1.662124	-0.253993
2	8	-0.234193	1.614138	-0.247893
3	8	1.759517	0.588459	-0.256768
4	1	1.205736	-0.238690	-0.253003
5	6	1.759517	2.958523	-0.266645
6	6	2.761513	3.079506	0.890240
7	1	2.293325	3.006775	-1.220825
8	1	1.031467	3.768298	-0.248440
9	1	3.496474	2.275492	0.857483
10	1	2.252987	3.039304	1.855800
11	1	3.289264	4.032501	0.828656
12	6	-0.989031	-1.662124	-0.253993
13	8	0.234193	-1.614138	-0.247893
14	8	-1.759517	-0.588459	-0.256768
15	1	-1.205736	0.238690	-0.253003
16	6	-1.759517	-2.958523	-0.266645
17	6	-2.761513	-3.079506	0.890240
18	1	-1.031467	-3.768298	-0.248440
19	1	-2.293325	-3.006775	-1.220825
20	1	-2.252987	-3.039304	1.855800
21	1	-3.496474	-2.275492	0.857483
22	1	-3.289264	-4.032501	0.828656

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A	26.0	1.1	0
2	B	26.1	0.1	0
3	A	51.5	1.1	0
4	A	74.0	0.5	0
5	B	93.2	1.1	0
6	A	138.7	0.2	0
7	B	144.9	17.6	0
8	A	165.6	0.1	0
9	A	232.2	0.1	0
10	B	236.0	1.8	0
11	A	274.5	0.8	0
12	B	288.0	10.3	0
13	A	460.6	0.2	0
14	B	490.1	62.0	1
15	A	605.2	0.0	0
16	B	606.4	30.9	0
17	A	718.0	0.3	0
18	B	725.2	5.3	0
19	A	817.5	1.0	0
20	B	818.5	1.1	0
21	A	857.4	0.2	0
22	B	863.2	20.8	0
23	B	951.3	0.0	0
24	A	994.1	191.6	5
25	B	1008.4	8.1	0
26	A	1011.0	18.8	0
27	A	1092.3	0.1	0
28	B	1093.2	51.7	1

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
29	A	1113.3	0.0	0
30	B	1113.7	23.1	0
31	A	1273.0	0.0	0
32	B	1277.2	66.1	2
33	A	1334.7	1.0	0
34	B	1341.1	288.8	8
35	A	1361.4	0.4	0
36	B	1361.5	55.9	1
37	B	1419.8	1.0	0
38	A	1423.2	2.2	0
39	B	1457.8	79.0	2
40	A	1477.6	0.5	0
41	A	1485.9	6.1	0
42	B	1486.0	9.5	0
43	B	1509.0	15.6	0
44	A	1509.4	3.3	0
45	A	1517.8	2.4	0
46	B	1518.5	39.2	1
47	A	1718.6	0.2	0
48	B	1766.8	907.8	27
49	B	3048.6	18.8	0
50	A	3048.7	4.2	0
51	B	3052.1	11.3	0
52	A	3052.2	39.4	1
53	B	3109.2	35.9	1
54	A	3109.2	15.3	0
55	A	3117.3	1.6	0
56	B	3117.4	8.1	0
57	A	3135.9	2.4	0
58	B	3136.3	52.2	1
59	A	3184.1	0.0	0
60	B	3274.6	3284.9	100

Cyclisches Dimer (C<sub>1</sub>, aus 2 C<sub>1</sub>-Monomeren) **9h**

File: b-propi-dc.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -537.001599533  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -536.818773  
 Dipolmomente: X=-0.0030 Y=-0.0005 Z=0.0121 Gesamt=0.0125  
 Framework: C1[X(C6H12O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.899221	0.277905	0.227878
2	8	1.514138	-0.971459	0.429797
3	1	0.528089	-1.059057	0.296149
4	8	1.128818	1.182053	-0.077417
5	6	3.381622	0.491490	0.414073
6	1	3.582804	1.547215	0.231281
7	1	3.610102	0.281480	1.464628

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
8	6	4.241699	-0.406034	-0.488817
9	1	5.301190	-0.210479	-0.309553
10	1	4.048103	-1.461380	-0.292035
11	1	4.038603	-0.211492	-1.545023
12	6	-1.900569	-0.273738	-0.236061
13	8	-1.515459	0.975553	-0.438596
14	1	-0.529415	1.063282	-0.305104
15	8	-1.130056	-1.178104	0.068339
16	6	-3.383658	-0.485668	-0.417701
17	1	-3.621264	-0.250954	-1.460775
18	1	-3.582663	-1.545338	-0.256659
19	6	-4.236420	0.389996	0.513661
20	1	-5.297313	0.197384	0.339643
21	1	-4.023388	0.171461	1.563178
22	1	-4.045741	1.449831	0.339090

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	16.2	0.6	0
2	20.9	0.1	0
3	44.2	1.6	0
4	75.5	0.6	0
5	93.6	0.0	0
6	141.6	18.5	0
7	142.8	0.7	0
8	164.9	0.0	0
9	234.5	1.5	0
10	236.8	0.0	0
11	276.4	0.3	0
12	280.0	11.4	0
13	456.8	0.0	0
14	486.8	63.9	1
15	603.6	9.1	0
16	604.4	19.8	0
17	719.2	0.5	0
18	723.3	4.5	0
19	812.6	0.4	0
20	813.0	1.8	0
21	852.4	0.0	0
22	859.4	21.5	0
23	957.8	0.0	0
24	996.0	125.9	3
25	1003.5	0.5	0
26	1006.4	87.3	2
27	1085.0	0.6	0
28	1086.2	53.7	1
29	1104.9	0.3	0
30	1106.9	21.0	0
31	1264.6	0.3	0
32	1269.3	63.7	1
33	1326.4	0.0	0
34	1333.6	267.9	7
35	1350.3	0.7	0
36	1351.7	84.2	2

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
37	1410.8	1.7	0
38	1413.5	0.0	0
39	1451.1	72.6	2
40	1470.7	0.0	0
41	1477.1	5.7	0
42	1477.4	9.4	0
43	1501.1	19.0	0
44	1501.5	0.4	0
45	1509.6	0.1	0
46	1510.4	39.6	1
47	1703.7	0.0	0
48	1753.4	890.2	26
49	3037.3	21.0	0
50	3037.5	12.3	0
51	3040.8	23.4	0
52	3041.8	21.2	0
53	3099.1	11.3	0
54	3099.2	37.0	1
55	3106.2	0.9	0
56	3106.4	11.2	0
57	3122.4	0.0	0
58	3125.2	58.1	1
59	3130.6	0.0	0
60	3223.7	3392.5	100

File: bp-propi-dc.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -537.043409514  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -536.860576  
 Dipolmomente: X=-0.0002 Y=-0.0001 Z=0.0007 Gesamt=0.0008  
 Framework: C1[X(C6H12O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.882667	0.277430	0.237361
2	8	1.479688	-0.961316	0.440323
3	1	0.489955	-1.040869	0.298424
4	8	1.132821	1.194685	-0.076523
5	6	3.365814	0.470125	0.428521
6	1	3.578834	1.526651	0.282485
7	1	3.597246	0.217796	1.466139
8	6	4.208535	-0.401233	-0.510350
9	1	5.269181	-0.229273	-0.329438
10	1	4.000495	-1.458103	-0.354208
11	1	4.004227	-0.163514	-1.554806
12	6	-1.882762	-0.277061	-0.237972
13	8	-1.479772	0.961668	-0.441032
14	1	-0.490051	1.041243	-0.299063
15	8	-1.132932	-1.194304	0.075984
16	6	-3.365945	-0.469644	-0.428889
17	1	-3.598009	-0.215289	-1.465856
18	1	-3.578794	-1.526454	-0.284673
19	6	-4.208165	0.399831	0.512214
20	1	-5.268909	0.228152	0.331616

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
21	1	-4.003191	0.160084	1.556074
22	1	-4.000295	1.457020	0.357982

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	10.0	0.5	0
2	13.0	0.0	0
3	43.8	1.6	0
4	72.4	0.4	0
5	95.6	0.0	0
6	147.9	0.0	0
7	149.2	19.3	0
8	172.4	0.0	0
9	233.1	2.0	0
10	235.1	0.0	0
11	280.2	0.0	0
12	283.0	12.9	0
13	457.3	0.0	0
14	493.8	73.9	2
15	608.7	0.0	0
16	610.0	26.8	0
17	728.1	0.0	0
18	730.4	4.0	0
19	814.5	2.1	0
20	814.5	0.5	0
21	855.0	0.0	0
22	864.1	25.1	0
23	985.9	0.0	0
24	1001.0	12.9	0
25	1003.9	0.0	0
26	1025.2	149.8	4
27	1086.9	0.0	0
28	1088.1	47.9	1
29	1107.0	0.0	0
30	1108.8	18.7	0
31	1269.8	0.0	0
32	1273.8	46.6	1
33	1332.2	0.0	0
34	1338.6	197.3	6
35	1352.0	0.0	0
36	1356.7	159.9	4
37	1415.2	3.7	0
38	1416.7	0.0	0
39	1466.5	55.3	1
40	1479.6	0.1	0
41	1479.9	14.6	0
42	1492.6	0.0	0
43	1502.5	17.8	0
44	1503.9	0.0	0
45	1512.1	0.0	0
46	1512.3	38.6	1
47	1699.9	0.0	0
48	1755.8	805.9	24
49	3014.5	0.0	0

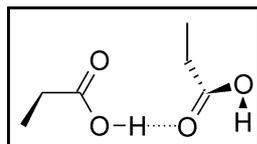
Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
50	3039.6	42.5	1
51	3040.0	0.0	0
52	3043.7	49.2	1
53	3043.9	4.2	0
54	3099.3	70.9	2
55	3099.4	0.2	0
56	3106.5	13.0	0
57	3106.5	0.1	0
58	3124.3	591.9	18
59	3125.4	0.1	0
60	3132.3	3224.4	100

File: m-propi-dc.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -536.744130279  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -536.560278  
 Dipolmomente: X=0.0006 Y=-0.0002 Z=0.0019 Gesamt=0.0020  
 Framework: C1[X(C6H12O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.900442	-0.282622	-0.220294
2	8	1.525353	0.967990	-0.424086
3	1	0.542298	1.062494	-0.298802
4	8	1.122892	-1.179396	0.079611
5	6	3.381191	-0.505943	-0.399013
6	1	3.577557	-1.557100	-0.192620
7	1	3.610146	-0.321043	-1.453133
8	6	4.242718	0.409001	0.482898
9	1	5.300713	0.206851	0.308850
10	1	4.051313	1.458937	0.262297
11	1	4.038395	0.239031	1.542082
12	6	-1.900172	0.283523	0.218564
13	8	-1.525142	-0.967174	0.421871
14	1	-0.542031	-1.061576	0.296925
15	8	-1.122555	1.180377	-0.080927
16	6	-3.380824	0.507172	0.397905
17	1	-3.607929	0.327999	1.453455
18	1	-3.577694	1.557251	0.186530
19	6	-4.243769	-0.412511	-0.477539
20	1	-5.301480	-0.209670	-0.302556
21	1	-4.041491	-0.248029	-1.537983
22	1	-4.051713	-1.461250	-0.251921

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	21.8	0.8	0
2	25.7	0.0	0
3	46.2	1.5	0
4	75.8	0.6	0
5	94.6	0.0	0
6	140.5	18.6	0
7	142.8	0.0	0
8	165.3	0.0	0

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
9	234.7	1.2	0
10	237.7	0.0	0
11	279.6	0.0	0
12	284.9	11.9	0
13	460.7	0.0	0
14	489.6	62.5	1
15	605.4	30.0	0
16	606.1	0.5	0
17	719.6	0.1	0
18	723.0	5.7	0
19	817.3	0.0	0
20	817.5	2.4	0
21	857.3	0.0	0
22	863.7	20.8	0
23	954.3	0.0	0
24	995.3	181.8	5
25	1009.0	0.2	0
26	1009.6	36.4	1
27	1091.9	0.0	0
28	1093.2	53.3	1
29	1112.7	0.0	0
30	1114.6	20.7	0
31	1272.9	0.0	0
32	1277.3	63.5	1
33	1334.6	0.0	0
34	1341.5	277.9	8
35	1359.9	0.1	0
36	1360.8	73.8	2
37	1419.4	1.8	0
38	1422.4	0.0	0
39	1458.4	78.7	2
40	1477.0	0.0	0
41	1485.1	10.5	0
42	1485.2	4.1	0
43	1508.8	19.1	0
44	1509.2	0.0	0
45	1517.4	0.0	0
46	1518.2	41.3	1
47	1718.1	0.0	0
48	1766.6	909.8	27
49	3048.3	20.2	0
50	3048.5	1.1	0
51	3051.6	25.4	0
52	3051.8	28.1	0
53	3109.2	20.9	0
54	3109.3	28.8	0
55	3117.0	0.3	0
56	3117.1	10.9	0
57	3135.6	0.2	0
58	3136.0	54.9	1
59	3181.6	0.0	0
60	3272.6	3296.9	100

Übergangszustand (C1, aus 2 C<sub>1</sub>-Monomeren) **9i**

File: b-propi-rts.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -536.986776559  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -536.804657  
 Dipolmomente: X=0.7076 Y=0.3464 Z=-0.0386 Gesamt=0.7888  
 Framework: C1[X(C6H12O4)]  
 Imaginäre Freq.: **-45.6 cm<sup>-1</sup>**

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.167110	-0.599922	-0.204944
2	8	2.577220	-0.960929	1.024265
3	1	2.013763	-1.690814	1.323201
4	8	1.291318	-1.199926	-0.794470
5	6	2.901143	0.606735	-0.726467
6	1	3.975670	0.415024	-0.651238
7	1	2.641772	0.711247	-1.780155
8	6	2.541023	1.881277	0.059234
9	1	3.049435	2.741400	-0.381551
10	1	1.465071	2.064640	0.036267
11	1	2.847516	1.797193	1.102914
12	6	-1.765399	-0.158165	0.379482
13	8	-1.505897	-1.048939	-0.593531
14	1	-0.534880	-1.140637	-0.691468
15	8	-0.896602	0.396856	1.017246
16	6	-3.249805	0.065211	0.565269
17	1	-3.718462	-0.906327	0.750534
18	1	-3.375202	0.681416	1.456134
19	6	-3.905620	0.728129	-0.657183
20	1	-4.971777	0.882251	-0.475305
21	1	-3.456069	1.703020	-0.863115
22	1	-3.795864	0.105499	-1.546638

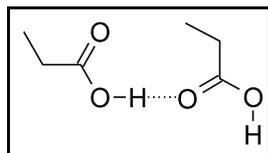
File: bp-propi-rts.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -537.027313162  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -536.845109  
 Dipolmomente: X=0.6878 Y=0.1902 Z=0.0698 Gesamt=0.7170  
 Framework: C1[X(C6H12O4)]  
 Imaginäre Freq.: **-42.4 cm<sup>-1</sup>**

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.133905	-0.603541	-0.193307
2	8	2.530757	-0.904366	1.053785
3	1	1.997154	-1.653659	1.357344
4	8	1.304308	-1.263359	-0.782607
5	6	2.824872	0.614418	-0.740915
6	1	3.902947	0.451256	-0.680739

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
7	1	2.548571	0.694701	-1.789739
8	6	2.447200	1.888588	0.029317
9	1	2.922186	2.753148	-0.433234
10	1	1.368831	2.040154	0.026588
11	1	2.775379	1.829012	1.065397
12	6	-1.715421	-0.151344	0.373937
13	8	-1.468405	-1.115698	-0.525142
14	1	-0.497926	-1.201519	-0.637523
15	8	-0.842727	0.464239	0.944552
16	6	-3.195500	0.077644	0.570493
17	1	-3.665999	-0.883715	0.785208
18	1	-3.311451	0.720277	1.440639
19	6	-3.854941	0.707572	-0.663571
20	1	-4.918238	0.866104	-0.484371
21	1	-3.406240	1.674179	-0.895042
22	1	-3.747363	0.063521	-1.534961

File: m-propi-rts.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -536.729478634  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -536.546369  
 Dipolmomente: X=0.5162 Y=0.4484 Z=0.0414 Gesamt=0.6850  
 Framework: C1[X(C6H12O4)]  
 Imaginäre Freq.: **-45.2 cm<sup>-1</sup>**

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.125098	-0.599581	-0.194850
2	8	2.494532	-0.907976	1.057807
3	1	1.937669	-1.637740	1.363655
4	8	1.292744	-1.242993	-0.798640
5	6	2.844520	0.610212	-0.726620
6	1	3.919880	0.437511	-0.632645
7	1	2.599441	0.691559	-1.784597
8	6	2.452188	1.889714	0.033169
9	1	2.948936	2.751049	-0.415849
10	1	1.374077	2.050892	-0.003473
11	1	2.747750	1.827249	1.080402
12	6	-1.709217	-0.171378	0.370911
13	8	-1.490361	-1.081823	-0.590227
14	1	-0.525616	-1.199063	-0.705051
15	8	-0.815608	0.370091	0.983011
16	6	-3.182103	0.093986	0.579605
17	1	-3.670123	-0.859922	0.797216
18	1	-3.274832	0.734680	1.455688
19	6	-3.842483	0.741465	-0.647595
20	1	-4.900188	0.926134	-0.452143
21	1	-3.372999	1.698463	-0.885251
22	1	-3.762467	0.094288	-1.521280

Offenes Dimer ( $C_s$ , aus 2  $C_s$ -Monomeren) **9j**

File: b-propi-dl-cs.log  
 Rechenmethode: **B3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -536.988842767  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -536.807557  
 Dipolmomente: X=-2.1174 Y=0.1484 Z=0.0000 Gesamt=2.1226  
 Framework: CS[SG(C6H4O4),X(H8)]  
 Imaginäre Freq.: **-56.1  $\text{cm}^{-1}$**   
 IRC Forward: OK  
 IRC Reverse: OK

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-2.725823	-0.269885	0.000000
2	8	-1.805679	0.518288	0.000000
3	8	-4.009133	0.150896	0.000000
4	1	-3.998111	1.120348	0.000000
5	6	-2.628050	-1.773646	0.000000
6	6	-1.199258	-2.308086	0.000000
7	1	-3.192051	-2.127228	0.870240
8	1	-3.192051	-2.127228	-0.870240
9	1	-0.642744	-1.972714	0.875882
10	1	-0.642744	-1.972714	-0.875882
11	1	-1.213046	-3.400179	0.000000
12	6	1.891458	0.703265	0.000000
13	8	1.800804	-0.503104	0.000000
14	8	0.827062	1.525072	0.000000
15	1	0.000000	1.001193	0.000000
16	6	3.191379	1.480500	0.000000
17	6	4.433426	0.594022	0.000000
18	1	3.173438	2.144382	0.870938
19	1	3.173438	2.144382	-0.870938
20	1	4.456410	-0.051931	0.879864
21	1	4.456410	-0.051931	-0.879864
22	1	5.337820	1.207391	0.000000

File: bp-propi-dl-cs.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -537.029566554  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -536.848123  
 Dipolmomente: X=-2.2952 Y=0.2727 Z=0.0000 Gesamt=2.3113  
 Framework: CS[SG(C6H4O4),X(H8)]  
 Imaginäre Freq.: **-47.2  $\text{cm}^{-1}$**   
 IRC Forward: OK  
 IRC Reverse: OK

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-2.719795	-0.249806	0.000000
2	8	-1.799628	0.535604	0.000000

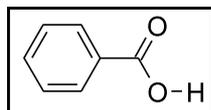
Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
3	8	-4.000647	0.170892	0.000000
4	1	-3.983711	1.139688	0.000000
5	6	-2.622239	-1.751532	0.000000
6	6	-1.196122	-2.282826	0.000000
7	1	-3.185049	-2.105007	0.868004
8	1	-3.185049	-2.105007	-0.868004
9	1	-0.641774	-1.945346	0.873233
10	1	-0.641774	-1.945346	-0.873233
11	1	-1.205863	-3.372425	0.000000
12	6	1.884880	0.687989	0.000000
13	8	1.789618	-0.516652	0.000000
14	8	0.829502	1.516107	0.000000
15	1	0.000000	0.996888	0.000000
16	6	3.189823	1.453232	0.000000
17	6	4.419772	0.556097	0.000000
18	1	3.178502	2.116043	0.868785
19	1	3.178502	2.116043	-0.868785
20	1	4.433843	-0.089191	0.877376
21	1	4.433843	-0.089191	-0.877376
22	1	5.329849	1.156316	0.000000

File: m-propi-dl-cs.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -536.731453326  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -536.549163  
 Dipolmomente: X=-2.0779 Y=0.1634 Z=0.0000 Gesamt=2.0843  
 Framework: CS[SG(C6H4O4),X(H8)]  
 Imaginäre Freq.: **-55.7 cm<sup>-1</sup>**  
 IRC Forward: OK  
 IRC Reverse: OK

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-2.717277	-0.221290	0.000000
2	8	-1.796719	0.563978	0.000000
3	8	-3.997006	0.201580	0.000000
4	1	-3.986712	1.169419	0.000000
5	6	-2.621305	-1.724247	0.000000
6	6	-1.193089	-2.258349	0.000000
7	1	-3.184724	-2.076519	0.869693
8	1	-3.184724	-2.076519	-0.869693
9	1	-0.636597	-1.923029	0.874594
10	1	-0.636597	-1.923029	-0.874594
11	1	-1.207475	-3.349388	0.000000
12	6	1.881611	0.669856	0.000000
13	8	1.761627	-0.532358	0.000000
14	8	0.839392	1.515539	0.000000
15	1	0.000000	1.014700	0.000000
16	6	3.199693	1.413198	0.000000
17	6	4.417094	0.494451	0.000000
18	1	3.198652	2.076225	0.870366
19	1	3.198652	2.076225	-0.870366
20	1	4.422118	-0.151317	0.879018

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
21	1	4.422118	-0.151317	-0.879018
22	1	5.336582	1.082921	0.000000

### Benzoessäure

Monomer **12a**

File: b-bza-mo-cs.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -420.948248099  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -420.833106  
 Dipolmomente: X=-1.1641 Y=-1.7804 Z=0.0000 Gesamt=2.1272  
 Framework: CS[SG(C7H6O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.437239	-1.721122	0.000000
2	6	1.282361	-0.339598	0.000000
3	6	0.000000	0.221711	0.000000
4	6	-1.125865	-0.610528	0.000000
5	6	-0.965441	-1.993053	0.000000
6	6	0.313688	-2.548861	0.000000
7	1	2.431100	-2.153599	0.000000
8	1	2.140698	0.320788	0.000000
9	1	-2.115442	-0.172874	0.000000
10	1	-1.837380	-2.636987	0.000000
11	1	0.435163	-3.626378	0.000000
12	6	-0.114019	1.703878	0.000000
13	8	-1.401095	2.138387	0.000000
14	1	-1.366995	3.106094	0.000000
15	8	0.819229	2.472663	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	63.8	1.0	0
2	A''	158.1	0.8	0
3	A'	215.6	1.5	0
4	A'	383.5	4.8	1
5	A''	413.8	0.5	0
6	A''	431.7	11.9	3
7	A'	496.9	6.1	1
8	A''	575.9	71.7	18
9	A'	631.7	0.3	0
10	A'	639.4	49.1	12
11	A''	700.0	6.3	1
12	A''	727.0	135.7	34
13	A'	774.9	8.2	2
14	A''	824.7	0.1	0
15	A''	864.6	0.1	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
16	A"	960.1	1.8	0
17	A"	997.8	0.1	0
18	?A	1009.5	0.2	0
19	?A	1017.9	0.4	0
20	A'	1045.0	20.4	5
21	A'	1089.5	117.7	29
22	A'	1114.1	41.0	10
23	A'	1184.4	1.2	0
24	A'	1188.7	156.8	39
25	A'	1210.5	84.4	21
26	A'	1339.0	2.5	0
27	A'	1350.7	9.2	2
28	A'	1362.3	115.3	29
29	A'	1480.3	15.3	3
30	A'	1522.6	1.7	0
31	A'	1621.8	5.6	1
32	A'	1642.1	18.8	4
33	A'	1785.3	396.3	99
34	A'	3166.9	0.4	0
35	A'	3178.6	10.2	2
36	A'	3188.5	12.5	3
37	A'	3201.7	5.0	1
38	A'	3210.6	2.1	0
39	A'	3772.2	99.1	25

File: bp-bza-mo-cs.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -420.983196151  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -420.867680  
 Dipolmomente: X=-1.1976 Y=-1.6437 Z=0.0000 Gesamt=2.0337  
 Framework: CS[SG(C7H6O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.427242	-1.722348	0.000000
2	6	1.276754	-0.344263	0.000000
3	6	0.000000	0.220379	0.000000
4	6	-1.124791	-0.606763	0.000000
5	6	-0.969486	-1.986068	0.000000
6	6	0.304266	-2.544478	0.000000
7	1	2.417605	-2.156943	0.000000
8	1	2.134461	0.312955	0.000000
9	1	-2.111027	-0.167499	0.000000
10	1	-1.841608	-2.625770	0.000000
11	1	0.422101	-3.620012	0.000000
12	6	-0.108234	1.701275	0.000000
13	8	-1.391296	2.141231	0.000000
14	1	-1.345104	3.107878	0.000000
15	8	0.827430	2.464142	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A"	64.9	1.1	0
2	A"	158.6	0.6	0
3	A'	217.6	1.5	0

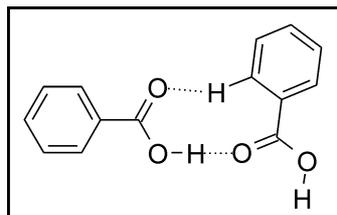
Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
4	A'	384.5	4.7	1
5	A''	416.9	0.5	0
6	A''	437.9	9.3	2
7	A'	497.8	5.8	1
8	A''	594.5	60.5	18
9	A'	634.1	0.5	0
10	A'	640.1	48.7	14
11	A''	710.2	10.2	3
12	A''	732.4	118.8	35
13	A'	777.0	8.8	2
14	A''	829.1	0.1	0
15	A''	870.9	0.0	0
16	A''	971.6	1.2	0
17	A''	1005.5	0.1	0
18	A'	1023.6	0.2	0
19	A''	1024.0	0.1	0
20	A'	1049.6	16.6	5
21	A'	1093.6	107.4	32
22	A'	1117.6	42.4	12
23	A'	1186.9	1.7	0
24	A'	1190.9	158.5	47
25	A'	1212.2	61.8	18
26	A'	1340.7	1.7	0
27	A'	1356.3	5.2	1
28	A'	1371.9	112.3	33
29	A'	1488.1	16.2	4
30	A'	1530.6	1.3	0
31	A'	1625.6	5.2	1
32	A'	1646.3	17.1	5
33	A'	1791.8	331.2	100
34	A'	3168.3	0.3	0
35	A'	3180.4	11.6	3
36	A'	3190.2	14.2	4
37	A'	3204.4	4.8	1
38	A'	3212.8	2.6	0
39	A'	3756.3	90.1	27

File: m-bza-mo.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -420.747685174  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -420.631885  
 Dipolmomente: X=-1.1620 Y=-1.7974 Z=0.0000 Gesamt=2.1403  
 Framework: CS[SG(C7H6O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.439188	-1.717212	0.000000
2	6	1.282253	-0.336911	0.000000
3	6	0.000000	0.221430	0.000000
4	6	-1.123874	-0.611350	0.000000
5	6	-0.961415	-1.992583	0.000000
6	6	0.317664	-2.545918	0.000000
7	1	2.432553	-2.147717	0.000000
8	1	2.138625	0.324102	0.000000

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
9	1	-2.112858	-0.175155	0.000000
10	1	-1.831362	-2.637089	0.000000
11	1	0.440617	-3.622015	0.000000
12	6	-0.116873	1.702011	0.000000
13	8	-1.402850	2.133537	0.000000
14	1	-1.372451	3.099900	0.000000
15	8	0.813252	2.471609	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	66.4	1.0	0
2	A''	159.5	0.8	0
3	A'	217.7	1.5	0
4	A'	386.1	4.9	1
5	A''	417.4	0.5	0
6	A''	435.2	11.9	2
7	A'	500.0	6.0	1
8	A''	579.5	72.6	17
9	A'	635.3	0.2	0
10	A'	643.9	49.9	12
11	A''	704.4	5.8	1
12	A''	732.5	139.9	34
13	A'	780.2	8.5	2
14	A''	830.4	0.1	0
15	A''	871.7	0.1	0
16	A''	968.3	1.8	0
17	A''	1007.1	0.0	0
18	A''	1018.7	0.1	0
19	A'	1023.6	0.3	0
20	A'	1050.7	19.1	4
21	A'	1096.4	107.0	26
22	A'	1121.2	48.1	11
23	A'	1189.2	0.5	0
24	A'	1196.7	140.9	34
25	A'	1218.5	107.6	26
26	A'	1342.4	2.7	0
27	A'	1356.9	7.5	1
28	A'	1372.0	118.4	29
29	A'	1489.0	15.8	3
30	A'	1532.2	2.0	0
31	A'	1632.2	5.5	1
32	A'	1652.9	19.0	4
33	A'	1798.2	407.7	100
34	A'	3179.8	0.4	0
35	A'	3192.0	10.8	2
36	A'	3201.5	12.4	3
37	A'	3214.5	5.0	1
38	A'	3223.3	2.2	0
39	A'	3793.2	104.8	25

Offenes Dimer **12b**

File: b-bza-dl-cs.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -841.909117174  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -841.677475  
 Dipolmomente: X=0.6829 Y=-1.2250 Z=0.0000 Gesamt=1.4025  
 Framework: CS[SG(C14H12O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	3.625854	-0.700993	0.000000
2	6	2.315804	-1.169148	0.000000
3	6	2.074227	-2.549494	0.000000
4	6	3.147863	-3.452000	0.000000
5	6	4.453143	-2.974035	0.000000
6	6	4.692869	-1.599134	0.000000
7	1	3.810474	0.366817	0.000000
8	1	1.488113	-0.469169	0.000000
9	1	2.954671	-4.516568	0.000000
10	1	5.282927	-3.671314	0.000000
11	1	5.712227	-1.229038	0.000000
12	6	0.673552	-3.025785	0.000000
13	8	0.559514	-4.372008	0.000000
14	1	-0.387507	-4.575717	0.000000
15	8	-0.319759	-2.321710	0.000000
16	6	-2.421891	4.744336	0.000000
17	6	-1.590173	3.629770	0.000000
18	6	-2.139855	2.343005	0.000000
19	6	-3.530160	2.181559	0.000000
20	6	-4.359684	3.299644	0.000000
21	6	-3.807672	4.580423	0.000000
22	1	-1.992597	5.739790	0.000000
23	1	-0.512278	3.734627	0.000000
24	1	-3.949553	1.184130	0.000000
25	1	-5.436317	3.172491	0.000000
26	1	-4.456191	5.449617	0.000000
27	6	-1.211264	1.175523	0.000000
28	8	-1.846839	-0.003862	0.000000
29	1	-1.192975	-0.735405	0.000000
30	8	0.000000	1.278544	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	7.8	0.8	0
2	A''	23.7	0.9	0
3	A'	39.5	1.9	0
4	A''	54.4	0.0	0
5	A''	63.4	0.2	0
6	A''	64.0	0.3	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
7	A"	84.0	0.6	0
8	A'	96.7	3.2	0
9	A"	158.8	1.1	0
10	A"	170.9	0.0	0
11	A'	221.7	0.7	0
12	A'	238.8	15.2	1
13	A'	386.3	4.0	0
14	A'	393.4	0.3	0
15	A"	413.9	2.5	0
16	A"	415.3	0.0	0
17	A"	433.9	8.6	0
18	A"	444.0	1.9	0
19	A'	500.1	10.6	0
20	A'	512.2	18.9	1
21	A"	575.5	72.7	5
22	A'	630.1	0.3	0
23	A'	632.1	0.2	0
24	A'	645.4	47.1	3
25	A'	657.5	51.3	3
26	A"	693.8	6.4	0
27	A"	701.7	2.7	0
28	A"	719.2	61.6	4
29	A"	732.2	127.6	9
30	A'	782.7	9.9	0
31	A'	790.5	27.3	1
32	A"	815.3	60.4	4
33	A"	823.0	1.4	0
34	A"	841.3	70.4	5
35	A"	866.1	0.3	0
36	A"	874.4	3.3	0
37	A"	959.7	1.9	0
38	A"	970.2	2.8	0
39	?A	998.3	0.1	0
40	?A	1004.0	0.2	0
41	?A	1007.4	0.2	0
42	?A	1016.2	2.1	0
43	?A	1017.9	0.2	0
44	?A	1034.1	1.6	0
45	?A	1045.8	10.6	0
46	?A	1046.1	12.5	0
47	A'	1096.8	24.2	1
48	A'	1100.5	84.7	6
49	A'	1131.3	16.8	1
50	A'	1132.4	69.6	5
51	A'	1182.8	0.5	0
52	A'	1186.0	13.8	1
53	A'	1195.2	66.9	4
54	A'	1199.4	188.0	13
55	A'	1217.9	79.9	5
56	A'	1248.2	375.2	27
57	A'	1338.6	13.5	0
58	A'	1341.6	9.0	0
59	A'	1348.6	4.8	0
60	A'	1361.6	1.6	0
61	A'	1374.6	143.2	10

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
62	A'	1405.5	82.5	6
63	A'	1479.1	10.6	0
64	A'	1480.0	28.3	2
65	A'	1522.4	2.1	0
66	A'	1526.6	2.5	0
67	A'	1620.2	3.7	0
68	A'	1621.5	13.3	0
69	A'	1640.9	39.9	2
70	A'	1642.2	18.6	1
71	A'	1745.1	104.8	7
72	A'	1765.1	982.9	71
73	A'	3163.8	0.3	0
74	A'	3167.6	2.7	0
75	A'	3176.3	12.3	0
76	A'	3181.1	46.2	3
77	A'	3186.2	27.1	1
78	A'	3186.6	13.3	0
79	A'	3194.2	38.5	2
80	A'	3201.1	5.8	0
81	A'	3210.4	5.2	0
82	A'	3210.4	1.2	0
83	A'	3526.0	1370.3	100
84	A'	3767.9	106.4	7

File: bp-bza-dl-cs.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -841.979153446  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -841.746909  
 Dipolmomente: X=0.6379 Y=-1.4349 Z=0.0000 Gesamt=1.5703  
 Framework: CS[SG(C14H12O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	3.625877	-0.691741	0.000000
2	6	2.320602	-1.161678	0.000000
3	6	2.081714	-2.538574	0.000000
4	6	3.154881	-3.435585	0.000000
5	6	4.455734	-2.956468	0.000000
6	6	4.692047	-1.584975	0.000000
7	1	3.807855	0.374088	0.000000
8	1	1.492682	-0.465858	0.000000
9	1	2.965003	-4.498269	0.000000
10	1	5.285147	-3.650509	0.000000
11	1	5.708390	-1.213554	0.000000
12	6	0.683274	-3.016911	0.000000
13	8	0.570846	-4.361204	0.000000
14	1	-0.376633	-4.559732	0.000000
15	8	-0.308777	-2.314805	0.000000
16	6	-2.447106	4.725953	0.000000
17	6	-1.609092	3.621011	0.000000
18	6	-2.146207	2.333049	0.000000
19	6	-3.531454	2.161773	0.000000
20	6	-4.367846	3.269978	0.000000
21	6	-3.827737	4.551590	0.000000

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
22	1	-2.026731	5.722648	0.000000
23	1	-0.534387	3.733134	0.000000
24	1	-3.942432	1.163474	0.000000
25	1	-5.441075	3.134425	0.000000
26	1	-4.481784	5.413658	0.000000
27	6	-1.208069	1.174927	0.000000
28	8	-1.830559	-0.008499	0.000000
29	1	-1.167817	-0.731581	0.000000
30	8	0.000000	1.292507	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A"	8.6	0.8	0
2	A"	22.5	0.8	0
3	A'	39.0	1.8	0
4	A"	50.1	0.1	0
5	A'	62.5	0.4	0
6	A"	64.1	0.2	0
7	A"	84.1	0.8	0
8	A'	97.1	3.5	0
9	A"	158.9	1.0	0
10	A"	170.9	0.0	0
11	A'	222.3	0.7	0
12	A'	241.0	16.0	1
13	A'	387.3	3.6	0
14	A'	394.6	0.3	0
15	A"	416.2	1.0	0
16	A"	418.0	0.0	0
17	A"	440.1	7.5	0
18	A"	449.1	1.6	0
19	A'	500.8	10.6	0
20	A'	513.3	19.8	1
21	A"	600.8	61.8	4
22	A'	632.3	0.4	0
23	A'	634.5	0.2	0
24	A'	646.5	46.2	3
25	A'	659.3	49.7	3
26	A"	705.1	4.3	0
27	A"	710.8	5.0	0
28	A"	721.8	54.3	3
29	A"	737.5	110.9	7
30	A'	784.8	10.4	0
31	A'	792.7	28.3	2
32	A"	814.9	73.4	5
33	A"	830.4	0.1	0
34	A"	840.4	35.7	2
35	A"	871.8	0.2	0
36	A"	877.9	1.2	0
37	A"	970.2	1.3	0
38	A"	980.1	1.3	0
39	A"	1004.9	0.1	0
40	A"	1011.4	0.1	0
41	A"	1021.2	0.1	0
42	A'	1021.9	1.9	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
43	A'	1023.6	0.3	0
44	A''	1032.4	0.1	0
45	A'	1050.2	6.2	0
46	A'	1050.5	12.9	0
47	A'	1100.6	22.4	1
48	A'	1104.5	75.4	5
49	A'	1134.7	33.4	2
50	A'	1136.8	48.6	3
51	A'	1185.4	0.4	0
52	A'	1188.6	13.4	0
53	A'	1199.0	81.1	5
54	A'	1201.1	176.5	12
55	A'	1220.0	56.4	3
56	A'	1248.1	341.3	24
57	A'	1340.4	8.9	0
58	A'	1342.0	7.9	0
59	A'	1354.1	6.4	0
60	A'	1368.0	1.1	0
61	A'	1384.0	126.9	8
62	A'	1415.4	80.4	5
63	A'	1486.9	7.8	0
64	A'	1487.5	31.8	2
65	A'	1530.3	1.1	0
66	A'	1534.4	2.2	0
67	A'	1624.3	3.0	0
68	A'	1625.3	12.0	0
69	A'	1644.9	36.3	2
70	A'	1646.1	16.0	1
71	A'	1750.3	102.8	7
72	A'	1769.5	868.1	61
73	A'	3165.4	0.2	0
74	A'	3169.2	2.7	0
75	A'	3177.9	13.5	0
76	A'	3183.2	40.2	2
77	A'	3188.0	24.9	1
78	A'	3189.5	18.3	1
79	A'	3196.7	43.1	3
80	A'	3204.0	6.1	0
81	A'	3212.5	2.9	0
82	A'	3212.7	4.1	0
83	A'	3501.0	1412.6	100
84	A'	3752.9	97.9	6

File: m-bza-dl.log  
 Rechenmethode: **RmPWLLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -841.509802190  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -841.276749  
 Dipolmomente: X=0.6706 Y=-1.1969 Z=0.0000 Gesamt=1.3720  
 Framework: CS[SG(C14H12O4)]

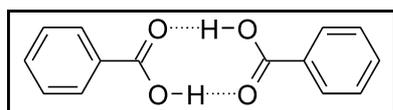
Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	3.609746	-0.685067	0.000000
2	6	2.301915	-1.156904	0.000000

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
3	6	2.065744	-2.537013	0.000000
4	6	3.141098	-3.435707	0.000000
5	6	4.443943	-2.953924	0.000000
6	6	4.678803	-1.579154	0.000000
7	1	3.790728	0.382109	0.000000
8	1	1.473605	-0.459520	0.000000
9	1	2.951166	-4.499661	0.000000
10	1	5.275071	-3.647594	0.000000
11	1	5.695773	-1.206172	0.000000
12	6	0.667795	-3.019279	0.000000
13	8	0.559412	-4.363241	0.000000
14	1	-0.384534	-4.573277	0.000000
15	8	-0.326794	-2.319996	0.000000
16	6	-2.402555	4.730836	0.000000
17	6	-1.576362	3.613331	0.000000
18	6	-2.131922	2.330421	0.000000
19	6	-3.521687	2.174741	0.000000
20	6	-4.345662	3.295755	0.000000
21	6	-3.788068	4.573027	0.000000
22	1	-1.969474	5.723234	0.000000
23	1	-0.499215	3.713111	0.000000
24	1	-3.944539	1.180080	0.000000
25	1	-5.421575	3.173704	0.000000
26	1	-4.431917	5.444103	0.000000
27	6	-1.210029	1.158935	0.000000
28	8	-1.849055	-0.015707	0.000000
29	1	-1.200142	-0.749565	0.000000
30	8	0.000000	1.256376	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	9.2	0.9	0
2	A''	24.3	0.7	0
3	A''	42.3	2.0	0
4	A''	54.9	0.1	0
5	A''	64.8	0.3	0
6	A''	65.0	0.2	0
7	A''	85.1	0.6	0
8	A''	101.2	3.0	0
9	A''	160.2	0.9	0
10	A''	171.7	0.0	0
11	A'	223.4	0.8	0
12	A'	241.5	15.5	1
13	?A	388.5	4.1	0
14	?A	396.7	0.3	0
15	?A	418.3	2.3	0
16	A''	420.3	0.0	0
17	?A	438.8	8.6	0
18	A''	447.6	2.0	0
19	A'	503.0	10.2	0
20	A'	515.9	19.9	1
21	A''	577.6	74.5	5
22	A'	633.9	0.4	0
23	?A	635.7	0.2	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
24	A'	650.0	48.0	3
25	A'	661.7	51.6	3
26	A'	702.7	8.2	0
27	?A	707.6	3.9	0
28	A"	724.5	63.9	4
29	A"	738.1	130.4	9
30	A'	787.9	10.6	0
31	?A	795.9	27.8	1
32	A"	820.7	48.6	3
33	?A	828.5	0.6	0
34	A"	848.3	75.6	5
35	A"	872.8	0.4	0
36	A"	881.1	2.6	0
37	A"	969.1	1.8	0
38	A"	980.3	2.3	0
39	?A	1010.7	0.0	0
40	?B	1018.0	0.3	0
41	?B	1021.5	0.1	0
42	?B	1021.9	2.1	0
43	?A	1023.4	0.2	0
44	A"	1044.7	1.4	0
45	A'	1051.3	10.3	0
46	A'	1051.6	11.8	0
47	A'	1102.7	22.0	1
48	A'	1107.6	73.9	5
49	A'	1139.2	22.9	1
50	A'	1140.3	63.8	4
51	A'	1187.6	0.6	0
52	A'	1190.7	11.5	0
53	A'	1201.5	57.7	4
54	A'	1207.7	181.8	12
55	A'	1225.1	99.4	7
56	A'	1259.6	383.8	27
57	A'	1342.0	11.5	0
58	A'	1343.6	11.4	0
59	A'	1354.3	7.4	0
60	A'	1369.2	0.6	0
61	A'	1384.3	147.7	10
62	A'	1417.1	84.7	6
63	A'	1488.1	6.5	0
64	A'	1488.6	33.7	2
65	A'	1531.7	2.5	0
66	A'	1536.1	2.7	0
67	A'	1630.3	3.4	0
68	A'	1631.6	12.6	0
69	A'	1651.3	39.9	2
70	A'	1652.6	19.5	1
71	A'	1756.8	104.7	7
72	A'	1777.3	1015.4	72
73	A'	3176.9	0.5	0
74	A'	3180.9	3.1	0
75	A'	3190.1	12.5	0
76	A'	3194.6	45.4	3
77	A'	3199.9	15.2	1

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
78	A'	3200.7	28.2	2
79	A'	3207.9	42.6	3
80	A'	3214.5	5.7	0
81	A'	3223.4	1.7	0
82	A'	3223.7	4.0	0
83	A'	3545.6	1401.0	99
84	A'	3791.0	114.4	8

Cyclisches Dimer **12c**

File: b-bza-dc-c2h.log  
 Rechenmethode: **B3LYP/6-311++G\*\***  
 E(RB+HF-LYP): -841.922488178  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -841.690618  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C14H12O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.244164	5.477747	0.000000
2	6	-1.211351	4.087784	0.000000
3	6	0.016890	3.416471	0.000000
4	6	1.211351	4.146892	0.000000
5	6	1.173337	5.537846	0.000000
6	6	-0.052363	6.203665	0.000000
7	1	-2.196097	5.996102	0.000000
8	1	-2.124784	3.506391	0.000000
9	1	2.156940	3.620810	0.000000
10	1	2.098409	6.102756	0.000000
11	1	-0.079104	7.287712	0.000000
12	6	0.018535	1.930478	0.000000
13	8	1.222714	1.383354	0.000000
14	1	1.150500	0.386380	0.000000
15	8	-1.020917	1.273034	0.000000
16	6	1.244164	-5.477747	0.000000
17	6	1.211351	-4.087784	0.000000
18	6	-0.016890	-3.416471	0.000000
19	6	-1.211351	-4.146892	0.000000
20	6	-1.173337	-5.537846	0.000000
21	6	0.052363	-6.203665	0.000000
22	1	2.196097	-5.996102	0.000000
23	1	2.124784	-3.506391	0.000000
24	1	-2.156940	-3.620810	0.000000
25	1	-2.098409	-6.102756	0.000000
26	1	0.079104	-7.287712	0.000000
27	6	-0.018535	-1.930478	0.000000
28	8	-1.222714	-1.383354	0.000000
29	1	-1.150500	-0.386380	0.000000
30	8	1.020917	-1.273034	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	18.6	1.3	0
2	AU	33.4	0.0	0
3	BU	58.6	4.4	0
4	BG	61.2	0.0	0
5	BG	65.2	0.0	0
6	AU	85.5	0.5	0
7	AG	105.1	0.0	0
8	AG	114.2	0.0	0
9	AU	167.1	0.1	0
10	BG	180.2	0.0	0
11	AG	259.8	0.0	0
12	BU	283.7	68.5	1
13	BU	388.6	1.2	0
14	BG	413.2	0.0	0
15	AU	414.1	0.0	0
16	AG	423.1	0.0	0
17	AU	443.4	4.2	0
18	BG	446.4	0.0	0
19	AG	512.3	0.0	0
20	BU	545.7	95.9	2
21	AG	631.8	0.0	0
22	BU	631.9	0.6	0
23	AG	668.6	0.0	0
24	BU	678.7	48.1	1
25	AU	696.7	20.3	0
26	BG	697.2	0.0	0
27	AU	724.0	155.3	3
28	BG	724.8	0.0	0
29	AG	803.6	0.0	0
30	BU	816.1	22.6	0
31	BG	825.7	0.0	0
32	AU	826.7	10.1	0
33	AU	864.5	0.0	0
34	BG	864.6	0.0	0
35	BG	888.7	0.0	0
36	BG	962.2	0.0	0
37	AU	962.5	4.5	0
38	AU	982.6	205.9	4
39	BG	998.3	0.0	0
40	AU	998.8	2.5	0
41	BG	1009.4	0.0	0
42	AU	1009.8	0.0	0
43	BU	1017.7	1.7	0
44	AG	1017.9	0.0	0
45	BU	1046.1	25.9	0
46	AG	1046.4	0.0	0
47	AG	1100.4	0.0	0
48	BU	1100.6	24.1	0
49	BU	1147.2	19.5	0
50	AG	1150.3	0.0	0
51	BU	1184.4	1.3	0
52	AG	1184.4	0.0	0
53	BU	1198.2	63.6	1
54	AG	1199.3	0.0	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
55	AG	1308.4	0.0	0
56	BU	1317.2	667.5	15
57	AG	1344.2	0.0	0
58	BU	1346.3	286.7	6
59	AG	1350.2	0.0	0
60	BU	1350.2	14.0	0
61	BU	1452.4	184.3	4
62	AG	1473.4	0.0	0
63	BU	1480.5	57.9	1
64	AG	1485.4	0.0	0
65	AG	1523.3	0.0	0
66	BU	1524.0	13.9	0
67	BU	1620.2	52.2	1
68	AG	1620.8	0.0	0
69	BU	1642.2	60.1	1
70	AG	1642.3	0.0	0
71	AG	1685.4	0.0	0
72	BU	1730.9	1009.2	23
73	AG	3107.4	0.0	0
74	BU	3166.6	2.6	0
75	AG	3166.6	0.0	0
76	BU	3178.9	22.8	0
77	AG	3178.9	0.0	0
78	BU	3188.1	357.3	8
79	AG	3188.5	0.0	0
80	BU	3200.5	4252.9	100
81	AG	3203.3	0.0	0
82	BU	3204.0	1126.8	26
83	BU	3209.9	11.2	0
84	AG	3209.9	0.0	0

File: bp-bza-dc-c2h.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -841.993814657  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -841.761228  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C14H12O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.232527	5.466496	0.000000
2	6	-1.207700	4.080184	0.000000
3	6	0.012735	3.402557	0.000000
4	6	1.207700	4.124750	0.000000
5	6	1.178309	5.512128	0.000000
6	6	-0.039881	6.183533	0.000000
7	1	-2.179369	5.989211	0.000000
8	1	-2.122541	3.505602	0.000000
9	1	2.148243	3.594651	0.000000
10	1	2.104779	6.070172	0.000000
11	1	-0.060110	7.265338	0.000000
12	6	0.006039	1.917437	0.000000
13	8	1.202494	1.363730	0.000000
14	1	1.126323	0.363532	0.000000

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
15	8	-1.039061	1.271006	0.000000
16	6	1.232527	-5.466496	0.000000
17	6	1.207700	-4.080184	0.000000
18	6	-0.012735	-3.402557	0.000000
19	6	-1.207700	-4.124750	0.000000
20	6	-1.178309	-5.512128	0.000000
21	6	0.039881	-6.183533	0.000000
22	1	2.179369	-5.989211	0.000000
23	1	2.122541	-3.505602	0.000000
24	1	-2.148243	-3.594651	0.000000
25	1	-2.104779	-6.070172	0.000000
26	1	0.060110	-7.265338	0.000000
27	6	-0.006039	-1.917437	0.000000
28	8	-1.202494	-1.363730	0.000000
29	1	-1.126323	-0.363532	0.000000
30	8	1.039061	-1.271006	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	18.6	1.2	0
2	AU	31.0	0.0	0
3	BU	60.3	4.3	0
4	BG	62.0	0.0	0
5	BG	69.8	0.0	0
6	AU	86.5	0.5	0
7	AG	107.0	0.0	0
8	AG	119.5	0.0	0
9	AU	168.4	0.1	0
10	BG	185.7	0.0	0
11	AG	263.3	0.0	0
12	BU	291.5	73.4	1
13	BU	390.4	0.9	0
14	AU	417.0	0.0	0
15	BG	417.0	0.0	0
16	AG	428.0	0.0	0
17	AU	449.1	3.5	0
18	BG	452.7	0.0	0
19	AG	514.1	0.0	0
20	BU	552.9	113.5	1
21	AG	634.0	0.0	0
22	BU	634.1	0.7	0
23	AG	672.1	0.0	0
24	BU	683.3	44.8	0
25	AU	706.5	20.3	0
26	BG	707.1	0.0	0
27	AU	727.5	133.3	2
28	BG	728.6	0.0	0
29	AG	807.5	0.0	0
30	BU	822.4	25.3	0
31	BG	830.5	0.0	0
32	AU	831.1	7.6	0
33	AU	870.5	0.0	0
34	BG	870.6	0.0	0
35	BG	970.5	0.0	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
36	AU	973.2	2.5	0
37	BG	973.3	0.0	0
38	AU	1005.1	14.8	0
39	BG	1005.7	0.0	0
40	AU	1010.0	144.4	2
41	BU	1023.4	1.8	0
42	AG	1023.5	0.0	0
43	BG	1023.6	0.0	0
44	AU	1023.6	0.0	0
45	BU	1050.6	22.2	0
46	AG	1050.9	0.0	0
47	AG	1104.1	0.0	0
48	BU	1104.3	20.1	0
49	BU	1152.3	13.2	0
50	AG	1156.0	0.0	0
51	BU	1186.9	1.0	0
52	AG	1186.9	0.0	0
53	BU	1202.4	58.5	0
54	AG	1203.6	0.0	0
55	AG	1315.5	0.0	0
56	BU	1324.8	553.0	8
57	AG	1346.3	0.0	0
58	BU	1349.1	265.9	4
59	AG	1356.4	0.0	0
60	BU	1357.0	132.8	2
61	BU	1467.9	145.2	2
62	AG	1484.6	0.0	0
63	BU	1488.2	69.8	1
64	AG	1502.7	0.0	0
65	AG	1531.3	0.0	0
66	BU	1531.7	9.2	0
67	BU	1623.9	49.4	0
68	AG	1624.6	0.0	0
69	BU	1645.9	53.3	0
70	AG	1646.0	0.0	0
71	AG	1682.7	0.0	0
72	BU	1733.6	901.3	14
73	AG	3007.8	0.0	0
74	BU	3117.5	6334.7	100
75	AG	3168.3	0.0	0
76	BU	3168.3	6.9	0
77	AG	3180.7	0.0	0
78	BU	3180.7	23.3	0
79	AG	3190.4	0.0	0
80	BU	3190.4	9.1	0
81	AG	3206.1	0.0	0
82	BU	3206.1	5.5	0
83	BU	3212.2	4.0	0
84	AG	3212.2	0.0	0

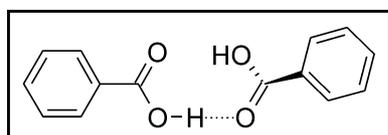
File: m-bza-dc.log  
 Rechenmethode: **RmPWLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -841.523161437  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -841.289915  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C14H12O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.244407	5.473401	0.000000
2	6	-1.210569	4.084363	0.000000
3	6	0.017371	3.415098	0.000000
4	6	1.210569	4.145158	0.000000
5	6	1.171594	5.535202	0.000000
6	6	-0.053818	6.199447	0.000000
7	1	-2.195512	5.990592	0.000000
8	1	-2.122431	3.502742	0.000000
9	1	2.155300	3.619989	0.000000
10	1	2.095099	6.100217	0.000000
11	1	-0.081304	7.282214	0.000000
12	6	0.020297	1.929865	0.000000
13	8	1.223765	1.385106	0.000000
14	1	1.154440	0.391282	0.000000
15	8	-1.016160	1.272146	0.000000
16	6	1.244407	-5.473401	0.000000
17	6	1.210569	-4.084363	0.000000
18	6	-0.017371	-3.415098	0.000000
19	6	-1.210569	-4.145158	0.000000
20	6	-1.171594	-5.535202	0.000000
21	6	0.053818	-6.199447	0.000000
22	1	2.195512	-5.990592	0.000000
23	1	2.122431	-3.502742	0.000000
24	1	-2.155300	-3.619989	0.000000
25	1	-2.095099	-6.100217	0.000000
26	1	0.081304	-7.282214	0.000000
27	6	-0.020297	-1.929865	0.000000
28	8	-1.223765	-1.385106	0.000000
29	1	-1.154440	-0.391282	0.000000
30	8	1.016160	-1.272146	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	18.6	1.3	0
2	AU	36.2	0.0	0
3	BU	59.3	4.3	0
4	BG	61.6	0.0	0
5	BG	66.2	0.0	0
6	AU	86.7	0.5	0
7	AG	105.3	0.0	0
8	AG	115.5	0.0	0
9	AU	168.2	0.1	0
10	BG	181.0	0.0	0
11	AG	260.7	0.0	0
12	BU	284.9	66.4	1
13	BU	390.9	1.3	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
14	BG	416.9	0.0	0
15	AU	417.8	0.0	0
16	AG	426.0	0.0	0
17	AU	446.7	4.3	0
18	BG	449.5	0.0	0
19	AG	515.0	0.0	0
20	BU	548.0	92.7	1
21	AG	635.4	0.0	0
22	BU	635.5	0.6	0
23	AG	672.2	0.0	0
24	BU	681.8	50.7	0
25	AU	700.7	19.5	0
26	BG	701.2	0.0	0
27	AU	729.1	158.4	2
28	BG	730.0	0.0	0
29	AG	808.0	0.0	0
30	BU	819.9	23.7	0
31	BG	830.7	0.0	0
32	AU	831.7	11.1	0
33	AU	871.5	0.0	0
34	BG	871.6	0.0	0
35	BG	887.5	0.0	0
36	BG	970.1	0.0	0
37	AU	970.4	6.9	0
38	AU	980.0	209.4	3
39	BG	1007.5	0.0	0
40	AU	1007.8	0.9	0
41	BG	1018.5	0.0	0
42	AU	1018.9	0.0	0
43	BU	1023.3	1.4	0
44	AG	1023.5	0.0	0
45	BU	1051.5	25.4	0
46	AG	1051.9	0.0	0
47	AG	1106.0	0.0	0
48	BU	1106.1	23.4	0
49	BU	1154.2	20.1	0
50	AG	1157.2	0.0	0
51	BU	1189.0	1.6	0
52	AG	1189.0	0.0	0
53	BU	1204.1	62.2	1
54	AG	1205.2	0.0	0
55	AG	1316.1	0.0	0
56	BU	1323.8	616.1	11
57	AG	1347.7	0.0	0
58	BU	1349.6	226.3	4
59	AG	1356.4	0.0	0
60	BU	1356.9	114.0	2
61	BU	1459.3	201.9	3
62	AG	1480.9	0.0	0
63	BU	1489.1	59.5	1
64	AG	1493.5	0.0	0
65	AG	1532.6	0.0	0
66	BU	1533.4	14.6	0
67	BU	1630.4	51.1	0
68	AG	1631.1	0.0	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
69	BU	1652.5	60.2	1
70	AG	1652.6	0.0	0
71	AG	1699.9	0.0	0
72	BU	1744.9	1033.4	19
73	AG	3159.9	0.0	0
74	BU	3180.0	0.1	0
75	AG	3180.0	0.0	0
76	BU	3192.4	22.1	0
77	AG	3192.4	0.0	0
78	BU	3201.8	82.8	1
79	AG	3202.0	0.0	0
80	BU	3216.3	33.1	0
81	AG	3216.4	0.0	0
82	BU	3223.0	10.4	0
83	AG	3223.0	0.0	0
84	BU	3249.3	5429.2	100

Übergangszustand **12d**

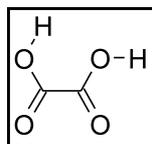
File: bp-bza-ts.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP) -841.976547851  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE -841.744548  
 Dipolmomente: X=1.5263 Y=1.3360 Z=-0.0131 Gesamt=2.0284  
 Framework: C1[X(C14H12O4)]  
 Imaginäre Freq.: **-11.5 cm<sup>-1</sup>**

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	3.155751	2.100706	-0.882861
2	6	2.602752	0.833516	-0.979674
3	6	4.111296	2.369501	0.092378
4	1	2.842471	2.879123	-1.564900
5	6	3.004279	-0.173359	-0.099401
6	6	4.513442	1.369700	0.971782
7	1	1.858729	0.609684	-1.730118
8	1	4.541390	3.359372	0.167936
9	6	3.963367	0.099694	0.878807
10	1	5.254056	1.581054	1.730886
11	6	2.390856	-1.512396	-0.234062
12	1	4.268162	-0.679514	1.560860
13	8	2.883015	-2.422648	0.623436
14	8	1.530913	-1.807905	-1.042060
15	1	2.387438	-3.241387	0.476222
16	6	-4.776238	0.648983	1.396888
17	6	-3.482011	0.156781	1.319600
18	6	-5.498984	0.890904	0.232452
19	1	-5.223022	0.843951	2.362570
20	6	-2.900388	-0.096601	0.076686
21	6	-4.923984	0.639434	-1.008601

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
22	1	-2.902647	-0.039173	2.210506
23	1	-6.509153	1.274191	0.292407
24	6	-3.628278	0.146988	-1.089093
25	1	-5.485913	0.826705	-1.913844
26	6	-1.507232	-0.625873	0.042789
27	1	-3.175381	-0.051742	-2.048786
28	8	-1.047163	-0.820544	-1.203280
29	8	-0.850402	-0.857816	1.034000
30	1	-0.134800	-1.178831	-1.146645

File: m-bza-ts.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -841.506829285  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -841.274219  
 Dipolmomente: X=1.3802 Y=1.3014 Z=-0.2624 Gesamt=1.9151  
 Framework: C1[X(C14H12O4)]  
 Imaginäre Freq.: **-10.1 cm-1**

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.911563	2.047889	-1.032584
2	6	2.435470	0.744232	-0.982552
3	6	3.007225	-0.175282	-0.096899
4	6	4.057804	0.220189	0.738936
5	6	4.529543	1.526571	0.685562
6	6	3.958280	2.439727	-0.198960
7	1	2.467260	2.758370	-1.717724
8	1	1.623780	0.428456	-1.623526
9	1	4.493956	-0.492467	1.424422
10	1	5.340345	1.833173	1.333926
11	1	4.327524	3.457121	-0.237780
12	6	2.475392	-1.555838	-0.070464
13	8	3.130148	-2.371802	0.774301
14	1	2.690401	-3.232526	0.738851
15	8	1.546430	-1.962708	-0.741458
16	6	-4.741757	0.942519	1.268620
17	6	-3.427611	0.490158	1.262137
18	6	-2.890849	-0.088399	0.108194
19	6	-3.680460	-0.210996	-1.039393
20	6	-4.995730	0.242996	-1.029291
21	6	-5.527225	0.819262	0.122915
22	1	-5.154850	1.389960	2.163993
23	1	-2.801167	0.574718	2.140079
24	1	-3.260127	-0.660984	-1.927750
25	1	-5.605885	0.146587	-1.918668
26	1	-6.551626	1.171285	0.128646
27	6	-1.477192	-0.563088	0.147038
28	8	-1.065741	-1.088661	-1.017370
29	1	-0.140011	-1.394994	-0.918955
30	8	-0.765376	-0.484122	1.123894

**Oxalsäure**Monomer cCt **13a**

File: b-oxal-mo-cCt.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -378.446166068  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -378.397663  
 Dipolmomente: X=4.4910 Y=2.1298 Z=0.0000 Gesamt=4.9704  
 Framework: CS[SG(C2H2O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.764721	0.000000
2	6	-0.310061	-0.757807	0.000000
3	8	-0.828684	1.620776	0.000000
4	8	-1.431302	-1.159778	0.000000
5	8	0.765852	-1.563105	0.000000
6	1	1.578198	-1.036065	0.000000
7	8	1.341238	0.983918	0.000000
8	1	1.505343	1.940096	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	50.7	0.5	0
2	A'	279.1	4.6	1
3	A''	425.2	0.2	0
4	A'	427.9	4.5	1
5	A''	518.2	247.4	60
6	A'	528.2	10.5	2
7	A''	624.3	38.6	9
8	A'	656.6	49.0	11
9	A'	781.3	7.6	1
10	A''	818.9	2.8	0
11	A'	1121.9	215.6	52
12	A'	1152.6	80.0	19
13	A'	1314.6	129.0	31
14	A'	1342.3	358.3	87
15	A'	1862.4	102.9	25
16	A'	1876.5	410.4	100
17	A'	3748.3	117.7	28
18	A'	3761.5	96.8	23

File: bp-oxal-mo-cCt-cs.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -378.472899228  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -378.424231  
 Dipolmomente: X=4.4103 Y=1.9259 Z=0.0000 Gesamt=4.8125  
 Framework: CS[SG(C2H2O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.761365	0.000000
2	6	-0.309153	-0.756913	0.000000
3	8	-0.828502	1.616765	0.000000
4	8	-1.429331	-1.159802	0.000000
5	8	0.766884	-1.560225	0.000000
6	1	1.575381	-1.028603	0.000000
7	8	1.339950	0.985579	0.000000
8	1	1.487528	1.943353	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	56.3	0.2	0
2	A'	277.8	4.9	1
3	A''	427.3	0.4	0
4	A'	427.8	4.6	1
5	A'	527.6	9.7	2
6	A''	561.0	205.5	61
7	A''	634.3	36.6	10
8	A'	655.2	48.2	14
9	A'	781.8	6.9	2
10	A''	828.3	2.5	0
11	A'	1122.7	217.9	64
12	A'	1161.7	53.3	15
13	A'	1322.8	168.9	50
14	A'	1349.8	301.0	89
15	A'	1862.1	109.8	32
16	A'	1878.2	336.6	100
17	A'	3738.4	108.3	32
18	A'	3749.6	83.5	24

File: m-oxal-mo-cCt.log  
 Rechenmethode: **RmPWLLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -378.312829416  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -378.263968  
 Dipolmomente: X=4.5078 Y=2.1384 Z=0.0000 Gesamt=4.9893  
 Framework: CS[SG(C2H2O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.763870	0.000000
2	6	-0.308976	-0.757316	0.000000
3	8	-0.828711	1.617147	0.000000
4	8	-1.428468	-1.158224	0.000000
5	8	0.765498	-1.560513	0.000000
6	1	1.577786	-1.036699	0.000000
7	8	1.338233	0.983983	0.000000
8	1	1.503662	1.938231	0.000000

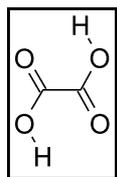
Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	51.5	0.5	0
2	A'	281.7	4.6	1
3	A''	428.6	0.1	0
4	A'	431.8	4.6	1

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
5	A''	517.8	248.4	58
6	A'	532.1	10.5	2
7	A''	624.5	42.6	9
8	A'	661.5	50.7	11
9	A'	788.9	7.4	1
10	A''	825.7	2.7	0
11	A'	1134.3	212.6	49
12	A'	1163.3	82.6	19
13	A'	1323.4	136.7	32
14	A'	1354.7	365.0	85
15	A'	1876.4	100.1	23
16	A'	1891.7	426.9	99
17	A'	3772.3	120.1	28
18	A'	3787.3	107.2	25

File: mp-oxal-mo-cCt-cl.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -376.474532817  
 E(MP2): -377.5396607  
 E(MP2)+ZPE: -377.490928  
 Dipolmomente: X=3.3368 Y=4.1388 Z=0.1680 Gesamt=5.3191  
 Framework: C1[X(C2H2O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.741129	-0.173170	0.003214
2	6	-0.804771	-0.122171	-0.005757
3	8	1.382702	-1.184675	0.076194
4	8	-1.455899	-1.127971	-0.071624
5	8	-1.342779	1.108577	0.068853
6	1	-0.626724	1.756487	0.118379
7	8	1.263583	1.080887	-0.082061
8	1	2.227719	1.001006	-0.034022

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	52.1	0.4	0
2	284.0	4.9	1
3	412.5	0.6	0
4	435.6	6.3	1
5	492.2	231.3	62
6	539.6	14.6	3
7	605.9	41.1	11
8	654.4	46.8	12
9	792.1	11.3	3
10	804.3	6.3	1
11	1134.7	196.4	52
12	1172.6	77.7	20
13	1329.5	126.7	34
14	1378.9	370.8	99
15	1834.4	47.1	12
16	1846.0	358.0	96
17	3804.3	129.1	34
18	3817.7	120.6	32

Monomer cTc **13b**

File: b-oxal-mo-cTc-c2h.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -378.454049985  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -378.404682  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C2H2O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.774270	0.000000
2	6	0.000000	-0.774270	0.000000
3	8	1.028349	1.397681	0.000000
4	8	-1.028349	-1.397681	0.000000
5	8	1.214664	-1.303112	0.000000
6	1	1.858129	-0.570741	0.000000
7	8	-1.214664	1.303112	0.000000
8	1	-1.858129	0.570741	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	120.3	6.8	0
2	BU	260.9	53.7	6
3	AG	404.4	0.0	0
4	AU	462.0	67.3	8
5	AG	560.7	0.0	0
6	BU	675.2	22.5	2
7	BG	679.0	0.0	0
8	AU	688.1	213.3	26
9	BG	818.0	0.0	0
10	AG	822.4	0.0	0
11	BU	1197.7	27.0	3
12	AG	1216.7	0.0	0
13	BU	1329.0	812.6	100
14	AG	1428.0	0.0	0
15	AG	1831.1	0.0	0
16	BU	1851.2	526.6	64
17	AG	3661.1	0.0	0
18	BU	3664.0	267.0	32

File: bp-oxal-mo-cTc.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -378.482586573  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -378.433010  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C2H2O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.771139	0.000000
2	6	0.000000	-0.771139	0.000000
3	8	1.026162	1.397309	0.000000
4	8	-1.026162	-1.397309	0.000000
5	8	1.216466	-1.294433	0.000000
6	1	1.848896	-0.552290	0.000000
7	8	-1.216466	1.294433	0.000000
8	1	-1.848896	0.552290	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	126.0	6.4	0
2	BU	262.4	54.9	6
3	AG	405.3	0.0	0
4	AU	465.4	50.4	6
5	AG	563.6	0.0	0
6	BU	676.1	21.3	2
7	BG	709.9	0.0	0
8	AU	712.1	182.5	22
9	AG	825.1	0.0	0
10	BG	838.6	0.0	0
11	BU	1207.2	20.7	2
12	AG	1227.2	0.0	0
13	BU	1337.3	812.0	100
14	AG	1439.6	0.0	0
15	AG	1832.7	0.0	0
16	BU	1855.9	453.3	55
17	AG	3637.1	0.0	0
18	BU	3640.3	247.8	30

File: m-oxal-mo-cTc-c2h.log  
 Rechenmethode: **RmPWLLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -378.320598601  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -378.270880  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C2H2O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.773674	0.000000
2	6	0.000000	-0.773674	0.000000
3	8	1.027316	1.394682	0.000000
4	8	-1.027316	-1.394682	0.000000
5	8	1.212042	-1.303244	0.000000
6	1	1.858719	-0.576546	0.000000
7	8	-1.212042	1.303244	0.000000
8	1	-1.858719	0.576546	0.000000

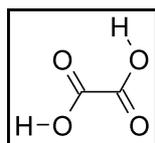
Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	120.1	6.9	0
2	BU	264.1	53.2	6
3	AG	408.7	0.0	0
4	AU	466.0	69.9	8

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
5	AG	564.3	0.0	0
6	BG	675.6	0.0	0
7	BU	680.1	23.0	2
8	AU	684.6	216.5	26
9	BG	824.6	0.0	0
10	AG	829.5	0.0	0
11	BU	1206.2	25.1	3
12	AG	1225.7	0.0	0
13	BU	1337.3	824.8	100
14	AG	1439.5	0.0	0
15	AG	1846.5	0.0	0
16	BU	1864.4	546.4	66
17	AG	3692.0	0.0	0
18	BU	3694.8	274.3	33

File: mp-oxal-mo-cTc-c2h.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -376.482128151  
 E(MP2): -377.5467539  
 E(MP2)+ZPE: -377.497215  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C2H2O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.771686	0.000000
2	6	0.000000	-0.771686	0.000000
3	8	1.034582	1.398944	0.000000
4	8	-1.034582	-1.398944	0.000000
5	8	1.217554	-1.299768	0.000000
6	1	1.838135	-0.550046	0.000000
7	8	-1.217554	1.299768	0.000000
8	1	-1.838135	0.550046	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	115.5	5.4	0
2	BU	263.1	51.4	6
3	AG	410.1	0.0	0
4	AU	458.6	71.4	9
5	AG	566.2	0.0	0
6	BG	630.1	0.0	0
7	AU	661.5	202.0	26
8	BU	673.4	23.2	2
9	BG	791.1	0.0	0
10	AG	831.9	0.0	0
11	BU	1207.9	23.7	3
12	AG	1231.4	0.0	0
13	BU	1348.4	774.6	100
14	AG	1460.8	0.0	0
15	AG	1815.4	0.0	0
16	BU	1842.0	429.5	55
17	AG	3716.5	0.0	0
18	BU	3721.0	290.9	37

Monomer cTt **13c**

File: b-oxal-mo-cTt.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -378.450631241  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -378.401546  
 Dipolmomente: X=0.8686 Y=3.1912 Z=0.0000 Gesamt=3.3073  
 Framework: CS[SG(C2H2O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-0.059076	-0.809413	0.000000
2	6	0.000000	0.738936	0.000000
3	8	-1.071321	-1.441190	0.000000
4	8	1.055816	1.326654	0.000000
5	8	-1.199800	1.303717	0.000000
6	1	-1.083487	2.267154	0.000000
7	8	1.167924	-1.342566	0.000000
8	1	1.816985	-0.617209	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	84.9	4.9	1
2	A'	266.1	15.0	4
3	A'	420.6	14.3	4
4	A''	435.8	1.4	0
5	A'	544.9	9.6	3
6	A''	648.3	274.3	87
7	A''	656.2	0.5	0
8	A'	658.2	48.1	15
9	A'	801.3	23.7	7
10	A''	826.1	6.1	1
11	A'	1160.1	180.0	57
12	A'	1202.1	157.0	50
13	A'	1329.1	311.9	100
14	A'	1418.7	27.4	8
15	A'	1793.4	307.0	98
16	A'	1871.1	289.4	92
17	A'	3681.2	125.8	40
18	A'	3747.7	98.5	31

File: bp-oxal-mo-cTt.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -378.478283387  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -378.429049  
 Dipolmomente: X=0.8077 Y=3.0269 Z=0.0000 Gesamt=3.1329  
 Framework: CS[SG(C2H2O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-0.059507	-0.808620	0.000000
2	6	0.000000	0.735293	0.000000

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
3	8	-1.070525	-1.441456	0.000000
4	8	1.054808	1.322822	0.000000
5	8	-1.199066	1.301749	0.000000
6	1	-1.075024	2.263624	0.000000
7	8	1.168001	-1.335902	0.000000
8	1	1.806324	-0.601362	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A"	88.7	4.9	1
2	A'	266.4	15.7	5
3	A'	421.3	15.0	4
4	A"	438.2	0.9	0
5	A'	545.6	9.4	3
6	A'	658.0	46.3	14
7	A"	660.2	160.7	51
8	A"	684.8	76.1	24
9	A'	802.3	22.8	7
10	A"	838.7	4.4	1
11	A'	1167.3	210.5	67
12	A'	1205.4	108.9	35
13	A'	1340.1	310.2	100
14	A'	1429.9	35.6	11
15	A'	1794.9	263.2	84
16	A'	1873.9	256.6	82
17	A'	3662.1	118.9	38
18	A'	3733.7	88.4	28

File: m-oxal-mo-cTt.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -378.317264046  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -378.267833  
 Dipolmomente: X=0.8799 Y=3.1903 Z=0.0000 Gesamt=3.3094  
 Framework: CS[SG(C2H2O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-0.058235	-0.808306	0.000000
2	6	0.000000	0.738571	0.000000
3	8	-1.069936	-1.437163	0.000000
4	8	1.054062	1.325014	0.000000
5	8	-1.197898	1.301764	0.000000
6	1	-1.084863	2.263875	0.000000
7	8	1.165810	-1.342459	0.000000
8	1	1.817967	-0.622708	0.000000

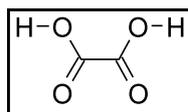
Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A"	84.8	4.9	1
2	A'	268.3	14.9	4
3	A'	424.1	14.2	4
4	A"	439.0	1.4	0
5	A'	548.8	9.5	2
6	A"	646.6	267.3	82

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
7	A''	654.5	13.5	4
8	A'	662.7	49.7	15
9	?A	808.6	23.9	7
10	?A	832.8	5.7	1
11	A'	1170.1	178.5	55
12	A'	1212.4	160.8	49
13	A'	1337.2	318.6	98
14	A'	1430.3	26.6	8
15	A'	1808.2	322.7	100
16	A'	1885.6	294.2	91
17	A'	3712.0	129.4	40
18	A'	3771.6	104.1	32

File: mp-oxal-mo-cTt.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -376.479884856  
 E(MP2): -377.5437393  
 E(MP2)+ZPE: -377.494487  
 Dipolmomente: X=0.9063 Y=3.3672 Z=0.0000 Gesamt=3.4870  
 Framework: CS[SG(C2H2O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-0.055022	-0.804943	0.000000
2	6	0.000000	0.736813	0.000000
3	8	-1.074158	-1.441310	0.000000
4	8	1.058534	1.333948	0.000000
5	8	-1.208388	1.289344	0.000000
6	1	-1.076480	2.249745	0.000000
7	8	1.174649	-1.337619	0.000000
8	1	1.801525	-0.595869	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	77.8	3.5	1
2	A'	268.3	13.6	4
3	A'	426.6	14.4	4
4	A''	430.6	1.0	0
5	A'	550.6	9.8	3
6	A''	599.6	219.5	72
7	A''	630.4	47.5	15
8	A'	657.4	45.3	14
9	A''	802.2	7.6	2
10	A'	813.6	23.4	7
11	A'	1172.1	192.0	63
12	A'	1218.5	139.4	45
13	A'	1344.6	303.3	100
14	A'	1450.2	23.5	7
15	A'	1789.9	240.0	79
16	A'	1846.5	250.4	82
17	A'	3745.9	135.8	44
18	A'	3794.6	111.3	36

Monomer tCt **13d**

File: b-oxal-mo-tCt-c2.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -378.448455417  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -378.399818  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=2.7689 Gesamt=2.7689  
 Framework: C2[X(C2H2O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.769429	-0.121208
2	6	0.000000	-0.769429	-0.121208
3	8	0.348713	1.415316	-1.067314
4	8	-0.348713	-1.415316	-1.067314
5	8	0.457712	-1.268883	1.037622
6	1	0.453885	-2.236785	0.964785
7	8	-0.457712	1.268883	1.037622
8	1	-0.453885	2.236785	0.964785

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A	16.8	0.4	0
2	A	253.3	1.3	0
3	B	325.7	7.2	1
4	A	418.1	7.5	1
5	B	565.5	63.5	13
6	A	612.1	29.1	6
7	B	642.3	123.1	26
8	B	712.5	149.8	32
9	A	786.5	7.3	1
10	A	833.6	8.1	1
11	B	1148.6	218.9	47
12	A	1174.0	343.6	74
13	B	1297.1	16.3	3
14	A	1405.0	85.1	18
15	B	1826.5	157.4	34
16	A	1850.6	460.9	100
17	A	3740.5	9.8	2
18	B	3740.6	149.9	32

File: bp-oxal-mo-tCt-c2.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -378.474861929  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -378.426153  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=2.8636 Gesamt=2.8636  
 Framework: C2[X(C2H2O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.769436	-0.125035
2	6	0.000000	-0.769436	-0.125035
3	8	0.233555	1.409792	-1.107647

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
4	8	-0.233555	-1.409792	-1.107647
5	8	0.307511	-1.278697	1.077821
6	1	0.306163	-2.244540	0.988819
7	8	-0.307511	1.278697	1.077821
8	1	-0.306163	2.244540	0.988819

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A	16.7	0.2	0
2	A	260.6	1.0	0
3	B	364.3	7.8	1
4	A	423.1	7.8	1
5	B	551.1	32.4	7
6	A	614.9	11.6	2
7	B	644.6	97.5	22
8	B	699.3	190.7	43
9	A	785.0	8.2	1
10	A	837.7	3.6	0
11	B	1154.0	181.8	41
12	A	1170.4	352.1	80
13	B	1307.5	20.0	4
14	A	1412.6	57.5	13
15	B	1832.8	81.0	18
16	A	1851.2	438.8	100
17	A	3727.1	9.1	2
18	B	3727.7	132.7	30

File: m-oxal-mo-tCt-c2.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -378.315129708  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -378.266095  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=2.8417 Gesamt=2.8417  
 Framework: C2[X(C2H2O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.769763	-0.123821
2	6	0.000000	-0.769763	-0.123821
3	8	0.276057	1.410444	-1.094376
4	8	-0.276057	-1.410444	-1.094376
5	8	0.361732	-1.273907	1.063587
6	1	0.357824	-2.239859	0.989234
7	8	-0.361732	1.273907	1.063587
8	1	-0.357824	2.239859	0.989234

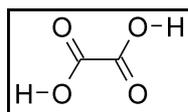
Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A	17.8	0.2	0
2	A	260.2	1.3	0
3	B	352.5	8.1	1
4	A	425.1	8.1	1
5	B	559.1	50.3	10
6	A	612.2	19.4	3
7	B	649.3	118.4	23

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
8	B	702.0	181.9	36
9	A	793.1	7.3	1
10	A	842.0	4.8	0
11	B	1163.4	201.2	40
12	A	1184.5	368.0	74
13	B	1306.1	17.0	3
14	A	1416.5	88.1	17
15	B	1841.8	123.7	25
16	A	1864.7	494.3	100
17	A	3766.5	11.4	2
18	B	3766.7	158.4	32

File: mp-oxal-mo-tCt-c2.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -376.478739680  
 E(MP2): -377.5425955  
 E(MP2)+ZPE: -377.493460  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=3.0633 Gesamt=3.0633  
 Framework: C2[X(C2H2O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.766731	-0.123531
2	6	0.000000	-0.766731	-0.123531
3	8	0.255626	1.412387	-1.108788
4	8	-0.255626	-1.412387	-1.108788
5	8	0.335016	-1.267232	1.078270
6	1	0.317799	-2.231977	0.985324
7	8	-0.335016	1.267232	1.078270
8	1	-0.317799	2.231977	0.985324

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A	38.1	0.1	0
2	A	262.5	1.1	0
3	B	359.1	9.2	2
4	A	429.6	8.7	2
5	B	555.3	52.9	13
6	A	627.5	16.4	4
7	B	644.6	112.3	27
8	B	688.1	169.0	41
9	A	799.6	3.2	0
10	A	833.3	3.0	0
11	B	1164.7	191.1	47
12	A	1192.5	350.5	86
13	B	1307.1	15.4	3
14	A	1439.5	121.0	29
15	B	1810.3	74.9	18
16	A	1830.6	406.3	100
17	A	3792.6	15.7	3
18	B	3793.0	171.9	42

Monomer tTt **13e**

File: b-oxal-mo-tTt.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -378.448986124  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -378.400134  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C2H2O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.772199	0.000000
2	6	0.000000	-0.772199	0.000000
3	8	0.990238	1.448075	0.000000
4	8	-0.990238	-1.448075	0.000000
5	8	1.256027	-1.235318	0.000000
6	1	1.208868	-2.203847	0.000000
7	8	-1.256027	1.235318	0.000000
8	1	-1.208868	2.203847	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	13.9	4.0	0
2	BU	264.8	6.0	0
3	AU	420.4	17.5	2
4	AG	425.1	0.0	0
5	AG	528.7	0.0	0
6	BG	610.1	0.0	0
7	BU	641.6	128.8	20
8	AU	666.2	268.5	41
9	AG	787.2	0.0	0
10	BG	839.2	0.0	0
11	BU	1139.0	523.6	81
12	AG	1206.3	0.0	0
13	BU	1324.6	28.6	4
14	AG	1398.8	0.0	0
15	BU	1825.9	640.0	100
16	AG	1835.6	0.0	0
17	AG	3758.0	0.0	0
18	BU	3758.3	188.2	29

File: bp-oxal-mo-tTt-c2h.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -378.475674138  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -378.426775  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C2H2O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.770689	0.000000
2	6	0.000000	-0.770689	0.000000
3	8	0.989254	1.445882	0.000000

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
4	8	-0.989254	-1.445882	0.000000
5	8	1.255212	-1.234883	0.000000
6	1	1.199960	-2.202416	0.000000
7	8	-1.255212	1.234883	0.000000
8	1	-1.199960	2.202416	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	21.4	4.3	0
2	BU	264.0	5.8	1
3	AU	421.4	12.9	2
4	AG	424.4	0.0	0
5	AG	527.7	0.0	0
6	BG	623.7	0.0	0
7	BU	639.0	128.9	23
8	AU	675.8	243.9	43
9	AG	786.5	0.0	0
10	BG	841.1	0.0	0
11	BU	1138.3	496.4	89
12	AG	1204.8	0.0	0
13	BU	1334.2	29.1	5
14	AG	1408.8	0.0	0
15	BU	1828.8	555.7	100
16	AG	1837.1	0.0	0
17	AG	3743.3	0.0	0
18	BU	3743.7	169.3	30

File: m-oxal-mo-tTt.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -378.315720875  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -378.266522  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C2H2O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.771471	0.000000
2	6	0.000000	-0.771471	0.000000
3	8	0.989805	1.444470	0.000000
4	8	-0.989805	-1.444470	0.000000
5	8	1.253116	-1.235103	0.000000
6	1	1.207835	-2.202042	0.000000
7	8	-1.253116	1.235103	0.000000
8	1	-1.207835	2.202042	0.000000

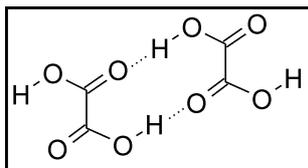
Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	16.8	4.0	0
2	BU	266.6	6.0	0
3	AU	423.5	18.0	2
4	AG	428.4	0.0	0
5	AG	532.7	0.0	0
6	BG	609.7	0.0	0
7	BU	646.1	131.3	19

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
8	AU	667.3	273.1	41
9	AG	794.3	0.0	0
10	BG	845.9	0.0	0
11	BU	1150.2	529.2	80
12	AG	1217.0	0.0	0
13	BU	1333.1	30.5	4
14	AG	1410.7	0.0	0
15	BU	1839.7	659.3	100
16	AG	1850.6	0.0	0
17	AG	3781.5	0.0	0
18	BU	3781.8	198.3	30

File: mp-oxal-mo-tTt-c2.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -376.479436459  
 E(MP2): -377.5430259  
 E(MP2)+ZPE: -377.493910  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=-0.6395 Gesamt=0.6395  
 Framework: C2[X(C2H2O4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.767121	0.020591
2	6	0.000000	-0.767121	0.020591
3	8	0.972619	1.445297	0.244756
4	8	-0.972619	-1.445297	0.244756
5	8	1.234367	-1.225946	-0.235831
6	1	1.176876	-2.192258	-0.194945
7	8	-1.234367	1.225946	-0.235831
8	1	-1.176876	2.192258	-0.194945

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A	32.2	3.4	0
2	B	259.7	4.8	0
3	A	375.1	11.1	2
4	A	427.4	0.0	0
5	A	559.9	51.1	9
6	B	590.9	17.3	3
7	B	639.3	114.8	22
8	A	671.8	203.7	39
9	A	802.0	0.2	0
10	B	829.9	2.2	0
11	B	1149.2	509.7	99
12	A	1220.9	16.5	3
13	B	1335.0	29.7	5
14	A	1430.3	9.6	1
15	B	1810.9	513.4	100
16	A	1822.9	27.0	5
17	A	3800.8	0.4	0
18	B	3801.4	205.4	40

Dimer cTc(P)cTc **13f**

File: b-oxal-cTc2cTc-c2h.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -756.922762350  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -756.823200  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-0.748300	2.197983	0.000000
2	6	0.748300	2.616416	0.000000
3	8	-1.122380	1.051675	0.000000
4	8	1.012314	3.794364	0.000000
5	8	1.636169	1.651173	0.000000
6	1	1.244049	0.751478	0.000000
7	8	-1.560538	3.237629	0.000000
8	1	-0.999191	4.039011	0.000000
9	6	-0.748300	-2.616416	0.000000
10	6	0.748300	-2.197983	0.000000
11	8	-1.012314	-3.794364	0.000000
12	8	1.122380	-1.051675	0.000000
13	8	1.560538	-3.237629	0.000000
14	1	0.999191	-4.039011	0.000000
15	8	-1.636169	-1.651173	0.000000
16	1	-1.244049	-0.751478	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	16.6	0.4	0
2	AU	33.8	0.7	0
3	BG	67.7	0.0	0
4	AG	103.6	0.0	0
5	BU	104.5	15.5	0
6	BG	109.9	0.0	0
7	AG	117.3	0.0	0
8	AU	128.6	6.1	0
9	AG	266.0	0.0	0
10	BU	270.7	77.1	3
11	BU	410.5	7.3	0
12	AG	416.0	0.0	0
13	BG	458.2	0.0	0
14	AU	465.3	123.1	6
15	AG	556.6	0.0	0
16	BU	563.4	8.4	0
17	AG	684.5	0.0	0
18	BU	694.0	28.5	1
19	BG	730.7	0.0	0
20	AU	732.9	76.8	3
21	BG	737.8	0.0	0
22	AU	778.4	289.3	14

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
23	BU	827.1	1.3	0
24	BG	827.3	0.0	0
25	AU	830.0	36.2	1
26	AG	836.6	0.0	0
27	AG	1204.0	0.0	0
28	BU	1212.8	64.2	3
29	BU	1218.1	127.1	6
30	AG	1221.8	0.0	0
31	AG	1313.0	0.0	0
32	BU	1326.4	1768.7	86
33	AG	1425.3	0.0	0
34	BU	1438.6	16.7	0
35	AG	1809.2	0.0	0
36	BU	1814.0	546.3	26
37	BU	1834.6	990.9	48
38	AG	1846.7	0.0	0
39	AG	3525.2	0.0	0
40	BU	3537.0	2034.9	100
41	BU	3603.6	293.9	14
42	AG	3604.2	0.0	0

File: bp-oxal-cTc2cTc.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -756.979635448  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -756.879710  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-0.746401	2.190740	0.000000
2	6	0.746401	2.602666	0.000000
3	8	-1.131532	1.049156	0.000000
4	8	1.015095	3.779367	0.000000
5	8	1.630518	1.635610	0.000000
6	1	1.232752	0.738166	0.000000
7	8	-1.547336	3.238272	0.000000
8	1	-0.967665	4.027184	0.000000
9	6	-0.746401	-2.602666	0.000000
10	6	0.746401	-2.190740	0.000000
11	8	-1.015095	-3.779367	0.000000
12	8	1.131532	-1.049156	0.000000
13	8	1.547336	-3.238272	0.000000
14	1	0.967665	-4.027184	0.000000
15	8	-1.630518	-1.635610	0.000000
16	1	-1.232752	-0.738166	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	19.4	0.3	0
2	AU	31.2	0.4	0
3	BG	72.4	0.0	0
4	AG	100.2	0.0	0
5	BU	108.3	16.5	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
6	BG	113.0	0.0	0
7	AG	119.2	0.0	0
8	AU	132.1	6.4	0
9	AG	267.2	0.0	0
10	BU	270.7	74.0	3
11	BU	412.7	9.7	0
12	AG	418.3	0.0	0
13	BG	463.3	0.0	0
14	AU	468.4	95.6	4
15	AG	558.3	0.0	0
16	BU	565.5	9.4	0
17	AG	685.6	0.0	0
18	BU	696.2	25.6	1
19	BG	766.0	0.0	0
20	AU	766.0	118.7	5
21	BG	773.5	0.0	0
22	AU	798.8	183.4	8
23	BU	829.4	1.5	0
24	AG	839.6	0.0	0
25	BG	845.1	0.0	0
26	AU	847.9	24.2	1
27	AG	1212.9	0.0	0
28	BU	1222.0	29.6	1
29	BU	1231.5	163.1	7
30	AG	1232.8	0.0	0
31	AG	1320.1	0.0	0
32	BU	1333.7	1733.1	82
33	AG	1435.1	0.0	0
34	BU	1448.7	18.2	0
35	AG	1810.6	0.0	0
36	BU	1816.1	376.8	17
37	BU	1838.6	984.5	47
38	AG	1850.0	0.0	0
39	AG	3491.1	0.0	0
40	BU	3505.9	2093.7	100
41	BU	3571.8	278.6	13
42	AG	3572.6	0.0	0

File: m-oxal-cTc2cTc.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -756.658186824  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -756.557876  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-0.747530	2.192501	0.000000
2	6	0.747530	2.611555	0.000000
3	8	-1.117473	1.046845	0.000000
4	8	1.009674	3.787666	0.000000
5	8	1.634059	1.647761	0.000000
6	1	1.245107	0.748883	0.000000
7	8	-1.561422	3.228066	0.000000

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
8	1	-1.008138	4.032282	0.000000
9	6	-0.747530	-2.611555	0.000000
10	6	0.747530	-2.192501	0.000000
11	8	-1.009674	-3.787666	0.000000
12	8	1.117473	-1.046845	0.000000
13	8	1.561422	-3.228066	0.000000
14	1	1.008138	-4.032282	0.000000
15	8	-1.634059	-1.647761	0.000000
16	1	-1.245107	-0.748883	0.000000

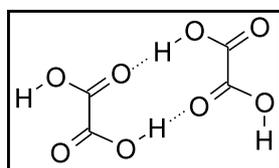
Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	17.0	0.4	0
2	AU	33.8	0.7	0
3	BG	67.4	0.0	0
4	AG	104.3	0.0	0
5	BU	106.7	15.3	0
6	BG	109.9	0.0	0
7	AG	121.7	0.0	0
8	AU	128.6	6.1	0
9	AG	269.1	0.0	0
10	BU	273.5	76.9	3
11	BU	414.5	6.9	0
12	AG	420.2	0.0	0
13	BG	462.4	0.0	0
14	AU	469.6	127.1	6
15	AG	560.2	0.0	0
16	BU	567.3	8.2	0
17	AG	689.3	0.0	0
18	BU	699.0	29.5	1
19	BG	730.0	0.0	0
20	AU	730.3	87.6	4
21	BG	735.4	0.0	0
22	AU	779.8	289.9	14
23	BG	833.3	0.0	0
24	BU	834.4	1.3	0
25	AU	835.7	30.5	1
26	AG	844.1	0.0	0
27	AG	1212.8	0.0	0
28	BU	1222.4	64.7	3
29	BU	1226.7	126.4	6
30	AG	1231.5	0.0	0
31	AG	1322.6	0.0	0
32	BU	1335.4	1794.5	87
33	AG	1437.1	0.0	0
34	BU	1450.9	15.0	0
35	AG	1824.1	0.0	0
36	BU	1828.5	648.9	31
37	BU	1847.8	941.0	45
38	AG	1859.8	0.0	0
39	AG	3554.0	0.0	0
40	BU	3565.7	2060.7	100
41	BU	3636.9	299.6	14
42	AG	3637.6	0.0	0

File: mp-oxal-cTc2cTc-cl.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -752.977590031  
 E(MP2): -755.1094643  
 E(MP2)+ZPE: -755.009475  
 Dipolmomente: X=0.0055 Y=0.0034 Z=0.0122 Gesamt=0.0138  
 Framework: Cl[X(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.201486	0.755924	-0.023003
2	6	2.649914	-0.724126	-0.013956
3	8	1.040626	1.096812	-0.086927
4	8	3.836876	-0.975437	0.021833
5	8	1.690906	-1.625204	-0.052511
6	1	0.809986	-1.203067	-0.055047
7	8	3.221065	1.595772	0.039206
8	1	4.019808	1.035201	0.064254
9	6	-2.649484	0.724131	0.005944
10	6	-2.201615	-0.755941	0.030815
11	8	-3.836241	0.975111	-0.036644
12	8	-1.041095	-1.097082	0.099298
13	8	-3.221743	-1.595844	-0.023762
14	1	-4.020127	-1.035188	-0.056431
15	8	-1.690644	1.625708	0.038971
16	1	-0.809479	1.204439	0.052708

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	9.1	0.3	0
2	24.0	0.4	0
3	51.2	0.0	0
4	93.5	9.7	0
5	100.1	0.0	0
6	107.0	0.0	0
7	111.9	0.0	0
8	122.1	7.2	0
9	266.2	0.0	0
10	270.6	79.9	4
11	413.9	4.5	0
12	420.3	0.0	0
13	456.0	0.0	0
14	463.5	121.7	6
15	561.8	0.0	0
16	568.8	7.6	0
17	659.1	0.0	0
18	674.2	3.5	0
19	682.2	0.0	0
20	689.1	34.5	1
21	702.3	0.1	0
22	728.5	377.9	21
23	798.5	0.0	0
24	801.1	6.4	0
25	837.8	1.1	0
26	845.0	0.0	0

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
27	1212.3	0.0	0
28	1224.8	21.3	1
29	1228.9	125.3	7
30	1236.0	0.1	0
31	1332.1	0.4	0
32	1345.8	1721.9	98
33	1455.4	0.0	0
34	1470.6	6.0	0
35	1802.8	0.0	0
36	1807.3	231.3	13
37	1834.9	1023.2	58
38	1847.7	0.0	0
39	3642.3	4.1	0
40	3649.3	1741.5	100
41	3669.8	246.4	14
42	3672.2	0.8	0

Dimer cTc(P)cTt **13g**

File: b-oxal-cTc2cTt-p.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -756.916640276  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -756.817532  
 Dipolmomente: X=-0.3030 Y=3.1929 Z=0.0000 Gesamt=3.2072  
 Framework: CS[SG(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.812010	2.040370	0.000000
2	6	2.287145	0.562307	0.000000
3	8	2.639243	2.918270	0.000000
4	8	1.529934	-0.374842	0.000000
5	8	3.603110	0.452729	0.000000
6	1	3.968760	1.359255	0.000000
7	8	0.512153	2.235483	0.000000
8	1	0.000000	1.399706	0.000000
9	6	-1.849684	-2.091677	0.000000
10	6	-2.280485	-0.600668	0.000000
11	8	-2.653836	-2.976762	0.000000
12	8	-1.493849	0.321270	0.000000
13	8	-3.595503	-0.459252	0.000000
14	1	-3.802511	0.489160	0.000000
15	8	-0.536394	-2.274909	0.000000
16	1	-0.019032	-1.446011	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	7.4	4.1	0
2	A''	29.5	0.1	0
3	A''	66.3	0.3	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
4	A''	75.4	1.1	0
5	A'	94.6	3.5	0
6	A'	101.2	1.6	0
7	A'	108.1	0.8	0
8	A''	122.2	3.8	0
9	A'	261.8	1.9	0
10	A'	267.7	53.9	4
11	A'	410.8	0.2	0
12	A'	419.6	9.7	0
13	A''	432.2	1.4	0
14	A''	461.4	59.7	5
15	A'	541.0	18.0	1
16	A'	560.3	5.4	0
17	A''	651.3	193.7	16
18	A'	668.3	52.0	4
19	A''	677.8	2.5	0
20	A'	687.6	24.0	2
21	A''	721.9	56.5	4
22	A''	758.6	191.5	16
23	A'	810.6	26.1	2
24	A''	826.0	4.6	0
25	?A	831.0	21.4	1
26	?A	831.2	1.9	0
27	A'	1178.3	94.9	7
28	A'	1199.5	404.7	33
29	A'	1208.4	24.9	2
30	A'	1217.5	10.6	0
31	A'	1291.3	10.4	0
32	A'	1321.7	1193.4	100
33	A'	1411.4	24.5	2
34	A'	1431.0	1.7	0
35	A'	1783.1	645.9	54
36	A'	1817.4	21.4	1
37	A'	1838.9	863.7	72
38	A'	1854.9	37.9	3
39	A'	3555.4	775.1	64
40	A'	3607.2	973.0	81
41	A'	3620.2	29.0	2
42	A'	3743.6	101.8	8

File: bp-oxal-cTc2cTt-p.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -756.972608793  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -756.873160  
 Dipolmomente: X=-0.3389 Y=3.0421 Z=0.0000 Gesamt=3.0609  
 Framework: CS[SG(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.809461	2.024849	0.000000
2	6	2.281093	0.551403	0.000000
3	8	2.637169	2.902001	0.000000
4	8	1.529550	-0.389087	0.000000
5	8	3.597129	0.449453	0.000000

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
6	1	3.946841	1.362725	0.000000
7	8	0.511095	2.222167	0.000000
8	1	0.000000	1.385774	0.000000
9	6	-1.846069	-2.078648	0.000000
10	6	-2.275862	-0.591557	0.000000
11	8	-2.649274	-2.963813	0.000000
12	8	-1.493111	0.331573	0.000000
13	8	-3.591305	-0.450430	0.000000
14	1	-3.792939	0.498532	0.000000
15	8	-0.534154	-2.258946	0.000000
16	1	-0.022419	-1.426659	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A"	9.7	3.6	0
2	A"	27.4	0.0	0
3	A"	67.1	0.0	0
4	A"	77.5	1.3	0
5	A'	96.7	1.8	0
6	A'	99.1	3.9	0
7	A'	109.0	0.8	0
8	A"	124.7	4.3	0
9	A'	262.1	1.8	0
10	A'	268.2	52.5	4
11	A'	412.7	0.3	0
12	A'	420.2	9.9	0
13	A"	437.0	1.4	0
14	A"	465.4	47.0	4
15	A'	541.0	18.3	1
16	A'	562.1	6.0	0
17	A'	668.8	50.2	4
18	A"	669.5	158.8	13
19	A'	689.2	22.1	1
20	A"	725.0	5.6	0
21	A"	755.2	70.0	5
22	A"	777.1	132.3	11
23	A'	811.9	25.0	2
24	A'	833.6	2.0	0
25	A"	842.4	3.6	0
26	A"	844.4	15.5	1
27	A'	1183.5	216.9	18
28	A'	1205.7	241.3	20
29	A'	1217.9	33.1	2
30	A'	1227.2	26.9	2
31	A'	1299.2	6.3	0
32	A'	1329.3	1173.9	100
33	A'	1419.6	30.3	2
34	A'	1440.8	2.0	0
35	A'	1785.1	561.4	47
36	A'	1818.7	14.2	1
37	A'	1842.9	783.5	66
38	A'	1857.8	30.6	2
39	A'	3527.6	754.4	64
40	A'	3579.4	1021.9	87

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
41	A'	3591.5	27.2	2
42	A'	3729.7	92.1	7

File: m-oxal-cTc2cTt-p.log  
 Rechenmethode: **RmPWLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -756.652160449  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -756.552318  
 Dipolmomente: X=-0.2655 Y=3.1986 Z=0.0000 Gesamt=3.2096  
 Framework: CS[SG(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.815692	2.026577	0.000000
2	6	2.281873	0.546986	0.000000
3	8	2.647418	2.897210	0.000000
4	8	1.518597	-0.382791	0.000000
5	8	3.594652	0.427321	0.000000
6	1	3.971360	1.326911	0.000000
7	8	0.519069	2.228838	0.000000
8	1	0.000000	1.399546	0.000000
9	6	-1.852272	-2.076780	0.000000
10	6	-2.276092	-0.585132	0.000000
11	8	-2.661059	-2.954914	0.000000
12	8	-1.485434	0.330807	0.000000
13	8	-3.587870	-0.437297	0.000000
14	1	-3.792318	0.509986	0.000000
15	8	-0.542334	-2.266936	0.000000
16	1	-0.018546	-1.444249	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	6.6	4.2	0
2	A''	29.1	0.1	0
3	A''	66.0	0.3	0
4	A''	75.7	1.1	0
5	A'	98.1	3.5	0
6	A'	102.1	1.8	0
7	A'	113.9	0.6	0
8	A''	122.2	3.8	0
9	A'	264.2	2.0	0
10	A'	270.2	53.7	4
11	A'	414.7	0.1	0
12	A'	423.2	9.8	0
13	A''	436.0	1.4	0
14	A''	465.6	61.4	5
15	A'	545.0	17.4	1
16	A'	564.2	5.6	0
17	A''	652.3	194.2	16
18	A'	673.0	53.2	4
19	A''	678.4	4.4	0
20	A'	692.8	25.1	2
21	A''	719.9	63.0	5
22	A''	760.2	192.0	15
23	A'	817.9	26.3	2
24	A''	832.2	4.6	0

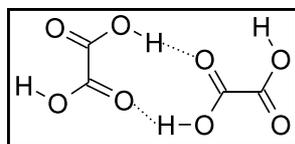
Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
25	?A	837.6	19.7	1
26	?A	838.8	2.0	0
27	A'	1188.5	89.0	7
28	A'	1209.6	418.5	34
29	A'	1217.7	26.0	2
30	A'	1227.4	8.1	0
31	A'	1301.2	10.9	0
32	A'	1330.9	1208.2	100
33	A'	1423.5	23.8	1
34	A'	1443.3	1.3	0
35	A'	1796.9	684.6	56
36	A'	1832.5	24.3	2
37	A'	1852.0	868.6	71
38	A'	1869.2	47.3	3
39	A'	3581.3	792.8	65
40	A'	3633.3	980.8	81
41	A'	3652.1	57.3	4
42	A'	3766.6	107.6	8

File: mp-oxal-cTc2cTt-p-cl.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -752.972964899  
 E(MP2): -755.1043438  
 E(MP2)+ZPE: -755.004415  
 Dipolmomente: X=1.5116 Y=2.7511 Z=1.5854 Gesamt=3.5167  
 Framework: Cl[X(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.592491	0.700260	-0.239979
2	6	2.197970	-0.710144	0.254443
3	8	3.763046	0.953730	-0.432700
4	8	1.048893	-1.043329	0.446295
5	8	3.244248	-1.496544	0.446412
6	1	4.024263	-0.959478	0.212159
7	8	1.597677	1.545989	-0.422609
8	1	0.745463	1.133818	-0.181397
9	6	-2.626250	-0.731589	-0.250259
10	6	-2.231045	0.692020	0.193984
11	8	-3.764027	-1.019614	-0.517470
12	8	-1.082835	1.096868	0.199590
13	8	-3.287098	1.411596	0.547450
14	1	-2.960056	2.292746	0.787003
15	8	-1.600013	-1.575637	-0.331360
16	1	-0.767794	-1.154828	-0.051766

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	13.4	3.3	0
2	26.5	0.5	0
3	47.7	0.4	0
4	72.8	1.1	0
5	100.8	1.0	0
6	108.0	2.0	0

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
7	113.9	3.2	0
8	128.2	2.9	0
9	265.2	3.6	0
10	271.8	47.9	4
11	411.3	3.8	0
12	417.6	1.3	0
13	427.6	6.5	0
14	462.3	59.0	5
15	562.2	14.7	1
16	567.3	12.8	1
17	633.1	141.4	12
18	656.2	42.2	3
19	667.7	58.4	5
20	685.3	22.2	1
21	694.2	7.0	0
22	720.0	211.4	18
23	807.4	0.9	0
24	818.9	13.8	1
25	824.0	24.6	2
26	841.6	1.3	0
27	1189.7	193.4	16
28	1219.8	78.5	6
29	1225.1	200.0	17
30	1239.3	7.2	0
31	1316.5	25.9	2
32	1345.0	1163.7	100
33	1445.0	32.9	2
34	1465.4	0.5	0
35	1789.8	522.0	44
36	1807.5	3.6	0
37	1828.3	619.1	53
38	1841.5	157.3	13
39	3641.7	693.5	59
40	3678.8	456.6	39
41	3697.6	500.6	43
42	3787.6	114.9	9

Dimer cTc(R)cTt **13h**

File: b-oxal-cTc2cTt-r.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -756.923272761  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -756.823587  
 Dipolmomente: X=-2.2137 Y=2.0296 Z=0.0000 Gesamt=3.0033  
 Framework: CS[SG(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.775593	2.070179	0.000000
2	6	-2.421100	0.654232	0.000000
3	8	-2.516559	3.023788	0.000000

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
4	8	-1.791867	-0.377073	0.000000
5	8	-3.736457	0.705262	0.000000
6	1	-3.984973	1.652511	0.000000
7	8	-0.468408	2.140015	0.000000
8	1	0.000000	1.268827	0.000000
9	6	2.827976	-1.757524	0.000000
10	6	1.430056	-1.088738	0.000000
11	8	2.994217	-2.938681	0.000000
12	8	1.346340	0.132444	0.000000
13	8	0.437986	-1.931962	0.000000
14	1	-0.416379	-1.439434	0.000000
15	8	3.812013	-0.852137	0.000000
16	1	3.415207	0.035952	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A"	29.5	2.8	0
2	A"	33.5	0.0	0
3	A"	79.4	3.7	0
4	A"	81.4	1.1	0
5	A'	94.1	3.8	0
6	A'	119.6	5.9	0
7	A"	123.1	3.3	0
8	A'	130.6	1.7	0
9	A'	280.3	29.5	1
10	A'	298.9	63.4	3
11	A'	417.5	2.0	0
12	A'	438.7	7.4	0
13	A"	462.7	43.6	2
14	A"	472.6	40.6	2
15	A'	556.6	2.1	0
16	A'	567.9	12.8	0
17	A"	637.7	101.9	5
18	A'	677.0	31.8	1
19	A'	699.0	13.3	0
20	A"	750.5	63.6	3
21	A"	782.5	41.5	2
22	A'	820.7	26.6	1
23	A"	825.5	5.3	0
24	A'	836.2	0.3	0
25	A"	840.8	1.8	0
26	A"	870.8	219.0	12
27	A'	1171.2	51.5	3
28	A'	1218.2	9.5	0
29	A'	1239.6	92.9	5
30	A'	1267.8	309.8	18
31	A'	1322.4	812.6	47
32	A'	1346.2	263.2	15
33	A'	1433.1	57.1	3
34	A'	1475.1	54.3	3
35	A'	1738.2	385.2	22
36	A'	1810.0	48.4	2
37	A'	1832.8	756.7	44
38	A'	1873.1	270.6	15

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
39	A'	3364.8	771.3	45
40	A'	3456.0	1713.5	100
41	A'	3590.0	156.0	9
42	A'	3691.8	129.6	7

File: bp-oxal-cTc2cTt-r.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -756.979718422  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -756.879668  
 Dipolmomente: X=-1.9753 Y=1.9898 Z=0.0000 Gesamt=2.8038  
 Framework: CS[SG(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.786786	2.033924	0.000000
2	6	-2.422724	0.618839	0.000000
3	8	-2.535509	2.981775	0.000000
4	8	-1.800371	-0.415624	0.000000
5	8	-3.737127	0.675265	0.000000
6	1	-3.969409	1.627566	0.000000
7	8	-0.482181	2.118496	0.000000
8	1	0.000000	1.254399	0.000000
9	6	2.834475	-1.726921	0.000000
10	6	1.441971	-1.054491	0.000000
11	8	2.997410	-2.907780	0.000000
12	8	1.361699	0.166105	0.000000
13	8	0.447065	-1.891767	0.000000
14	1	-0.406068	-1.393412	0.000000
15	8	3.818665	-0.823746	0.000000
16	1	3.416650	0.061558	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A"	28.8	2.6	0
2	A"	34.9	0.0	0
3	A"	83.4	4.2	0
4	A"	90.6	0.0	0
5	A'	95.5	3.2	0
6	A'	118.4	6.0	0
7	A"	128.1	2.8	0
8	A'	138.1	1.9	0
9	A'	282.7	24.5	1
10	A'	301.0	74.1	3
11	A'	421.2	2.7	0
12	A'	440.0	7.4	0
13	A"	467.1	36.1	1
14	A"	479.2	26.6	1
15	A'	557.9	2.0	0
16	A'	569.9	13.5	0
17	A"	672.9	83.2	3
18	A'	679.1	29.6	1
19	A'	702.7	11.4	0
20	A"	786.3	73.8	3
21	A"	820.7	20.2	0
22	A'	822.7	24.7	1

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
23	A''	837.8	4.5	0
24	A'	839.4	0.3	0
25	A''	865.0	2.6	0
26	A''	901.6	168.7	7
27	A'	1181.8	40.6	1
28	A'	1226.7	7.5	0
29	A'	1251.3	117.1	5
30	A'	1274.4	303.6	13
31	A'	1329.4	798.6	36
32	A'	1356.3	254.5	11
33	A'	1443.2	63.6	2
34	A'	1486.6	51.8	2
35	A'	1737.2	337.2	15
36	A'	1809.1	40.4	1
37	A'	1835.4	688.8	31
38	A'	1876.1	242.4	11
39	A'	3321.4	494.6	22
40	A'	3395.1	2182.6	100
41	A'	3552.3	155.0	7
42	A'	3676.0	119.1	5

File: m-oxal-cTc2cTt-r.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -756.658544398  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -756.558110  
 Dipolmomente: X=-2.2390 Y=2.0219 Z=0.0000 Gesamt=3.0169  
 Framework: CS[SG(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.777056	2.063437	0.000000
2	6	-2.416950	0.646542	0.000000
3	8	-2.520192	3.012651	0.000000
4	8	-1.782702	-0.379264	0.000000
5	8	-3.730656	0.690059	0.000000
6	1	-3.989149	1.632196	0.000000
7	8	-0.471842	2.136969	0.000000
8	1	0.000000	1.270759	0.000000
9	6	2.827696	-1.745382	0.000000
10	6	1.427713	-1.084014	0.000000
11	8	2.996838	-2.924163	0.000000
12	8	1.338331	0.134465	0.000000
13	8	0.441335	-1.930949	0.000000
14	1	-0.414563	-1.446128	0.000000
15	8	3.806849	-0.838350	0.000000
16	1	3.411611	0.048331	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	28.8	2.8	0
2	A''	33.2	0.0	0
3	A''	78.5	3.6	0
4	A''	81.2	1.3	0
5	A'	95.0	3.7	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
6	?A	122.0	6.6	0
7	?A	123.1	3.2	0
8	A'	133.3	0.8	0
9	A'	282.8	30.5	1
10	A'	301.8	61.6	3
11	A'	421.4	1.8	0
12	A'	442.7	7.3	0
13	A''	467.0	42.9	2
14	A''	476.0	44.5	2
15	A'	560.1	2.0	0
16	A'	571.8	12.8	0
17	A''	636.0	103.1	6
18	A'	681.1	33.4	1
19	A'	703.8	13.6	0
20	A''	746.8	68.4	3
21	A''	782.2	39.9	2
22	A'	827.4	26.5	1
23	A''	831.4	9.8	0
24	A'	843.3	0.3	0
25	A''	844.5	1.4	0
26	A''	870.1	217.0	12
27	A'	1181.7	50.6	2
28	A'	1227.2	10.2	0
29	A'	1248.0	91.1	5
30	A'	1276.7	313.7	18
31	A'	1331.4	809.1	47
32	A'	1355.2	284.2	16
33	A'	1444.4	55.1	3
34	A'	1485.9	54.0	3
35	A'	1752.7	403.6	23
36	A'	1824.6	61.7	3
37	A'	1846.0	768.2	44
38	A'	1887.2	273.0	15
39	A'	3402.9	766.2	44
40	A'	3491.8	1710.6	100
41	A'	3624.6	157.8	9
42	A'	3720.0	133.9	7

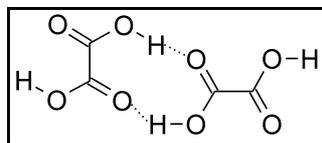
File: mp-oxal-cTc2cTt-r-cl.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -752.977403205  
 E(MP2): -755.1097299  
 E(MP2)+ZPE: -755.009321  
 Dipolmomente: X=-3.2026 Y=0.5125 Z=0.2384 Gesamt=3.2521  
 Framework: Cl[X(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-2.606425	0.807308	-0.065052
2	6	-2.395964	-0.721462	0.056595
3	8	-3.742917	1.222396	-0.171189
4	8	-1.306047	-1.244900	0.158412
5	8	-3.533850	-1.389740	0.040958
6	1	-4.232101	-0.711353	-0.042502

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
7	8	-1.530564	1.561623	-0.051271
8	1	-0.703312	1.042110	0.054314
9	6	3.320191	0.022634	-0.041742
10	6	1.791971	-0.172168	0.042696
11	8	4.097727	-0.882622	-0.180408
12	8	1.062383	0.796427	0.233853
13	8	1.415533	-1.416546	-0.102396
14	1	0.438409	-1.446299	-0.023106
15	8	3.662727	1.313541	0.058682
16	1	2.838422	1.816225	0.163185

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	25.6	0.0	0
2	30.5	2.5	0
3	63.6	3.5	0
4	80.5	1.1	0
5	98.5	4.1	0
6	113.7	1.9	0
7	124.0	5.8	0
8	129.0	1.1	0
9	279.8	29.7	1
10	298.8	54.1	3
11	421.7	1.1	0
12	443.8	8.1	0
13	461.7	17.6	1
14	467.1	60.2	3
15	562.1	2.5	0
16	571.4	12.4	0
17	608.1	92.4	6
18	673.9	31.2	2
19	693.9	17.6	1
20	710.4	48.9	3
21	753.4	6.8	0
22	793.0	126.1	8
23	813.3	0.7	0
24	829.9	28.3	1
25	841.1	115.9	7
26	846.8	21.6	1
27	1186.0	57.3	3
28	1227.7	16.5	1
29	1247.6	72.5	4
30	1273.2	260.6	17
31	1340.8	813.1	53
32	1364.3	279.1	18
33	1462.8	36.5	2
34	1497.7	38.9	2
35	1760.9	314.2	20
36	1801.9	56.9	3
37	1837.9	609.4	39
38	1846.0	226.1	14
39	3510.4	605.3	39
40	3580.1	1524.8	100

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
41	3654.5	153.1	10
42	3747.6	137.8	9

Dimer cTc(R)tTt **13i**

File: b-oxal-cTc2tTt.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -756.922288097  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -756.822742  
 Dipolmomente: X=0.6798 Y=-0.1685 Z=0.0000 Gesamt=0.7004  
 Framework: CS[SG(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-2.434220	0.645935	0.000000
2	6	-1.795066	2.066076	0.000000
3	8	-1.807544	-0.386130	0.000000
4	8	-2.547462	3.012771	0.000000
5	8	-0.491355	2.152622	0.000000
6	1	0.000000	1.291770	0.000000
7	8	-3.751282	0.697517	0.000000
8	1	-3.994783	1.646498	0.000000
9	6	1.438577	-1.031606	0.000000
10	6	2.817144	-1.728758	0.000000
11	8	1.323792	0.176524	0.000000
12	8	2.963726	-2.917797	0.000000
13	8	3.800354	-0.821132	0.000000
14	1	4.642692	-1.301502	0.000000
15	8	0.458959	-1.904697	0.000000
16	1	-0.400010	-1.424085	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	4.2	2.3	0
2	A''	32.8	0.4	0
3	A''	42.7	0.1	0
4	A''	80.7	0.5	0
5	A'	93.2	1.7	0
6	A'	121.6	5.7	0
7	A''	123.4	2.9	0
8	A'	131.0	2.0	0
9	A'	282.1	33.4	2
10	A'	299.2	35.6	2
11	A'	418.7	5.7	0
12	A'	441.5	2.5	0
13	A''	450.8	14.3	0
14	A''	464.7	52.1	3
15	A'	542.6	10.7	0
16	A'	564.3	7.1	0
17	A''	640.8	119.4	8
18	A'	660.1	110.0	7

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
19	A'	699.3	8.3	0
20	A''	756.8	64.1	4
21	A''	795.8	22.2	1
22	A'	811.4	1.2	0
23	A'	836.0	1.4	0
24	A''	838.4	37.5	2
25	A''	849.1	1.3	0
26	A''	873.0	210.9	14
27	A'	1164.1	402.9	27
28	A'	1215.5	8.8	0
29	A'	1238.0	100.4	6
30	A'	1264.9	68.9	4
31	A'	1325.6	766.6	52
32	A'	1352.0	44.1	3
33	A'	1431.7	93.3	6
34	A'	1453.5	29.9	2
35	A'	1772.7	465.3	31
36	A'	1806.9	92.8	6
37	A'	1833.4	805.1	54
38	A'	1836.4	161.0	10
39	A'	3322.9	1149.3	78
40	A'	3483.8	1466.4	100
41	A'	3581.1	150.2	10
42	A'	3758.8	99.3	6

File: bp-oxal-cTc2tTt.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -756.978100813  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -756.878370  
 Dipolmomente: X=0.7592 Y=-0.1128 Z=0.0000 Gesamt=0.7675  
 Framework: CS[SG(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-2.435626	0.614054	0.000000
2	6	-1.802197	2.031447	0.000000
3	8	-1.816595	-0.421907	0.000000
4	8	-2.559321	2.974533	0.000000
5	8	-0.500996	2.126723	0.000000
6	1	0.000000	1.269406	0.000000
7	8	-3.751193	0.673020	0.000000
8	1	-3.977199	1.627307	0.000000
9	6	1.446519	-0.998643	0.000000
10	6	2.820052	-1.700462	0.000000
11	8	1.340269	0.209911	0.000000
12	8	2.961031	-2.888882	0.000000
13	8	3.807715	-0.798359	0.000000
14	1	4.643616	-1.288832	0.000000
15	8	0.463482	-1.863805	0.000000
16	1	-0.394039	-1.376124	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	9.2	2.4	0
2	A''	33.6	0.5	0
3	A''	41.4	0.0	0
4	A''	85.4	0.2	0
5	A'	94.7	1.0	0
6	A'	122.6	6.5	0
7	A''	127.1	2.8	0
8	A'	138.4	2.2	0
9	A'	285.7	30.3	1
10	A'	302.3	39.5	2
11	A'	422.7	7.8	0
12	A'	442.7	2.7	0
13	A''	453.6	8.5	0
14	A''	468.5	41.9	2
15	A'	543.4	12.1	0
16	A'	567.0	8.4	0
17	A''	650.8	112.1	6
18	A'	660.2	106.9	6
19	A'	703.5	7.2	0
20	A''	792.9	71.8	4
21	A'	813.1	1.0	0
22	A''	827.4	8.9	0
23	A'	839.7	1.7	0
24	A''	841.1	17.6	1
25	A''	874.3	6.4	0
26	A''	904.4	165.8	9
27	A'	1163.7	376.3	21
28	A'	1224.6	6.1	0
29	A'	1252.1	105.1	6
30	A'	1272.4	92.1	5
31	A'	1333.2	742.9	42
32	A'	1363.1	41.1	2
33	A'	1442.9	97.0	5
34	A'	1467.1	33.4	1
35	A'	1769.5	391.1	22
36	A'	1806.7	69.3	3
37	A'	1835.6	733.7	42
38	A'	1838.4	167.6	9
39	A'	3261.9	1093.7	63
40	A'	3414.3	1735.6	100
41	A'	3542.7	152.2	8
42	A'	3743.2	90.6	5

File: m-oxal-cTc2tTt.log  
 Rechenmethode: **RmPWLLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -756.657638708  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -756.557345  
 Dipolmomente: X=0.6319 Y=-0.1771 Z=0.0000 Gesamt=0.6563  
 Framework: CS[SG(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-2.428351	0.653093	0.000000
2	6	-1.788480	2.071001	0.000000

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
3	8	-1.799075	-0.375067	0.000000
4	8	-2.537512	3.017295	0.000000
5	8	-0.486046	2.152237	0.000000
6	1	0.000000	1.291258	0.000000
7	8	-3.743403	0.701439	0.000000
8	1	-3.994593	1.645793	0.000000
9	6	1.431923	-1.037110	0.000000
10	6	2.809749	-1.732539	0.000000
11	8	1.317622	0.168894	0.000000
12	8	2.955314	-2.919694	0.000000
13	8	3.791145	-0.826683	0.000000
14	1	4.633460	-1.303710	0.000000
15	8	0.454006	-1.909350	0.000000
16	1	-0.404334	-1.432587	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A"	5.6	2.3	0
2	A"	32.4	0.5	0
3	A"	43.4	0.1	0
4	A"	79.9	0.5	0
5	A'	93.7	1.7	0
6	?A	123.6	6.5	0
7	?A	123.7	2.9	0
8	A'	132.2	0.9	0
9	A'	284.2	34.0	2
10	A'	301.4	34.8	2
11	A'	422.2	5.2	0
12	A'	445.0	2.5	0
13	A"	453.8	13.7	0
14	A"	468.8	54.7	3
15	A'	546.4	10.2	0
16	A'	568.0	7.1	0
17	A"	641.9	121.1	8
18	A'	664.0	112.8	7
19	A'	703.7	8.8	0
20	A"	751.4	69.5	4
21	A"	798.6	17.2	1
22	A'	817.6	1.2	0
23	A"	841.1	57.5	4
24	A'	843.3	1.3	0
25	A"	853.3	0.1	0
26	A"	873.1	197.7	13
27	A'	1175.0	408.0	28
28	A'	1224.8	9.2	0
29	A'	1246.7	97.7	6
30	A'	1273.7	67.8	4
31	A'	1334.4	779.4	54
32	A'	1360.5	53.5	3
33	A'	1442.8	90.8	6
34	A'	1464.1	28.8	2
35	A'	1787.4	490.5	34
36	A'	1822.5	97.3	6
37	A'	1846.7	807.6	56

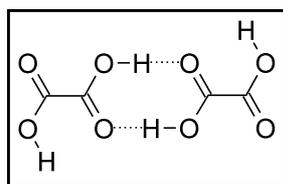
Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
38	A'	1851.1	171.8	12
39	A'	3360.5	1143.4	80
40	A'	3520.7	1427.1	100
41	A'	3618.8	152.0	10
42	A'	3782.2	104.6	7

File: mp-oxal-cTc2tTt-cl.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -752.977988702  
 E(MP2): -755.1096511  
 E(MP2)+ZPE: -755.009270  
 Dipolmomente: X=0.5778 Y=0.0794 Z=0.5947 Gesamt=0.8330  
 Framework: Cl[X(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-2.411340	-0.716220	0.077439
2	6	-2.635269	0.809022	-0.068014
3	8	-1.318586	-1.231968	0.178599
4	8	-3.780219	1.212085	-0.135760
5	8	-1.569434	1.572998	-0.104013
6	1	-0.727010	1.066195	-0.055286
7	8	-3.547726	-1.390388	0.086561
8	1	-4.247459	-0.712899	0.006173
9	6	1.779952	-0.133144	-0.015253
10	6	3.305660	0.022740	-0.036401
11	8	1.028396	0.822727	-0.085080
12	8	4.063081	-0.831764	-0.425512
13	8	3.650458	1.238264	0.412830
14	1	4.616288	1.288202	0.351501
15	8	1.432729	-1.403827	0.058334
16	1	0.454575	-1.440901	0.063309

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	20.6	1.1	0
2	26.0	0.6	0
3	50.6	1.0	0
4	72.8	0.2	0
5	91.3	3.0	0
6	113.5	2.3	0
7	117.0	2.8	0
8	126.1	2.9	0
9	281.2	34.8	2
10	289.6	28.1	2
11	400.6	9.9	0
12	422.4	3.1	0
13	443.8	1.2	0
14	462.9	55.4	4
15	567.0	4.9	0
16	583.9	39.2	3
17	654.2	90.6	7
18	656.5	105.3	8
19	693.7	10.4	0
20	711.5	49.1	4

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
21	768.9	32.5	2
22	810.0	63.8	5
23	822.6	1.9	0
24	834.7	68.7	5
25	845.4	30.2	2
26	847.8	76.7	6
27	1172.9	406.7	33
28	1225.7	12.3	1
29	1246.9	78.9	6
30	1268.9	58.5	4
31	1343.4	773.5	63
32	1362.2	64.6	5
33	1459.8	68.0	5
34	1477.7	21.8	1
35	1785.5	388.5	31
36	1803.8	146.0	11
37	1819.8	159.0	12
38	1839.3	574.0	46
39	3479.6	960.9	78
40	3612.8	1225.9	100
41	3650.0	119.9	9
42	3799.2	107.8	8

Dimer cTt(L)cTt **13j**

File: b-oxal-cTt2cTt-l-c2h.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -756.923136970  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -756.823514  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.967053	1.777947	0.000000
2	6	1.616305	1.017830	0.000000
3	8	3.050295	2.967568	0.000000
4	8	1.616305	-0.209771	0.000000
5	8	0.571336	1.788687	0.000000
6	1	-0.263141	1.243613	0.000000
7	8	4.011185	0.942911	0.000000
8	1	3.680521	0.028501	0.000000
9	6	-2.967053	-1.777947	0.000000
10	6	-1.616305	-1.017830	0.000000
11	8	-3.050295	-2.967568	0.000000
12	8	-1.616305	0.209771	0.000000
13	8	-0.571336	-1.788687	0.000000
14	1	0.263141	-1.243613	0.000000

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
15	8	-4.011185	-0.942911	0.000000
16	1	-3.680521	-0.028501	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	30.2	6.6	0
2	AU	42.6	2.2	0
3	BG	76.2	0.0	0
4	BG	84.2	0.0	0
5	BU	95.9	5.0	0
6	AU	97.4	4.7	0
7	AG	127.5	0.0	0
8	AG	131.8	0.0	0
9	AG	296.3	0.0	0
10	BU	318.2	127.6	4
11	BU	429.7	12.5	0
12	AG	451.0	0.0	0
13	AU	471.5	56.7	1
14	BG	478.0	0.0	0
15	AG	554.3	0.0	0
16	BU	574.5	26.9	0
17	BG	627.9	0.0	0
18	AU	629.0	200.1	6
19	AG	682.8	0.0	0
20	BU	694.5	58.9	1
21	BG	822.2	0.0	0
22	AG	824.5	0.0	0
23	AU	828.8	0.2	0
24	BU	837.3	45.9	1
25	BG	895.2	0.0	0
26	AU	937.4	251.9	8
27	BU	1171.2	83.5	2
28	AG	1172.2	0.0	0
29	AG	1291.3	0.0	0
30	BU	1294.3	963.5	31
31	BU	1352.4	195.8	6
32	AG	1372.2	0.0	0
33	BU	1481.5	74.4	2
34	AG	1500.8	0.0	0
35	AG	1692.5	0.0	0
36	BU	1754.3	674.5	22
37	BU	1873.5	577.1	19
38	AG	1873.9	0.0	0
39	AG	3185.3	0.0	0
40	BU	3278.7	3034.7	100
41	AG	3698.2	0.0	0
42	BU	3698.2	251.2	8

File: bp-oxal-cTt2cTt-1-c2h.log  
 Rechenmethode: **B3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -756.979430350  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -756.879374  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.975928	1.738331	0.000000
2	6	1.627300	0.980682	0.000000
3	8	3.060588	2.927121	0.000000
4	8	1.627300	-0.246596	0.000000
5	8	0.583631	1.750201	0.000000
6	1	-0.255924	1.207548	0.000000
7	8	4.016965	0.901831	0.000000
8	1	3.677830	-0.008984	0.000000
9	6	-2.975928	-1.738331	0.000000
10	6	-1.627300	-0.980682	0.000000
11	8	-3.060588	-2.927121	0.000000
12	8	-1.627300	0.246596	0.000000
13	8	-0.583631	-1.750201	0.000000
14	1	0.255924	-1.207548	0.000000
15	8	-4.016965	-0.901831	0.000000
16	1	-3.677830	0.008984	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	33.5	7.2	0
2	AU	43.6	1.4	0
3	BG	81.1	0.0	0
4	BG	100.4	0.0	0
5	BU	100.7	4.2	0
6	AU	107.5	3.3	0
7	AG	128.5	0.0	0
8	AG	137.7	0.0	0
9	AG	298.5	0.0	0
10	BU	323.5	143.1	4
11	BU	430.9	11.5	0
12	AG	453.1	0.0	0
13	AU	477.0	43.0	1
14	BG	493.4	0.0	0
15	AG	555.2	0.0	0
16	BU	578.9	30.0	0
17	BG	662.3	0.0	0
18	AU	663.3	166.8	5
19	AG	685.1	0.0	0
20	BU	697.8	56.2	1
21	AG	826.3	0.0	0
22	BU	841.3	43.2	1
23	AU	841.4	0.0	0
24	BG	842.1	0.0	0
25	BG	950.9	0.0	0
26	AU	988.7	199.0	5
27	BU	1181.9	63.1	1
28	AG	1183.0	0.0	0
29	AG	1299.4	0.0	0
30	BU	1301.6	973.1	29
31	BU	1362.7	206.0	6
32	AG	1381.2	0.0	0
33	BU	1492.4	70.8	2
34	AG	1517.9	0.0	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
35	AG	1685.6	0.0	0
36	BU	1752.8	602.4	18
37	BU	1876.3	518.0	15
38	AG	1876.8	0.0	0
39	AG	3095.2	0.0	0
40	BU	3204.4	3320.3	100
41	AG	3682.9	0.0	0
42	BU	3683.0	231.3	6

File: m-oxal-cTt2cTt-1.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -756.658172192  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -756.557780  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.962434	1.779913	0.000000
2	6	1.612696	1.021008	0.000000
3	8	3.043233	2.967789	0.000000
4	8	1.612696	-0.204434	0.000000
5	8	0.569039	1.790853	0.000000
6	1	-0.263812	1.249088	0.000000
7	8	4.005583	0.947832	0.000000
8	1	3.679948	0.033599	0.000000
9	6	-2.962434	-1.779913	0.000000
10	6	-1.612696	-1.021008	0.000000
11	8	-3.043233	-2.967789	0.000000
12	8	-1.612696	0.204434	0.000000
13	8	-0.569039	-1.790853	0.000000
14	1	0.263812	-1.249088	0.000000
15	8	-4.005583	-0.947832	0.000000
16	1	-3.679948	-0.033599	0.000000

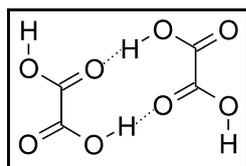
Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	30.1	6.8	0
2	AU	42.1	2.1	0
3	BG	76.4	0.0	0
4	BG	83.9	0.0	0
5	BU	96.3	5.0	0
6	AU	97.8	4.7	0
7	AG	127.3	0.0	0
8	AG	133.8	0.0	0
9	AG	298.1	0.0	0
10	BU	320.9	124.1	4
11	BU	433.3	12.7	0
12	AG	455.1	0.0	0
13	AU	475.3	58.9	1
14	BG	481.8	0.0	0
15	AG	558.1	0.0	0
16	BU	578.1	26.2	0
17	BG	626.6	0.0	0
18	AU	627.7	202.4	6

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
19	AG	687.2	0.0	0
20	BU	698.7	62.2	2
21	BG	828.9	0.0	0
22	AG	831.4	0.0	0
23	AU	835.5	0.1	0
24	BU	843.3	45.8	1
25	BG	891.9	0.0	0
26	AU	934.8	257.4	8
27	BU	1182.2	83.6	2
28	AG	1183.2	0.0	0
29	AG	1300.4	0.0	0
30	BU	1303.2	957.9	32
31	BU	1361.5	217.8	7
32	AG	1382.8	0.0	0
33	BU	1491.8	75.1	2
34	AG	1509.2	0.0	0
35	AG	1706.4	0.0	0
36	BU	1767.5	703.8	23
37	BU	1887.6	588.1	19
38	AG	1888.0	0.0	0
39	AG	3234.0	0.0	0
40	BU	3323.7	2950.1	100
41	AG	3725.5	0.0	0
42	BU	3725.6	258.2	8

File: mp-oxal-cTt2cTt-1-cl.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -752.976092691  
 E(MP2): -755.1097993  
 E(MP2)+ZPE: -755.009337  
 Dipolmomente: X=-0.0007 Y=0.0004 Z=0.3748 Gesamt=0.3748  
 Framework: Cl[X(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	3.440326	-0.077064	-0.062514
2	6	1.901997	-0.088160	0.057467
3	8	4.101277	-1.075421	-0.158349
4	8	1.295652	0.973858	0.205406
5	8	1.378343	-1.279932	-0.013360
6	1	0.394784	-1.199403	0.074760
7	8	3.935173	1.166884	-0.044382
8	1	3.181007	1.772245	0.039940
9	6	-3.440336	0.076963	-0.062394
10	6	-1.902010	0.088251	0.057582
11	8	-4.101382	1.075232	-0.158481
12	8	-1.295532	-0.973680	0.205591
13	8	-1.378507	1.280092	-0.013254
14	1	-0.394951	1.199702	0.074783
15	8	-3.935014	-1.167052	-0.044453
16	1	-3.180787	-1.772328	0.039925

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	30.6	6.0	0
2	40.6	2.5	0
3	71.3	0.5	0
4	75.8	1.5	0
5	99.9	2.1	0
6	105.5	3.6	0
7	126.5	0.0	0
8	130.3	0.0	0
9	299.3	0.0	0
10	318.2	110.7	4
11	437.1	13.3	0
12	454.7	5.9	0
13	466.3	56.6	2
14	472.8	2.2	0
15	561.5	2.0	0
16	577.6	21.8	0
17	600.4	3.3	0
18	604.1	178.4	6
19	681.5	0.3	0
20	693.2	63.9	2
21	803.2	0.6	0
22	812.9	0.4	0
23	836.4	0.1	0
24	843.5	29.7	1
25	853.9	20.6	0
26	907.0	236.9	8
27	1187.2	87.3	3
28	1188.2	0.0	0
29	1301.4	0.3	0
30	1308.0	900.1	33
31	1375.9	200.8	7
32	1396.3	0.2	0
33	1506.5	52.8	1
34	1525.4	0.0	0
35	1719.2	7.0	0
36	1773.1	523.3	19
37	1845.6	2.0	0
38	1846.0	507.6	18
39	3311.4	1.4	0
40	3400.1	2718.6	100
41	3754.7	2.2	0
42	3754.8	262.6	9

Dimer cTt(P)cTt **13k**

File: b-oxal-cTt2cTt-p-c2h.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -756.911521461  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -756.812697  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.552638	2.326230	0.000000
2	6	2.200275	0.916832	0.000000
3	8	2.206406	3.327018	0.000000
4	8	1.552638	-0.106334	0.000000
5	8	3.522432	0.969641	0.000000
6	1	3.865170	0.061394	0.000000
7	8	0.224241	2.299593	0.000000
8	1	-0.141258	1.394140	0.000000
9	6	-1.552638	-2.326230	0.000000
10	6	-2.200275	-0.916832	0.000000
11	8	-2.206406	-3.327018	0.000000
12	8	-1.552638	0.106334	0.000000
13	8	-3.522432	-0.969641	0.000000
14	1	-3.865170	-0.061394	0.000000
15	8	-0.224241	-2.299593	0.000000
16	1	0.141258	-1.394140	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	12.6	10.7	0
2	AU	30.6	0.2	0
3	BG	57.3	0.0	0
4	BG	73.8	0.0	0
5	BU	86.5	0.5	0
6	AU	94.9	3.1	0
7	AG	99.8	0.0	0
8	AG	101.4	0.0	0
9	AG	260.3	0.0	0
10	BU	266.5	24.9	1
11	BU	417.4	19.4	1
12	AG	421.3	0.0	0
13	BG	432.3	0.0	0
14	AU	435.4	4.5	0
15	AG	540.0	0.0	0
16	BU	544.2	36.7	2
17	BG	645.6	0.0	0
18	AU	657.8	374.5	28
19	AG	665.1	0.0	0
20	BU	669.4	116.6	8
21	BG	672.3	0.0	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
22	AU	716.0	128.1	9
23	BU	806.6	54.8	4
24	AG	814.6	0.0	0
25	BG	830.4	0.0	0
26	AU	831.4	28.5	2
27	AG	1172.6	0.0	0
28	BU	1180.2	296.7	22
29	BU	1196.0	574.6	43
30	AG	1207.1	0.0	0
31	AG	1280.8	0.0	0
32	BU	1316.2	651.9	48
33	AG	1409.3	0.0	0
34	BU	1418.0	39.8	2
35	BU	1784.3	1061.6	79
36	AG	1790.6	0.0	0
37	BU	1853.1	547.5	41
38	AG	1857.7	0.0	0
39	BU	3620.2	1331.3	100
40	AG	3621.9	0.0	0
41	BU	3743.5	207.8	15
42	AG	3743.8	0.0	0

File: bp-oxal-cTt2cTt-p.log  
 Rechenmethode: **B3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -756.966552336  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -756.867431  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.553324	2.315701	0.000000
2	6	2.198069	0.909339	0.000000
3	8	2.206867	3.315913	0.000000
4	8	1.553324	-0.113825	0.000000
5	8	3.520664	0.961125	0.000000
6	1	3.857023	0.051137	0.000000
7	8	0.226705	2.287585	0.000000
8	1	-0.132838	1.380113	0.000000
9	6	-1.553324	-2.315701	0.000000
10	6	-2.198069	-0.909339	0.000000
11	8	-2.206867	-3.315913	0.000000
12	8	-1.553324	0.113825	0.000000
13	8	-3.520664	-0.961125	0.000000
14	1	-3.857023	-0.051137	0.000000
15	8	-0.226705	-2.287585	0.000000
16	1	0.132838	-1.380113	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	12.9	9.3	0
2	AU	28.2	0.2	0
3	BG	59.3	0.0	0
4	BG	73.4	0.0	0
5	BU	87.1	0.7	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
6	AU	94.7	4.1	0
7	AG	97.7	0.0	0
8	AG	99.9	0.0	0
9	AG	259.8	0.0	0
10	BU	266.1	25.1	1
11	BU	417.9	18.6	1
12	AG	421.4	0.0	0
13	BG	437.1	0.0	0
14	AU	439.2	3.8	0
15	AG	539.7	0.0	0
16	BU	544.0	37.6	2
17	AG	665.2	0.0	0
18	BG	667.1	0.0	0
19	BU	669.6	111.6	8
20	AU	671.3	307.9	23
21	BG	715.1	0.0	0
22	AU	748.0	109.4	8
23	BU	807.2	52.9	3
24	AG	815.3	0.0	0
25	BG	841.9	0.0	0
26	AU	843.7	23.8	1
27	AG	1177.5	0.0	0
28	BU	1183.3	556.1	41
29	BU	1203.1	280.8	21
30	AG	1210.2	0.0	0
31	AG	1288.1	0.0	0
32	BU	1325.0	639.6	48
33	AG	1417.5	0.0	0
34	BU	1426.0	48.9	3
35	BU	1786.6	934.5	70
36	AG	1792.4	0.0	0
37	BU	1856.4	490.5	36
38	AG	1860.8	0.0	0
39	BU	3599.9	1327.3	100
40	AG	3600.3	0.0	0
41	BU	3729.6	186.0	14
42	AG	3729.9	0.0	0

File: m-oxal-cTt2cTt-p.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -756.647124453  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -756.547570  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.545288	2.318254	0.000000
2	6	2.192584	0.910081	0.000000
3	8	2.200570	3.315657	0.000000
4	8	1.545288	-0.111031	0.000000
5	8	3.512179	0.962422	0.000000
6	1	3.856574	0.056556	0.000000
7	8	0.219257	2.293659	0.000000

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
8	1	-0.150782	1.392004	0.000000
9	6	-1.545288	-2.318254	0.000000
10	6	-2.192584	-0.910081	0.000000
11	8	-2.200570	-3.315657	0.000000
12	8	-1.545288	0.111031	0.000000
13	8	-3.512179	-0.962422	0.000000
14	1	-3.856574	-0.056556	0.000000
15	8	-0.219257	-2.293659	0.000000
16	1	0.150782	-1.392004	0.000000

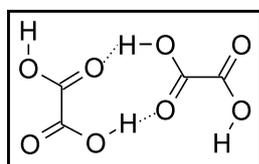
Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	12.4	10.8	0
2	AU	29.6	0.2	0
3	BG	57.0	0.0	0
4	BG	73.8	0.0	0
5	BU	90.3	0.6	0
6	AU	95.2	3.0	0
7	AG	100.9	0.0	0
8	AG	107.6	0.0	0
9	AG	262.7	0.0	0
10	BU	268.7	25.0	1
11	BU	420.7	19.5	1
12	AG	425.0	0.0	0
13	BG	436.2	0.0	0
14	AU	439.3	4.7	0
15	AG	543.9	0.0	0
16	BU	548.6	36.0	2
17	BG	646.2	0.0	0
18	AU	659.6	381.0	27
19	AG	669.9	0.0	0
20	BG	672.9	0.0	0
21	BU	674.5	120.7	8
22	AU	717.7	131.7	9
23	BU	813.9	55.1	3
24	AG	822.2	0.0	0
25	BG	837.0	0.0	0
26	AU	837.9	27.2	1
27	AG	1183.0	0.0	0
28	BU	1191.2	283.7	20
29	BU	1206.3	598.8	43
30	AG	1218.1	0.0	0
31	AG	1290.9	0.0	0
32	BU	1325.7	661.2	47
33	AG	1421.4	0.0	0
34	BU	1430.5	39.0	2
35	BU	1798.0	1116.9	80
36	AG	1804.7	0.0	0
37	BU	1867.5	549.1	39
38	AG	1872.1	0.0	0
39	BU	3645.8	1388.9	100
40	AG	3647.0	0.0	0
41	BU	3766.4	219.0	15
42	AG	3766.7	0.0	0

File: mp-oxal-cTt2cTt-p-cl.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -752.970069358  
 E(MP2): -755.0998266  
 E(MP2)+ZPE: -755.000732  
 Dipolmomente: X=-0.0043 Y=0.0020 Z=-1.3933 Gesamt=1.3933  
 Framework: Cl[X(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.694972	-0.743283	0.135488
2	6	2.270020	0.718033	-0.122048
3	8	3.845317	-1.064950	0.280590
4	8	1.105643	1.059079	-0.215165
5	8	3.312499	1.530643	-0.226616
6	1	2.960249	2.421609	-0.377796
7	8	1.665658	-1.588745	0.183617
8	1	0.826848	-1.118724	0.034925
9	6	-2.693237	0.743990	0.137508
10	6	-2.271330	-0.718766	-0.116604
11	8	-3.843041	1.068374	0.280840
12	8	-1.107464	-1.066001	-0.190468
13	8	-3.316283	-1.525827	-0.239109
14	1	-2.966260	-2.418515	-0.385167
15	8	-1.662231	1.587385	0.186792
16	1	-0.824162	1.116110	0.038119

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	8.3	8.9	0
2	20.6	0.3	0
3	29.0	0.2	0
4	58.3	0.3	0
5	76.6	2.8	0
6	88.9	0.4	0
7	101.4	0.0	0
8	103.7	0.1	0
9	264.7	0.5	0
10	270.6	21.7	1
11	425.3	21.3	1
12	428.7	0.6	0
13	429.1	0.3	0
14	431.7	3.4	0
15	547.3	0.3	0
16	551.5	34.0	2
17	569.8	11.6	1
18	620.2	446.6	39
19	637.2	9.6	0
20	645.3	21.8	1
21	664.1	2.8	0
22	667.3	101.5	8
23	803.1	4.4	0
24	803.3	15.0	1
25	819.2	55.8	4
26	825.2	0.0	0

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
27	1182.1	3.5	0
28	1189.5	341.1	30
29	1214.1	496.1	43
30	1224.7	3.2	0
31	1305.7	2.1	0
32	1338.0	634.7	56
33	1442.2	0.9	0
34	1453.8	45.8	4
35	1789.1	835.6	73
36	1795.5	0.8	0
37	1832.0	480.3	42
38	1836.2	3.3	0
39	3711.7	1132.0	100
40	3716.3	11.2	0
41	3787.9	229.3	20
42	3788.3	7.6	0



Dimer cTt(R)cTt 131

File: b-oxal-cTt2cTt-r.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -756.916513358  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -756.817288  
 Dipolmomente: X=-3.0216 Y=-0.9054 Z=0.0000 Gesamt=3.1543  
 Framework: CS[SG(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.770815	-1.880524	0.000000
2	6	1.410281	-1.139285	0.000000
3	8	2.875675	-3.069140	0.000000
4	8	1.383220	0.081506	0.000000
5	8	0.372959	-1.932993	0.000000
6	1	-0.447894	-1.391267	0.000000
7	8	3.799691	-1.027290	0.000000
8	1	3.448821	-0.119705	0.000000
9	6	-1.735175	2.196643	0.000000
10	6	-2.407694	0.795892	0.000000
11	8	-2.393467	3.195361	0.000000
12	8	-1.793468	-0.251266	0.000000
13	8	-3.725567	0.878746	0.000000
14	1	-4.092465	-0.020135	0.000000
15	8	-0.411271	2.176372	0.000000
16	1	0.000000	1.284395	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	9.7	5.6	0
2	A''	29.8	2.5	0
3	A''	69.2	0.0	0
4	?A	78.4	1.4	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
5	?A	87.3	3.1	0
6	A"	91.9	3.4	0
7	A'	115.3	0.6	0
8	A'	124.5	0.1	0
9	A'	270.0	8.5	0
10	A'	294.1	49.9	2
11	A'	420.3	11.0	0
12	A"	432.5	2.6	0
13	A'	437.2	4.7	0
14	A"	469.6	21.1	1
15	A'	540.8	17.3	0
16	A'	560.5	12.4	0
17	A"	640.7	108.3	5
18	A"	656.9	197.8	10
19	A'	670.1	89.1	4
20	A'	682.9	16.6	0
21	A"	712.4	13.2	0
22	A'	814.9	19.4	0
23	A'	819.7	26.7	1
24	A"	822.1	19.6	0
25	A"	834.5	5.8	0
26	A"	851.4	158.8	8
27	A'	1172.2	52.5	2
28	A'	1186.1	164.7	8
29	A'	1206.5	280.3	14
30	A'	1262.9	265.7	13
31	A'	1293.3	296.9	15
32	A'	1347.0	285.3	14
33	A'	1412.7	3.5	0
34	A'	1468.7	53.1	2
35	A'	1747.6	303.7	15
36	A'	1778.6	612.2	31
37	A'	1847.9	347.1	17
38	A'	1871.6	259.2	13
39	A'	3480.9	91.3	4
40	A'	3513.4	1964.9	100
41	A'	3686.9	128.7	6
42	A'	3742.1	102.6	5

File: bp-oxal-cTt2cTt-r.log  
 Rechenmethode: **B3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -756.972017367  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -756.872425  
 Dipolmomente: X=-2.8254 Y=-0.8086 Z=0.0000 Gesamt=2.9388  
 Framework: CS[SG(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.761564	-1.880726	0.000000
2	6	1.411817	-1.127470	0.000000
3	8	2.856074	-3.069374	0.000000
4	8	1.396072	0.092467	0.000000
5	8	0.366909	-1.909643	0.000000
6	1	-0.447854	-1.357103	0.000000

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
7	8	3.795902	-1.035910	0.000000
8	1	3.444889	-0.128874	0.000000
9	6	-1.728293	2.187555	0.000000
10	6	-2.403576	0.792484	0.000000
11	8	-2.383822	3.187418	0.000000
12	8	-1.798218	-0.257944	0.000000
13	8	-3.721460	0.880458	0.000000
14	1	-4.086465	-0.018549	0.000000
15	8	-0.406413	2.163098	0.000000
16	1	0.000000	1.268900	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A"	15.5	5.9	0
2	A"	29.6	1.8	0
3	A"	72.9	0.0	0
4	A"	80.4	1.9	0
5	A'	88.9	2.8	0
6	A"	100.4	2.4	0
7	A'	112.3	0.6	0
8	A'	127.8	0.2	0
9	A'	270.1	8.2	0
10	A'	294.7	55.2	2
11	A'	420.9	10.6	0
12	A'	437.8	4.6	0
13	A"	437.9	1.9	0
14	A"	475.3	14.2	0
15	A'	540.4	18.3	0
16	A'	561.3	12.4	0
17	A'	671.6	84.9	4
18	A"	673.6	40.3	2
19	A"	676.1	199.2	10
20	A'	684.1	16.4	0
21	A"	773.3	19.4	0
22	A'	816.3	17.7	0
23	A'	821.1	26.3	1
24	A"	832.7	18.6	0
25	A"	848.2	3.5	0
26	A"	872.3	134.4	6
27	A'	1181.8	40.8	2
28	A'	1188.9	240.9	12
29	A'	1214.3	204.3	10
30	A'	1266.4	253.5	12
31	A'	1300.8	287.4	14
32	A'	1355.4	299.4	15
33	A'	1420.6	4.2	0
34	A'	1478.4	51.2	2
35	A'	1747.7	277.3	14
36	A'	1780.2	550.2	27
37	A'	1850.8	309.2	15
38	A'	1875.2	231.6	11
39	A'	3440.0	170.7	8
40	A'	3480.0	1965.8	100

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
41	A'	3671.6	117.5	5
42	A'	3728.6	92.7	4

File: m-oxal-cTt2cTt-r.log  
 Rechenmethode: **RmPWLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -756.651910861  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -756.551942  
 Dipolmomente: X=-3.0210 Y=-0.9222 Z=0.0000 Gesamt=3.1586  
 Framework: CS[SG(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.768686	-1.872012	0.000000
2	6	1.406470	-1.137525	0.000000
3	8	2.876019	-3.058372	0.000000
4	8	1.374277	0.080909	0.000000
5	8	0.374227	-1.934924	0.000000
6	1	-0.448162	-1.399608	0.000000
7	8	3.793710	-1.017567	0.000000
8	1	3.445400	-0.111204	0.000000
9	6	-1.733398	2.192159	0.000000
10	6	-2.403849	0.791866	0.000000
11	8	-2.392967	3.187485	0.000000
12	8	-1.786609	-0.251216	0.000000
13	8	-3.719391	0.871593	0.000000
14	1	-4.086224	-0.025514	0.000000
15	8	-0.411574	2.172862	0.000000
16	1	0.000000	1.283243	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	11.1	5.8	0
2	A''	29.0	2.5	0
3	A''	69.6	0.0	0
4	A''	77.9	1.4	0
5	A'	88.5	3.1	0
6	A''	92.4	3.3	0
7	A'	117.4	0.5	0
8	A'	126.5	0.1	0
9	A'	272.3	8.7	0
10	A'	297.1	48.9	2
11	A'	423.8	11.2	0
12	A''	436.6	2.5	0
13	A'	441.3	4.7	0
14	A''	473.1	22.3	1
15	A'	544.8	16.8	0
16	A'	564.5	12.5	0
17	A''	637.2	106.9	5
18	A''	658.4	202.9	10
19	A'	674.3	91.8	4
20	A'	687.3	16.8	0
21	A''	714.3	13.8	0
22	A'	821.9	19.8	1
23	?A	826.5	36.7	1

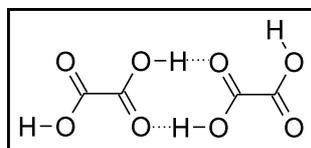
Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
24	?A	826.6	26.4	1
25	A"	840.8	4.3	0
26	A"	852.8	146.8	7
27	A'	1182.1	52.5	2
28	A'	1196.4	165.7	8
29	A'	1217.3	278.2	14
30	A'	1272.3	276.2	14
31	A'	1303.7	298.6	15
32	A'	1355.9	292.2	15
33	A'	1425.0	3.3	0
34	A'	1479.6	54.2	2
35	A'	1761.9	315.8	16
36	A'	1792.6	637.7	33
37	A'	1863.2	351.6	18
38	A'	1886.1	261.9	13
39	A'	3512.0	115.4	5
40	A'	3544.7	1928.0	100
41	A'	3717.1	132.6	6
42	A'	3765.4	108.0	5

File: mp-oxal-cTt2cTt-r-cl.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -752.972739308  
 E(MP2): -755.1038697  
 E(MP2)+ZPE: -755.003711  
 Dipolmomente: X=2.0544 Y=-2.5219 Z=1.3150 Gesamt=3.5085  
 Framework: Cl[X(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-3.318495	0.022368	0.004618
2	6	-1.787096	-0.160004	-0.002792
3	8	-4.093373	-0.857801	-0.257300
4	8	-1.055925	0.767153	0.327098
5	8	-1.403969	-1.356809	-0.376680
6	1	-0.425748	-1.377894	-0.330902
7	8	-3.667218	1.270692	0.340936
8	1	-2.843474	1.761056	0.496986
9	6	2.647194	0.821262	-0.153043
10	6	2.413483	-0.683003	0.103460
11	8	3.755417	1.258569	-0.327488
12	8	1.334385	-1.233759	-0.031366
13	8	3.529025	-1.299323	0.461892
14	1	3.311174	-2.237464	0.578217
15	8	1.538640	1.553370	-0.193350
16	1	0.731662	1.033821	-0.007707

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	18.6	3.7	0
2	25.9	2.8	0
3	52.6	2.4	0
4	70.3	1.1	0
5	85.7	3.2	0
6	101.9	1.7	0

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
7	121.5	0.1	0
8	127.1	0.9	0
9	270.7	7.1	0
10	295.1	42.0	2
11	409.1	3.4	0
12	427.2	11.0	0
13	443.0	5.1	0
14	465.2	15.8	0
15	562.2	14.0	0
16	569.8	22.2	1
17	621.4	80.5	4
18	647.7	180.6	10
19	669.1	76.9	4
20	678.2	22.4	1
21	727.1	6.6	0
22	780.1	118.8	7
23	820.0	5.5	0
24	827.5	19.5	1
25	830.0	24.7	1
26	838.8	74.2	4
27	1186.3	63.7	3
28	1196.0	214.5	12
29	1232.4	177.0	10
30	1273.6	261.0	15
31	1321.0	308.6	18
32	1366.8	279.0	16
33	1446.9	8.2	0
34	1495.0	40.7	2
35	1764.5	254.7	15
36	1789.0	463.2	27
37	1826.7	316.7	18
38	1845.7	231.0	13
39	3587.1	107.9	6
40	3616.9	1691.2	100
41	3745.6	135.5	8
42	3785.4	114.2	6

Dimer cTt(L)tTt **13m**

File: b-oxal-cTt2tTt-1.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -756.922711922  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -756.823131  
 Dipolmomente: X=3.0859 Y=1.7769 Z=0.0000 Gesamt=3.5609  
 Framework: CS[SG(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-3.276856	-1.153493	0.000000
2	6	-1.799701	-0.682978	0.000000

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
3	8	-3.603488	-2.300696	0.000000
4	8	-1.555473	0.520445	0.000000
5	8	-0.931794	-1.647258	0.000000
6	1	-0.001767	-1.280272	0.000000
7	8	-4.128270	-0.122012	0.000000
8	1	-3.613008	0.703039	0.000000
9	6	1.784177	0.628215	0.000000
10	6	3.243510	1.135427	0.000000
11	8	1.513983	-0.558437	0.000000
12	8	3.544433	2.294766	0.000000
13	8	4.096709	0.105248	0.000000
14	1	4.996104	0.467959	0.000000
15	8	0.927887	1.618417	0.000000
16	1	0.000000	1.262461	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A"	10.6	3.5	0
2	A"	31.7	0.4	0
3	A"	56.8	0.8	0
4	A"	83.8	0.7	0
5	A"	95.0	3.5	0
6	A'	95.5	1.7	0
7	A'	126.8	1.6	0
8	A'	131.7	0.1	0
9	A'	293.7	4.8	0
10	A'	323.0	98.1	4
11	A'	431.6	1.3	0
12	A'	453.2	8.6	0
13	A"	453.9	1.6	0
14	A"	478.7	34.4	1
15	A'	542.8	10.7	0
16	A'	568.9	26.3	1
17	A"	636.9	82.1	3
18	A"	643.1	142.7	5
19	A'	668.5	68.1	2
20	A'	690.4	53.7	2
21	A'	819.9	2.8	0
22	A"	825.4	1.0	0
23	A'	835.0	23.5	0
24	A"	841.6	2.9	0
25	A"	897.3	40.1	1
26	A"	960.5	207.2	8
27	A'	1165.9	400.1	16
28	A'	1171.0	21.5	0
29	A'	1286.1	41.6	1
30	A'	1296.8	520.4	21
31	A'	1360.1	84.9	3
32	A'	1373.9	49.3	2
33	A'	1466.3	39.2	1
34	A'	1495.1	23.6	0
35	A'	1706.8	45.7	1
36	A'	1776.9	712.7	29
37	A'	1837.5	260.1	10

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
38	A'	1873.0	292.2	11
39	A'	3155.9	635.7	26
40	A'	3300.2	2440.5	100
41	A'	3691.4	127.5	5
42	A'	3757.7	101.4	4

File: bp-oxal-cTt2tTt-1.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -756.978349787  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -756.878527  
 Dipolmomente: X=2.9636 Y=1.6795 Z=0.0000 Gesamt=3.4064  
 Framework: CS[SG(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-3.277712	-1.105677	0.000000
2	6	-1.802787	-0.638379	0.000000
3	8	-3.606724	-2.251386	0.000000
4	8	-1.557931	0.564828	0.000000
5	8	-0.937200	-1.601490	0.000000
6	1	-0.000746	-1.239164	0.000000
7	8	-4.125045	-0.072419	0.000000
8	1	-3.601497	0.746820	0.000000
9	6	1.784937	0.585973	0.000000
10	6	3.244666	1.085702	0.000000
11	8	1.514262	-0.600618	0.000000
12	8	3.550030	2.242562	0.000000
13	8	4.093982	0.052991	0.000000
14	1	4.991599	0.418726	0.000000
15	8	0.933130	1.575904	0.000000
16	1	0.000000	1.224931	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	11.0	3.9	0
2	A''	34.7	0.4	0
3	A''	57.3	0.6	0
4	A''	97.9	2.7	0
5	A'	99.9	1.4	0
6	A''	102.1	0.9	0
7	A'	128.4	1.5	0
8	A'	138.4	0.1	0
9	A'	295.8	5.2	0
10	A'	330.0	108.9	3
11	A'	432.5	0.9	0
12	A'	455.7	8.9	0
13	A''	458.2	0.2	0
14	A''	488.8	26.2	0
15	A'	543.7	11.0	0
16	A'	573.1	33.5	1
17	A''	656.7	111.8	4
18	A''	666.1	89.3	3
19	A'	669.4	67.8	2
20	A'	693.7	50.6	1

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
21	A'	821.9	3.2	0
22	A'	839.6	22.4	0
23	A''	842.7	0.0	0
24	A''	845.3	2.9	0
25	A''	954.5	33.6	1
26	A''	1009.0	160.5	5
27	A'	1165.6	363.0	13
28	A'	1180.9	24.3	0
29	A'	1294.8	44.7	1
30	A'	1306.0	539.0	19
31	A'	1371.9	77.0	2
32	A'	1384.0	49.1	1
33	A'	1480.7	43.3	1
34	A'	1514.8	16.2	0
35	A'	1699.0	32.8	1
36	A'	1773.8	637.2	23
37	A'	1839.5	238.9	8
38	A'	1876.2	262.7	9
39	A'	3047.8	677.2	24
40	A'	3217.0	2744.0	99
41	A'	3675.8	117.3	4
42	A'	3742.5	92.8	3

File: m-oxal-cTt2tTt-1.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -756.657833391  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -756.557494  
 Dipolmomente: X=3.0830 Y=1.7867 Z=0.0000 Gesamt=3.5633  
 Framework: CS[SG(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-3.271619	-1.158598	0.000000
2	6	-1.796365	-0.687102	0.000000
3	8	-3.594400	-2.304867	0.000000
4	8	-1.554065	0.514472	0.000000
5	8	-0.929034	-1.649395	0.000000
6	1	-0.001330	-1.285244	0.000000
7	8	-4.124039	-0.130976	0.000000
8	1	-3.615020	0.695643	0.000000
9	6	1.780822	0.633758	0.000000
10	6	3.238972	1.139850	0.000000
11	8	1.511473	-0.550901	0.000000
12	8	3.538081	2.297625	0.000000
13	8	4.091096	0.112160	0.000000
14	1	4.989826	0.472069	0.000000
15	8	0.925345	1.622124	0.000000
16	1	0.000000	1.268161	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	10.7	3.6	0
2	A''	31.6	0.4	0
3	A''	56.7	0.8	0
4	A''	83.4	0.7	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
5	?A	95.1	3.5	0
6	?A	95.8	1.7	0
7	A'	126.4	1.6	0
8	A'	133.8	0.1	0
9	A'	295.2	4.4	0
10	A'	325.2	96.2	4
11	A'	435.0	1.3	0
12	?A	456.9	1.7	0
13	?A	457.0	8.6	0
14	A''	482.3	35.7	1
15	A'	546.6	10.3	0
16	A'	572.5	25.3	1
17	A''	634.9	88.6	3
18	A''	644.2	139.0	5
19	A'	672.6	70.8	3
20	A'	694.5	55.8	2
21	A'	826.4	2.4	0
22	A''	832.2	0.9	0
23	A'	840.9	23.8	1
24	A''	848.2	3.5	0
25	A''	894.0	40.6	1
26	A''	958.2	211.6	8
27	A'	1177.0	405.1	17
28	A'	1181.4	20.5	0
29	A'	1295.1	46.6	1
30	A'	1305.6	520.1	22
31	A'	1368.6	93.3	3
32	A'	1384.1	48.7	2
33	A'	1476.1	37.5	1
34	A'	1504.1	25.8	1
35	A'	1721.0	49.5	2
36	A'	1790.9	742.9	31
37	A'	1852.1	260.9	11
38	A'	1887.3	298.6	12
39	A'	3204.3	639.1	27
40	A'	3345.3	2355.0	100
41	A'	3719.9	130.7	5
42	A'	3780.9	106.5	4

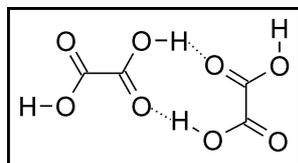
File: mp-oxal-cTt2tTt-1-cl.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -752.977200893  
 E(MP2): -755.1103484  
 E(MP2)+ZPE: -755.009659  
 Dipolmomente: X=-3.6586 Y=0.8136 Z=-0.7670 Gesamt=3.8257  
 Framework: Cl[X(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	3.461633	-0.074209	0.029797
2	6	1.919942	-0.097360	-0.039670
3	8	4.134297	-1.061402	0.156715
4	8	1.307065	0.955810	-0.221904
5	8	1.404932	-1.283877	0.110221

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
6	1	0.414915	-1.209320	0.072979
7	8	3.946452	1.170700	-0.070002
8	1	3.182220	1.762576	-0.162394
9	6	-1.890209	0.046021	0.010347
10	6	-3.423496	0.070637	0.045845
11	8	-1.259913	-0.997973	0.090192
12	8	-4.069032	1.021457	0.411817
13	8	-3.912416	-1.108536	-0.362602
14	1	-4.877023	-1.044072	-0.294458
15	8	-1.391528	1.258198	-0.087854
16	1	-0.406193	1.185271	-0.106701

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	24.9	2.9	0
2	31.8	0.4	0
3	57.9	0.2	0
4	85.9	2.4	0
5	91.4	2.7	0
6	100.2	1.5	0
7	126.2	0.9	0
8	127.6	0.7	0
9	291.1	2.6	0
10	318.2	83.3	3
11	409.2	11.7	0
12	437.0	1.7	0
13	457.4	7.9	0
14	472.0	29.7	1
15	568.9	15.7	0
16	587.6	36.7	1
17	610.9	91.4	4
18	659.7	108.0	4
19	666.4	64.2	2
20	688.7	55.4	2
21	809.0	0.4	0
22	831.8	3.3	0
23	838.5	2.2	0
24	843.3	24.3	1
25	911.6	8.5	0
26	951.6	223.4	10
27	1176.4	388.8	17
28	1187.0	36.0	1
29	1294.5	26.0	1
30	1308.7	514.0	23
31	1381.0	71.2	3
32	1396.0	62.0	2
33	1491.6	22.9	1
34	1519.3	20.6	0
35	1732.6	32.8	1
36	1790.1	619.1	28
37	1820.0	183.5	8
38	1846.0	267.7	12
39	3287.3	573.6	26
40	3421.3	2176.2	100

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
41	3749.0	134.4	6
42	3798.2	110.5	5

Dimer cTt(R)tTt **13n**

File: b-oxal-cTt2tTt-r.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -756.915146541  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -756.816068  
 Dipolmomente: X=-0.3171 Y=-3.2389 Z=0.0000 Gesamt=3.2544  
 Framework: CS[SG(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.744128	2.213007	0.000000
2	6	-2.416536	0.811514	0.000000
3	8	-2.407073	3.209653	0.000000
4	8	-1.804958	-0.236439	0.000000
5	8	-3.735916	0.894945	0.000000
6	1	-4.100170	-0.004789	0.000000
7	8	-0.422314	2.197673	0.000000
8	1	0.000000	1.308617	0.000000
9	6	1.415953	-1.096485	0.000000
10	6	2.749530	-1.875305	0.000000
11	8	1.365227	0.113294	0.000000
12	8	2.825091	-3.071315	0.000000
13	8	3.785284	-1.028460	0.000000
14	1	4.597362	-1.558348	0.000000
15	8	0.383720	-1.914790	0.000000
16	1	-0.438607	-1.378360	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	7.7	5.8	0
2	A''	12.6	0.2	0
3	A''	33.6	0.0	0
4	A''	74.0	0.2	0
5	?A	87.4	1.1	0
6	?A	88.6	1.6	0
7	A'	115.0	0.3	0
8	A'	123.4	0.1	0
9	A'	270.3	10.4	0
10	A'	293.7	27.6	2
11	A'	420.3	4.8	0
12	A''	432.3	4.2	0
13	A'	439.8	4.0	0
14	A''	448.5	6.8	0
15	A'	536.7	0.9	0
16	A'	546.4	29.8	2
17	A''	638.3	92.6	6

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
18	A''	656.2	203.8	14
19	A'	657.3	158.0	11
20	A'	677.8	24.7	1
21	A''	737.3	20.0	1
22	A'	808.8	0.9	0
23	A'	815.7	18.2	1
24	A''	827.4	75.5	5
25	A''	839.8	46.1	3
26	A''	851.2	81.9	5
27	A'	1162.1	418.0	30
28	A'	1186.9	179.9	13
29	A'	1206.6	248.3	18
30	A'	1256.7	45.5	3
31	A'	1295.7	274.2	19
32	A'	1351.9	46.8	3
33	A'	1409.9	2.5	0
34	A'	1444.8	54.3	3
35	A'	1773.9	262.8	19
36	A'	1790.6	787.3	57
37	A'	1835.0	235.8	17
38	A'	1845.1	290.4	21
39	A'	3455.1	714.8	52
40	A'	3533.0	1374.4	100
41	A'	3744.2	97.2	7
42	A'	3758.7	98.2	7

File: bp-oxal-cTt2tTt-r.log  
 Rechenmethode: **B3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -756.969979989  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -756.870713  
 Dipolmomente: X=-0.2390 Y=-3.0547 Z=0.0000 Gesamt=3.0640  
 Framework: CS[SG(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.744321	2.188353	0.000000
2	6	-2.416063	0.791126	0.000000
3	8	-2.408088	3.184031	0.000000
4	8	-1.812944	-0.259916	0.000000
5	8	-3.735811	0.877710	0.000000
6	1	-4.096310	-0.022923	0.000000
7	8	-0.424669	2.174010	0.000000
8	1	0.000000	1.285546	0.000000
9	6	1.419330	-1.072998	0.000000
10	6	2.748680	-1.854586	0.000000
11	8	1.375045	0.136326	0.000000
12	8	2.820270	-3.049575	0.000000
13	8	3.787474	-1.012229	0.000000
14	1	4.593132	-1.550912	0.000000
15	8	0.385246	-1.885310	0.000000
16	1	-0.434749	-1.343462	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	11.0	5.9	0
2	A''	17.5	0.0	0
3	A''	31.1	0.0	0
4	A''	75.5	0.2	0
5	A'	90.1	1.1	0
6	A''	90.9	1.9	0
7	A'	115.0	0.5	0
8	A'	127.8	0.1	0
9	A'	271.3	10.2	0
10	A'	295.5	29.2	1
11	A'	421.4	3.8	0
12	A''	437.8	3.5	0
13	A'	440.3	4.6	0
14	A''	450.0	4.3	0
15	A'	536.3	1.0	0
16	A'	547.0	32.6	1
17	A''	647.5	96.9	5
18	A'	656.9	151.4	9
19	A''	673.4	161.3	9
20	A'	680.2	28.1	1
21	A''	788.8	8.6	0
22	A'	809.4	1.1	0
23	A'	818.3	16.8	1
24	A''	833.2	50.5	3
25	A''	851.2	0.6	0
26	A''	869.4	123.0	7
27	A'	1161.6	392.3	24
28	A'	1188.8	252.3	15
29	A'	1216.8	170.3	10
30	A'	1260.6	51.2	3
31	A'	1303.1	260.6	15
32	A'	1361.6	50.9	3
33	A'	1417.5	3.0	0
34	A'	1456.6	56.5	3
35	A'	1774.1	234.1	14
36	A'	1790.5	697.4	42
37	A'	1836.9	223.3	13
38	A'	1846.7	260.3	15
39	A'	3414.0	599.9	36
40	A'	3484.5	1632.5	100
41	A'	3730.3	88.3	5
42	A'	3742.5	88.5	5

File: m-oxal-cTt2tTt-r.log  
 Rechenmethode: **RmPWLLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -756.650633798  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -756.550820  
 Dipolmomente: X=-0.3012 Y=-3.2538 Z=0.0000 Gesamt=3.2677  
 Framework: CS[SG(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.745013	2.203358	0.000000
2	6	-2.414032	0.802026	0.000000

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
3	8	-2.410478	3.195944	0.000000
4	8	-1.800192	-0.242253	0.000000
5	8	-3.731382	0.882323	0.000000
6	1	-4.095248	-0.015775	0.000000
7	8	-0.425205	2.191362	0.000000
8	1	0.000000	1.306246	0.000000
9	6	1.413377	-1.091663	0.000000
10	6	2.750839	-1.860995	0.000000
11	8	1.356099	0.115712	0.000000
12	8	2.832158	-3.054648	0.000000
13	8	3.779732	-1.009949	0.000000
14	1	4.595053	-1.531752	0.000000
15	8	0.387585	-1.914564	0.000000
16	1	-0.437370	-1.386498	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A"	7.7	6.0	0
2	A"	13.5	0.0	0
3	A"	33.2	0.0	0
4	A"	74.1	0.1	0
5	A"	88.6	1.0	0
6	A"	88.8	1.6	0
7	A'	117.9	0.3	0
8	A'	125.5	0.0	0
9	A'	272.5	10.4	0
10	A'	296.0	27.6	2
11	A'	423.9	4.9	0
12	A"	436.6	4.5	0
13	?A	443.5	4.1	0
14	?A	451.5	6.8	0
15	A'	540.6	0.9	0
16	A'	550.7	29.2	2
17	A"	639.3	93.9	6
18	A"	657.7	207.8	15
19	A'	661.5	161.3	11
20	A'	682.5	25.5	1
21	A"	737.2	19.7	1
22	A'	815.4	0.9	0
23	A'	823.0	18.3	1
24	A"	828.6	111.1	8
25	A"	845.5	46.1	3
26	A"	855.4	50.3	3
27	A'	1173.2	422.2	31
28	A'	1196.9	174.2	12
29	A'	1216.4	259.9	19
30	A'	1266.6	47.4	3
31	A'	1305.4	274.6	20
32	A'	1360.7	52.5	3
33	A'	1421.7	2.4	0
34	A'	1455.8	55.1	4
35	A'	1788.2	271.4	19
36	A'	1805.0	828.3	61
37	A'	1849.6	231.4	17

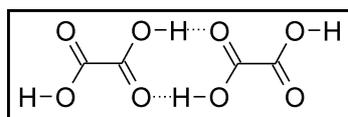
Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
38	A'	1859.3	290.7	21
39	A'	3487.5	735.3	54
40	A'	3566.6	1357.4	100
41	A'	3767.5	103.0	7
42	A'	3781.9	102.7	7

File: mp-oxal-cTt2tTt-r-cl.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -752.972817462  
 E(MP2): -755.1033988  
 E(MP2)+ZPE: -755.003354  
 Dipolmomente: X=-1.7521 Y=-2.8277 Z=-0.4864 Gesamt=3.3619  
 Framework: Cl[X(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.675031	0.828580	0.083589
2	6	2.422849	-0.687572	-0.056610
3	8	3.792677	1.261440	0.208076
4	8	1.351779	-1.222339	0.169592
5	8	3.519716	-1.335592	-0.423824
6	1	3.290712	-2.277248	-0.463477
7	8	1.578888	1.576770	0.088445
8	1	0.757151	1.062039	-0.045959
9	6	-1.771088	-0.113680	0.022875
10	6	-3.298758	0.009800	-0.050146
11	8	-1.023230	0.782637	-0.319660
12	8	-4.048250	-0.934506	-0.098688
13	8	-3.655270	1.301799	-0.071530
14	1	-4.621795	1.317061	-0.139092
15	8	-1.411335	-1.304224	0.472278
16	1	-0.434066	-1.332502	0.452769

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	13.5	4.4	0
2	24.4	0.9	0
3	42.5	0.4	0
4	53.7	0.3	0
5	80.1	1.6	0
6	96.9	1.1	0
7	116.4	0.4	0
8	126.0	0.9	0
9	270.4	9.0	0
10	287.0	21.8	1
11	402.2	5.7	0
12	411.5	9.8	0
13	426.9	5.4	0
14	444.3	2.6	0
15	567.7	10.6	0
16	574.3	55.3	4
17	644.3	38.7	3
18	648.7	196.8	15
19	654.3	133.0	10

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
20	674.7	37.2	2
21	743.4	14.2	1
22	785.4	141.0	11
23	821.3	1.7	0
24	828.9	18.1	1
25	835.6	18.5	1
26	846.6	38.3	3
27	1172.1	425.6	34
28	1196.3	217.8	17
29	1234.9	156.7	12
30	1266.2	49.9	4
31	1322.7	295.6	23
32	1365.3	55.2	4
33	1443.7	5.4	0
34	1471.8	45.9	3
35	1785.7	202.4	16
36	1796.2	702.3	56
37	1818.6	136.1	10
38	1824.9	273.2	22
39	3574.9	567.9	45
40	3632.8	1240.6	100
41	3787.4	109.0	8
42	3800.0	106.8	8

Dimer tTt(L)tTt **13o**

File: b-oxal-tTt2tTt.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -756.921695159  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -756.822295  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.926863	1.827430	0.000000
2	6	1.614164	1.012253	0.000000
3	8	2.969177	3.024724	0.000000
4	8	1.614164	-0.205026	0.000000
5	8	0.562983	1.789926	0.000000
6	1	-0.268521	1.240061	0.000000
7	8	3.987101	1.010160	0.000000
8	1	4.782953	1.564120	0.000000
9	6	-1.614164	-1.012253	0.000000
10	6	-2.926863	-1.827430	0.000000
11	8	-1.614164	0.205026	0.000000
12	8	-2.969177	-3.024724	0.000000
13	8	-3.987101	-1.010160	0.000000
14	1	-4.782953	-1.564120	0.000000
15	8	-0.562983	-1.789926	0.000000
16	1	0.268521	-1.240061	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	BG	5.7	0.0	0
2	AU	9.8	3.6	0
3	AU	32.5	0.8	0
4	AU	79.9	1.0	0
5	BG	82.6	0.0	0
6	BU	95.2	2.3	0
7	AG	124.8	0.0	0
8	AG	131.4	0.0	0
9	AG	291.2	0.0	0
10	BU	326.2	76.2	2
11	BU	431.9	7.9	0
12	AU	449.7	9.9	0
13	AG	454.7	0.0	0
14	BG	460.8	0.0	0
15	AG	537.9	0.0	0
16	BU	555.3	51.6	1
17	BG	639.3	0.0	0
18	AU	641.6	257.4	8
19	AG	665.4	0.0	0
20	BU	674.3	184.5	5
21	AG	817.0	0.0	0
22	BU	828.8	3.3	0
23	BG	837.1	0.0	0
24	AU	845.0	4.6	0
25	BG	912.7	0.0	0
26	AU	960.1	242.8	7
27	BU	1164.5	740.8	23
28	AG	1166.1	0.0	0
29	AG	1287.3	0.0	0
30	BU	1289.0	201.5	6
31	BU	1363.5	43.5	1
32	AG	1371.9	0.0	0
33	BU	1460.6	55.8	1
34	AG	1477.4	0.0	0
35	AG	1731.6	0.0	0
36	BU	1787.8	840.8	26
37	AG	1836.2	0.0	0
38	BU	1836.2	519.9	16
39	AG	3178.1	0.0	0
40	BU	3274.2	3127.7	99
41	BU	3758.1	194.9	6
42	AG	3758.3	0.0	0

File: bp-oxal-tTt2tTt.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -756.976742114  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -756.877259  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.937829	1.777635	0.000000
2	6	1.623372	0.969118	0.000000
3	8	2.984436	2.973467	0.000000
4	8	1.623372	-0.248275	0.000000
5	8	0.576330	1.746877	0.000000
6	1	-0.261978	1.199421	0.000000
7	8	3.995252	0.957616	0.000000
8	1	4.788341	1.514637	0.000000
9	6	-1.623372	-0.969118	0.000000
10	6	-2.937829	-1.777635	0.000000
11	8	-1.623372	0.248275	0.000000
12	8	-2.984436	-2.973467	0.000000
13	8	-3.995252	-0.957616	0.000000
14	1	-4.788341	-1.514637	0.000000
15	8	-0.576330	-1.746877	0.000000
16	1	0.261978	-1.199421	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	9.9	4.0	0
2	BG	13.4	0.0	0
3	AU	34.7	0.8	0
4	AU	79.8	0.9	0
5	BG	97.1	0.0	0
6	BU	100.4	2.2	0
7	AG	128.7	0.0	0
8	AG	139.2	0.0	0
9	AG	294.2	0.0	0
10	BU	335.2	81.0	2
11	BU	432.6	9.6	0
12	AU	451.9	6.1	0
13	AG	458.0	0.0	0
14	BG	465.5	0.0	0
15	AG	538.2	0.0	0
16	BU	560.1	65.2	1
17	AU	649.6	240.6	6
18	BG	651.3	0.0	0
19	AG	666.4	0.0	0
20	BU	676.5	179.7	5
21	AG	819.0	0.0	0
22	BU	834.7	4.3	0
23	AU	846.0	4.8	0
24	BG	846.5	0.0	0
25	BG	965.2	0.0	0
26	AU	1002.8	189.4	5
27	BU	1163.7	690.6	19
28	AG	1165.8	0.0	0
29	AG	1296.9	0.0	0
30	BU	1299.7	213.2	6
31	BU	1377.4	39.9	1
32	AG	1383.0	0.0	0
33	BU	1476.1	52.2	1
34	AG	1502.4	0.0	0
35	AG	1721.6	0.0	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
36	BU	1785.3	734.3	20
37	AG	1838.4	0.0	0
38	BU	1838.5	476.9	13
39	AG	3061.0	0.0	0
40	BU	3177.4	3519.3	100
41	BU	3742.0	177.0	5
42	AG	3742.1	0.0	0

File: m-oxal-tTt2tTt.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -756.656913750  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -756.556755  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.921638	1.832486	0.000000
2	6	1.609953	1.018511	0.000000
3	8	2.962493	3.027835	0.000000
4	8	1.609953	-0.196371	0.000000
5	8	0.559907	1.795084	0.000000
6	1	-0.268915	1.247326	0.000000
7	8	3.980170	1.017303	0.000000
8	1	4.776141	1.568150	0.000000
9	6	-1.609953	-1.018511	0.000000
10	6	-2.921638	-1.832486	0.000000
11	8	-1.609953	0.196371	0.000000
12	8	-2.962493	-3.027835	0.000000
13	8	-3.980170	-1.017303	0.000000
14	1	-4.776141	-1.568150	0.000000
15	8	-0.559907	-1.795084	0.000000
16	1	0.268915	-1.247326	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	BG	7.3	0.0	0
2	AU	8.4	3.6	0
3	AU	32.3	0.8	0
4	AU	80.1	1.0	0
5	BG	82.3	0.0	0
6	BU	95.1	2.3	0
7	AG	124.3	0.0	0
8	AG	132.7	0.0	0
9	AG	292.3	0.0	0
10	BU	327.1	74.7	2
11	BU	434.9	7.6	0
12	AU	452.6	10.0	0
13	AG	458.0	0.0	0
14	BG	463.4	0.0	0
15	AG	541.7	0.0	0
16	BU	558.6	48.8	1
17	BG	640.4	0.0	0
18	AU	642.5	261.3	8

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
19	AG	669.5	0.0	0
20	BU	678.0	191.2	6
21	AG	823.3	0.0	0
22	BU	834.0	2.9	0
23	BG	843.8	0.0	0
24	AU	851.5	5.1	0
25	BG	908.4	0.0	0
26	AU	956.2	248.3	8
27	BU	1175.5	751.2	24
28	AG	1176.9	0.0	0
29	AG	1295.7	0.0	0
30	BU	1297.2	204.9	6
31	BU	1371.8	48.1	1
32	AG	1382.0	0.0	0
33	BU	1470.5	55.4	1
34	AG	1485.0	0.0	0
35	AG	1747.6	0.0	0
36	BU	1802.5	882.7	29
37	BU	1850.9	519.1	17
38	AG	1850.9	0.0	0
39	AG	3232.5	0.0	0
40	BU	3323.6	3012.2	100
41	BU	3781.5	204.9	6
42	AG	3781.6	0.0	0

File: mp-oxal-tTt2tTt-cl.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -752.977683367  
 E(MP2): -755.1103212  
 E(MP2)+ZPE: -755.009725  
 Dipolmomente: X=-0.0008 Y=0.0010 Z=1.2988 Gesamt=1.2988  
 Framework: Cl[X(C4H4O8)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-3.439559	-0.067232	-0.011261
2	6	-1.905717	-0.046814	-0.031550
3	8	-4.104430	-0.993442	-0.405275
4	8	-1.277594	1.000515	-0.080156
5	8	-1.409039	-1.262386	-0.014791
6	1	-0.421048	-1.195680	-0.047847
7	8	-3.910486	1.088223	0.481093
8	1	-4.876821	1.026285	0.444142
9	6	1.905659	0.046685	-0.030218
10	6	3.439514	0.067335	-0.011534
11	8	1.277744	-1.000778	-0.078606
12	8	4.103859	0.993157	-0.407342
13	8	3.911118	-1.087541	0.481556
14	1	4.877404	-1.025612	0.443306
15	8	1.408864	1.262191	-0.012486
16	1	0.420793	1.195658	-0.044163

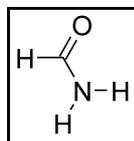
---

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	22.6	1.4	0
2	32.2	1.2	0
3	40.1	0.2	0
4	82.1	0.1	0
5	84.8	2.0	0
6	97.8	3.0	0
7	124.7	0.0	0
8	126.0	0.0	0
9	284.9	0.0	0
10	315.1	58.0	2
11	398.5	3.8	0
12	419.5	25.5	0
13	437.5	1.9	0
14	457.8	0.3	0
15	581.6	43.1	1
16	589.3	40.8	1
17	657.9	34.6	1
18	660.0	157.7	5
19	663.3	29.1	1
20	672.2	169.7	6
21	830.0	0.2	0
22	835.8	2.1	0
23	837.8	4.1	0
24	840.5	3.3	0
25	905.5	1.8	0
26	952.8	212.4	7
27	1175.2	690.2	24
28	1176.6	57.7	2
29	1294.3	3.0	0
30	1299.5	202.5	7
31	1382.1	34.3	1
32	1393.6	13.0	0
33	1487.9	28.7	1
34	1500.6	7.7	0
35	1753.1	0.2	0
36	1798.4	799.6	28
37	1819.3	274.8	9
38	1819.5	83.2	3
39	3309.5	0.6	0
40	3397.9	2772.1	100
41	3799.4	209.7	7
42	3799.6	3.7	0

---

## 10.1.2 Amide

## Formamid



Monomer 10a

File: b-fam-mo.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -169.954850201  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -169.909588  
 Dipolmomente: X=-3.9920 Y=-0.6614 Z=0.0000 Gesamt=4.0464  
 Framework: CS[SG(CH3NO)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.419553	0.000000
2	8	1.197819	0.237357	0.000000
3	7	-0.937991	-0.565870	0.000000
4	1	-0.451079	1.429342	0.000000
5	1	-1.921888	-0.353195	0.000000
6	1	-0.643644	-1.531231	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	240.2	235.5	50
2	A'	568.4	10.5	2
3	A''	636.4	16.7	3
4	A''	1037.6	2.6	0
5	A'	1053.8	5.3	1
6	A'	1263.4	116.8	25
7	A'	1416.8	6.5	1
8	A'	1618.7	62.3	13
9	A'	1791.3	465.8	100
10	A'	2945.5	104.2	22
11	A'	3579.5	35.5	7
12	A'	3716.2	44.9	9

File: bp-fam-mo.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -169.965525387  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -169.920272  
 Dipolmomente: X=-3.8348 Y=-0.7194 Z=0.0000 Gesamt=3.9017  
 Framework: CS[SG(CH3NO)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.417863	0.000000
2	8	1.195823	0.237051	0.000000
3	7	-0.936265	-0.564502	0.000000
4	1	-0.453111	1.425705	0.000000

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
5	1	-1.916976	-0.350622	0.000000
6	1	-0.642642	-1.527152	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	210.2	200.5	52
2	A'	568.3	11.0	2
3	A''	645.9	15.2	3
4	A''	1045.2	1.4	0
5	A'	1054.7	4.5	1
6	A'	1267.9	103.1	26
7	A'	1422.1	5.9	1
8	A'	1616.6	61.7	16
9	A'	1803.9	384.0	100
10	A'	2930.9	105.2	27
11	A'	3579.9	30.9	8
12	A'	3718.2	38.0	9

File: m-fam-mo.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -169.877976959  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -169.832483  
 Dipolmomente: X=-3.9999 Y=-0.6366 Z=0.0000 Gesamt=4.0502  
 Framework: CS[SG(CH3NO)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.419513	0.000000
2	8	1.195989	0.237327	0.000000
3	7	-0.936794	-0.565843	0.000000
4	1	-0.448994	1.428377	0.000000
5	1	-1.919429	-0.353419	0.000000
6	1	-0.641929	-1.529745	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	236.5	239.2	50
2	A'	572.1	10.8	2
3	A''	636.4	17.2	3
4	A''	1046.3	2.4	0
5	A'	1060.7	5.7	1
6	A'	1269.5	120.9	25
7	A'	1424.3	6.6	1
8	A'	1628.2	64.6	13
9	A'	1801.4	476.9	100
10	A'	2964.5	100.7	21
11	A'	3596.4	37.9	7
12	A'	3733.2	47.0	9

File: l-fam-mo.log  
 Rechenmethode: **RBLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB-LYP): -169.914429221  
 E(RB-LYP)+ZPE: -169.870747  
 Dipolmomente: X=-3.8965 Y=-0.7102 Z=0.0000 Gesamt=3.9607  
 Framework: CS[SG(CH3NO)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.423570	0.000000
2	8	1.210493	0.238500	0.000000
3	7	-0.947595	-0.570065	0.000000
4	1	-0.457477	1.439328	0.000000
5	1	-1.939490	-0.354396	0.000000
6	1	-0.653808	-1.543893	0.000000
1	6	0.000000	0.423570	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A"	217.6	218.3	52
2	A'	548.9	8.8	2
3	A"	624.8	12.9	3
4	A"	988.7	5.0	1
5	A'	1012.8	5.9	1
6	A'	1214.3	103.0	24
7	A'	1371.2	7.5	1
8	A'	1570.2	47.7	11
9	A'	1711.5	414.6	100
10	A'	2846.1	119.0	28
11	A'	3466.9	19.7	4
12	A'	3601.4	29.9	7

File: mp-fam-mo-cl.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -168.985789319  
 E(MP2): -169.5056473  
 E(MP2)+ZPE: -169.459528  
 Dipolmomente: X=-4.0140 Y=1.3053 Z=0.6264 Gesamt=4.2671  
 Framework: Cl[X(CH3NO)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.161688	0.389653	0.002699
2	8	1.198171	-0.246906	0.006585
3	7	-1.090814	-0.159646	-0.048782
4	1	0.137474	1.493928	0.001087
5	1	-1.888673	0.415790	0.168157
6	1	-1.168596	-1.154866	0.103352

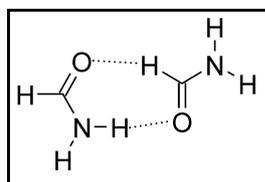
Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	396.9	255.8	62
2	566.7	9.7	2
3	620.5	37.8	9
4	1041.2	3.3	0
5	1073.5	8.8	2

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
6	1279.2	114.8	28
7	1438.5	3.9	0
8	1628.9	52.1	12
9	1798.1	409.6	99
10	3022.8	92.1	22
11	3617.2	44.1	10
12	3760.1	50.8	12

File: h-fam-mo.log  
 Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -168.988279818  
 E(RHF)+ZPE: -168.939686  
 Dipolmomente: X=-4.1894 Y=-0.4773 Z=0.0000 Gesamt=4.2165  
 Framework: CS[SG(CH3NO)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.414897	0.000000
2	8	1.176724	0.247353	0.000000
3	7	-0.921839	-0.570543	0.000000
4	1	-0.445094	1.412616	0.000000
5	1	-1.892211	-0.368197	0.000000
6	1	-0.623609	-1.518828	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	168.0	286.2	46
2	A'	618.5	16.1	2
3	A''	655.6	23.5	3
4	A'	1148.1	12.8	2
5	A''	1173.1	0.0	0
6	A'	1358.6	172.4	28
7	A'	1542.1	11.4	1
8	A'	1765.4	75.4	12
9	A'	1955.8	611.6	100
10	A'	3162.8	91.7	14
11	A'	3820.5	61.4	10
12	A'	3961.8	68.9	11

Offenes Dimer **10b**

File: b-fam-dl.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -339.923501411  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -339.830266  
 Dipolmomente: X=-1.6215 Y=0.7058 Z=0.0000 Gesamt=1.7684  
 Framework: CS[SG(C2H6N2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.086566	1.029543	0.000000
2	8	-1.552343	-0.102385	0.000000
3	7	-1.840531	2.152594	0.000000
4	1	0.000000	1.208677	0.000000
5	1	-1.412952	3.064027	0.000000
6	1	-2.847381	2.080546	0.000000
7	6	1.906042	-1.214099	0.000000
8	8	2.000738	0.003421	0.000000
9	7	0.746870	-1.905438	0.000000
10	1	2.800513	-1.864287	0.000000
11	1	-0.148202	-1.407887	0.000000
12	1	0.759628	-2.912121	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	57.1	27.0	3
2	A'	98.0	21.3	2
3	A''	115.1	0.1	0
4	A'	127.2	0.5	0
5	A''	157.0	33.4	4
6	A'	175.5	43.4	5
7	A''	309.1	225.0	29
8	A''	437.6	141.1	18
9	A'	578.7	29.2	3
10	A'	615.0	7.4	0
11	A''	656.0	17.3	2
12	A''	807.6	51.9	6
13	A''	1048.0	5.1	0
14	A'	1067.9	3.0	0
15	A''	1085.2	3.9	0
16	A'	1089.7	0.7	0
17	A'	1277.0	176.3	22
18	A'	1315.8	107.5	13
19	A'	1416.9	15.3	1
20	A'	1438.2	31.5	4
21	A'	1619.8	44.3	5
22	A'	1640.3	21.9	2
23	A'	1736.7	137.9	17
24	A'	1774.1	772.7	100
25	A'	2945.1	144.4	18
26	A'	3013.0	18.5	2
27	A'	3357.4	550.9	71
28	A'	3578.5	40.1	5
29	A'	3673.3	81.5	10
30	A'	3714.6	51.2	6

File: bp-fam-dl-cs.log  
 Rechenmethode: **B3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -339.946034323  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -339.852618  
 Dipolmomente: X=-1.7328 Y=0.7801 Z=0.0000 Gesamt=1.9003  
 Framework: CS[SG(C2H6N2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.087472	1.009250	0.000000
2	8	-1.572228	-0.112857	0.000000
3	7	-1.819729	2.141695	0.000000
4	1	0.000000	1.170958	0.000000
5	1	-1.376924	3.042650	0.000000
6	1	-2.824893	2.086821	0.000000
7	6	1.900003	-1.204546	0.000000
8	8	2.014176	0.009172	0.000000
9	7	0.736603	-1.880253	0.000000
10	1	2.783822	-1.867328	0.000000
11	1	-0.153231	-1.377697	0.000000
12	1	0.742333	-2.884247	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A"	58.7	24.9	3
2	A'	100.9	19.8	3
3	A"	116.2	0.4	0
4	A'	130.4	0.6	0
5	A"	169.2	26.0	4
6	A'	177.7	46.1	7
7	A"	298.8	193.8	29
8	A"	442.8	117.6	18
9	A'	578.9	30.8	4
10	A'	621.7	8.0	1
11	A"	665.6	15.4	2
12	A"	806.7	40.7	6
13	A"	1053.8	3.0	0
14	A'	1070.6	2.4	0
15	A'	1094.3	0.4	0
16	A"	1098.6	1.7	0
17	A'	1282.7	159.8	24
18	A'	1323.1	96.3	14
19	A'	1421.9	12.8	1
20	A'	1447.9	31.5	4
21	A'	1619.6	45.8	7
22	A'	1646.0	23.8	3
23	A'	1745.2	126.0	19
24	A'	1784.9	647.5	100
25	A'	2931.4	147.8	22
26	A'	3008.7	20.4	3
27	A'	3341.0	579.9	89
28	A'	3578.9	36.1	5
29	A'	3672.7	72.3	11
30	A'	3716.3	44.8	6

File: m-fam-dl.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -339.771468571  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -339.677701  
 Dipolmomente: X=-1.5362 Y=0.6606 Z=0.0000 Gesamt=1.6722  
 Framework: CS[SG(C2H6N2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.084428	1.021066	0.000000
2	8	-1.544591	-0.111295	0.000000
3	7	-1.843251	2.139249	0.000000
4	1	0.000000	1.203729	0.000000
5	1	-1.420417	3.051481	0.000000
6	1	-2.848475	2.061788	0.000000
7	6	1.904974	-1.198743	0.000000
8	8	1.984490	0.018182	0.000000
9	7	0.755201	-1.902945	0.000000
10	1	2.806477	-1.836209	0.000000
11	1	-0.143797	-1.415859	0.000000
12	1	0.780095	-2.908094	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	56.9	27.5	3
2	A'	103.6	21.1	2
3	A''	114.2	0.1	0
4	A'	127.4	1.1	0
5	A''	156.7	33.8	4
6	A'	178.7	42.8	5
7	A''	309.9	229.1	28
8	A''	437.5	143.2	17
9	A'	582.7	30.0	3
10	A'	618.2	7.6	0
11	A''	657.4	17.7	2
12	A''	809.7	53.3	6
13	A''	1056.7	4.7	0
14	A'	1075.1	3.1	0
15	A''	1094.7	3.7	0
16	A'	1097.3	0.8	0
17	A'	1284.2	182.3	22
18	A'	1323.7	112.2	14
19	A'	1425.0	16.1	2
20	A'	1447.2	31.7	3
21	A'	1629.5	46.3	5
22	A'	1649.9	23.2	2
23	A'	1746.3	134.3	16
24	A'	1784.0	798.2	100
25	A'	2964.2	139.3	17
26	A'	3031.4	17.9	2
27	A'	3379.8	538.8	67
28	A'	3595.0	42.4	5
29	A'	3691.2	84.5	10
30	A'	3731.3	53.2	6

File: l-fam-dl.log  
 Rechenmethode: **RBLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB-LYP): -339.841119760  
 E(RB-LYP)+ZPE: -339.751103  
 Dipolmomente: X=-1.7875 Y=0.8078 Z=0.0000 Gesamt=1.9615  
 Framework: CS[SG(C2H6N2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.095145	1.047010	0.000000
2	8	-1.578011	-0.091869	0.000000
3	7	-1.843509	2.187930	0.000000
4	1	0.000000	1.219514	0.000000
5	1	-1.402583	3.102066	0.000000
6	1	-2.859170	2.128501	0.000000
7	6	1.919763	-1.244562	0.000000
8	8	2.036719	-0.016098	0.000000
9	7	0.737953	-1.921865	0.000000
10	1	2.806421	-1.918745	0.000000
11	1	-0.157667	-1.407735	0.000000
12	1	0.734513	-2.937006	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A"	55.9	24.5	3
2	A'	89.6	20.7	3
3	A"	112.4	0.6	0
4	A'	126.3	0.4	0
5	A"	151.9	31.3	4
6	A'	167.9	42.7	6
7	A"	283.7	207.3	31
8	A"	420.4	131.9	19
9	A'	559.1	25.9	3
10	A'	595.1	6.1	0
11	A"	641.9	14.0	2
12	A"	784.8	40.3	6
13	A"	999.8	8.4	1
14	A'	1029.3	3.2	0
15	A"	1036.0	6.6	0
16	A'	1049.2	0.9	0
17	A'	1230.3	156.6	23
18	A'	1265.7	94.3	14
19	A'	1371.3	15.5	2
20	A'	1391.3	37.5	5
21	A'	1570.7	25.5	3
22	A'	1588.8	17.5	2
23	A'	1663.8	146.7	22
24	A'	1697.6	661.2	99
25	A'	2846.0	167.8	25
26	A'	2917.4	21.8	3
27	A'	3241.4	572.2	86
28	A'	3468.0	24.1	3
29	A'	3555.5	61.3	9
30	A'	3601.8	37.0	5

File: mp-fam-dl-cl.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -337.983901351  
 E(MP2): -339.0259202  
 E(MP2)+ZPE: -338.931385  
 Dipolmomente: X=1.1487 Y=0.2823 Z=0.8747 Gesamt=1.4711  
 Framework: Cl[X(C2H6N2O2)]

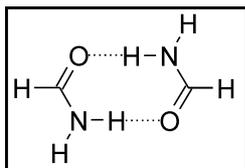
Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.500771	-0.080428	-0.008318
2	8	1.124634	1.085995	0.045513
3	7	2.807657	-0.451671	-0.043740
4	1	0.791435	-0.919337	-0.064045
5	1	3.051369	-1.420466	0.083371
6	1	3.511190	0.250692	0.131843
7	6	-2.247075	-0.305172	0.035467
8	8	-1.539143	-1.303310	-0.001173
9	7	-1.803784	0.971621	-0.081988
10	1	-3.344846	-0.373751	0.138375
11	1	-0.799157	1.151355	-0.043818
12	1	-2.443203	1.723973	0.116749

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	46.0	27.0	3
2	91.4	2.1	0
3	94.3	17.1	2
4	115.2	2.2	0
5	163.7	23.8	3
6	169.2	37.5	5
7	384.0	246.6	35
8	482.0	175.8	25
9	578.7	20.5	2
10	610.5	7.1	1
11	639.1	27.4	3
12	789.5	66.1	9
13	1051.5	4.1	0
14	1072.5	4.3	0
15	1094.0	5.8	0
16	1100.9	5.0	0
17	1293.1	167.9	24
18	1328.4	102.2	14
19	1440.0	11.7	1
20	1458.7	23.8	3
21	1629.9	39.9	5
22	1650.4	15.1	2
23	1761.0	157.3	22
24	1792.4	690.1	100
25	3018.5	126.6	18
26	3088.3	12.7	1
27	3442.3	488.2	70
28	3621.5	52.8	7
29	3723.3	102.8	14
30	3765.8	58.7	8

File: h-fam-dl.log  
Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
E(RHF): -337.989027079  
E(RHF)+ZPE: -337.889054  
Dipolmomente: X=-1.0589 Y=0.4698 Z=0.0000 Gesamt=1.1585  
Framework: CS[SG(C2H6N2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.076191	1.122221	0.000000
2	8	-1.548540	0.020649	0.000000
3	7	-1.803550	2.251790	0.000000
4	1	0.000000	1.282526	0.000000
5	1	-1.365353	3.141295	0.000000
6	1	-2.796310	2.198283	0.000000
7	6	1.881306	-1.321440	0.000000
8	8	2.001873	-0.131015	0.000000
9	7	0.716985	-1.982517	0.000000
10	1	2.753545	-1.979864	0.000000
11	1	-0.147506	-1.475123	0.000000
12	1	0.704232	-2.973786	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	53.2	26.8	2
2	A'	92.1	23.1	2
3	A''	97.0	0.1	0
4	A'	114.6	0.7	0
5	A''	133.0	49.3	4
6	A'	155.0	34.0	3
7	A''	270.6	281.2	25
8	A''	412.1	183.4	16
9	A'	625.8	31.3	2
10	A'	652.2	13.9	1
11	A''	678.3	21.9	2
12	A''	802.2	69.4	6
13	A'	1158.3	10.6	0
14	A'	1178.1	5.1	0
15	A''	1181.9	0.0	0
16	A''	1207.3	0.0	0
17	A'	1367.8	241.7	22
18	A'	1404.1	157.7	14
19	A'	1543.7	24.0	2
20	A'	1559.2	26.1	2
21	A'	1766.2	66.0	6
22	A'	1786.9	34.5	3
23	A'	1900.6	117.6	10
24	A'	1938.2	1084.4	100
25	A'	3157.1	118.2	10
26	A'	3230.3	15.9	1
27	A'	3708.8	304.5	28
28	A'	3818.5	64.1	5
29	A'	3930.6	121.9	11
30	A'	3959.0	70.9	6

Cyclisches Dimer **10c**

File: b-fam-dc.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -339.930750061  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -339.836703  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C2H6N2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	8	-1.141226	1.425662	0.000000
2	6	-0.079431	2.039915	0.000000
3	7	1.141226	1.478820	0.000000
4	1	-0.062428	3.143372	0.000000
5	1	1.243347	0.457594	0.000000
6	1	1.962531	2.061257	0.000000
7	8	1.141226	-1.425662	0.000000
8	6	0.079431	-2.039915	0.000000
9	7	-1.141226	-1.478820	0.000000
10	1	0.062428	-3.143372	0.000000
11	1	-1.243347	-0.457594	0.000000
12	1	-1.962531	-2.061257	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	63.0	25.7	2
2	AU	131.6	51.5	4
3	AG	143.4	0.0	0
4	BG	169.3	0.0	0
5	AG	170.9	0.0	0
6	BU	212.6	95.8	8
7	AU	468.0	265.8	22
8	BG	481.1	0.0	0
9	AG	610.2	0.0	0
10	BU	630.8	14.5	1
11	BG	814.1	0.0	0
12	AU	855.8	111.5	9
13	BG	1049.3	0.0	0
14	AU	1056.5	17.2	1
15	BU	1094.6	0.0	0
16	AG	1101.2	0.0	0
17	BU	1326.2	194.6	16
18	AG	1337.9	0.0	0
19	AG	1418.6	0.0	0
20	BU	1419.6	45.6	3
21	AG	1638.9	0.0	0
22	BU	1646.6	32.8	2
23	AG	1741.1	0.0	0
24	BU	1771.7	929.4	78
25	BU	2969.7	287.6	24
26	AG	2972.7	0.0	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
27	AG	3300.3	0.0	0
28	BU	3341.8	1176.8	100
29	AG	3672.2	0.0	0
30	BU	3672.4	172.9	14

File: bp-fam-dc-c2h.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -339.953752072  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -339.859475  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C2H6N2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	8	-1.140046	1.445928	0.000000
2	6	-0.061160	2.026535	0.000000
3	7	1.140046	1.436018	0.000000
4	1	-0.013658	3.127816	0.000000
5	1	1.219772	0.414014	0.000000
6	1	1.971253	1.999447	0.000000
7	8	1.140046	-1.445928	0.000000
8	6	0.061160	-2.026535	0.000000
9	7	-1.140046	-1.436018	0.000000
10	1	0.013658	-3.127816	0.000000
11	1	-1.219772	-0.414014	0.000000
12	1	-1.971253	-1.999447	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	65.4	24.8	1
2	AU	140.2	41.2	3
3	AG	149.4	0.0	0
4	AG	174.1	0.0	0
5	BG	187.2	0.0	0
6	BU	220.7	99.8	7
7	AU	480.6	221.3	17
8	BG	495.3	0.0	0
9	AG	616.1	0.0	0
10	BU	640.3	15.5	1
11	BG	828.7	0.0	0
12	AU	862.2	87.4	6
13	BG	1056.8	0.0	0
14	AU	1065.4	11.9	0
15	BU	1099.9	0.4	0
16	AG	1107.2	0.0	0
17	BU	1334.4	173.3	13
18	AG	1347.9	0.0	0
19	AG	1424.4	0.0	0
20	BU	1424.7	40.6	3
21	AG	1645.5	0.0	0
22	BU	1652.1	32.8	2
23	AG	1747.2	0.0	0
24	BU	1781.0	792.9	61
25	BU	2957.5	302.7	23

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
26	AG	2960.9	0.0	0
27	AG	3263.8	0.0	0
28	BU	3312.5	1287.3	100
29	AG	3670.5	0.0	0
30	BU	3670.8	152.8	11

File: m-fam-dc.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -339.778729734  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -339.684157  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C2H6N2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	8	-1.139723	1.423195	0.000000
2	6	-0.080609	2.038564	0.000000
3	7	1.139723	1.479873	0.000000
4	1	-0.066516	3.140399	0.000000
5	1	1.242471	0.460695	0.000000
6	1	1.959184	2.062715	0.000000
7	8	1.139723	-1.423195	0.000000
8	6	0.080609	-2.038564	0.000000
9	7	-1.139723	-1.479873	0.000000
10	1	0.066516	-3.140399	0.000000
11	1	-1.242471	-0.460695	0.000000
12	1	-1.959184	-2.062715	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	63.1	26.7	2
2	AU	129.6	51.0	4
3	AG	142.5	0.0	0
4	BG	168.6	0.0	0
5	AG	173.3	0.0	0
6	BU	213.7	94.8	8
7	AU	469.1	272.4	23
8	BG	481.4	0.0	0
9	AG	613.3	0.0	0
10	BU	632.9	15.2	1
11	BG	812.2	0.0	0
12	AU	855.5	114.9	10
13	BG	1057.5	0.0	0
14	AU	1064.3	15.2	1
15	BU	1101.4	0.0	0
16	AG	1107.9	0.0	0
17	BU	1333.4	202.4	17
18	AG	1345.1	0.0	0
19	AG	1426.6	0.0	0
20	BU	1427.4	47.0	4
21	AG	1649.5	0.0	0
22	BU	1656.5	33.9	2
23	AG	1750.1	0.0	0
24	BU	1781.6	954.2	83
25	BU	2988.3	276.9	24

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
26	AG	2991.1	0.0	0
27	AG	3328.4	0.0	0
28	BU	3368.8	1147.3	100
29	AG	3689.7	0.0	0
30	BU	3689.8	180.5	15

File: l-fam-dc.log  
 Rechenmethode: **RBLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB-LYP): -339.848349768  
 E(RB-LYP)+ZPE: -339.757540  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C2H6N2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	8	-1.152766	1.450039	0.000000
2	6	-0.071319	2.057292	0.000000
3	7	1.152766	1.475572	0.000000
4	1	-0.038003	3.167977	0.000000
5	1	1.245346	0.444031	0.000000
6	1	1.987569	2.053233	0.000000
7	8	1.152766	-1.450039	0.000000
8	6	0.071319	-2.057292	0.000000
9	7	-1.152766	-1.475572	0.000000
10	1	0.038003	-3.167977	0.000000
11	1	-1.245346	-0.444031	0.000000
12	1	-1.987569	-2.053233	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	62.6	22.5	1
2	AU	126.2	50.4	4
3	AG	144.8	0.0	0
4	BG	158.9	0.0	0
5	AG	165.1	0.0	0
6	BU	207.3	95.3	7
7	AU	449.9	246.9	19
8	BG	465.4	0.0	0
9	AG	591.4	0.0	0
10	BU	613.6	11.7	0
11	BG	797.8	0.0	0
12	AU	833.2	84.3	6
13	BG	1000.7	0.0	0
14	AU	1011.2	27.9	2
15	BU	1056.2	0.3	0
16	AG	1062.6	0.0	0
17	BU	1278.5	167.9	13
18	AG	1290.5	0.0	0
19	AG	1372.5	0.0	0
20	BU	1374.2	46.9	3
21	AG	1580.9	0.0	0
22	BU	1598.1	13.6	1
23	AG	1673.7	0.0	0
24	BU	1694.1	821.9	65

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
25	BU	2874.3	340.5	27
26	AG	2878.0	0.0	0
27	AG	3172.4	0.0	0
28	BU	3215.5	1250.4	100
29	AG	3555.3	0.0	0
30	BU	3556.0	131.0	10

File: mp-fam-dc-c2.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -337.988902061  
 E(MP2): -339.0324838  
 E(MP2)+ZPE: -338.937457  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.8514 Gesamt=0.8514  
 Framework: C2[X(C2H6N2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	8	-0.604374	1.733852	0.005709
2	6	0.604374	1.954439	0.045924
3	7	1.569557	1.018519	-0.072570
4	1	0.994321	2.980037	0.156763
5	1	1.314487	0.027800	-0.066357
6	1	2.526693	1.282716	0.096367
7	8	0.604374	-1.733852	0.005709
8	6	-0.604374	-1.954439	0.045924
9	7	-1.569557	-1.018519	-0.072570
10	1	-0.994321	-2.980037	0.156763
11	1	-1.314487	-0.027800	-0.066357
12	1	-2.526693	-1.282716	0.096367

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A	40.3	30.4	3
2	A	126.2	16.0	1
3	A	140.4	14.7	1
4	B	155.2	10.2	1
5	A	162.5	1.8	0
6	B	202.2	83.1	8
7	A	482.5	273.8	27
8	B	488.2	50.0	4
9	A	606.2	0.1	0
10	B	620.0	14.5	1
11	B	779.9	10.3	1
12	A	815.1	97.3	9
13	B	1048.6	0.1	0
14	A	1059.6	15.6	1
15	B	1100.9	0.9	0
16	A	1108.5	4.0	0
17	B	1335.9	182.5	18
18	A	1348.9	0.7	0
19	A	1438.9	0.2	0
20	B	1440.6	36.9	3
21	A	1649.0	1.1	0
22	B	1652.7	29.3	2
23	A	1763.9	0.0	0

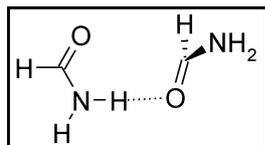
Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
24	B	1792.7	859.3	85
25	B	3040.7	246.1	24
26	A	3043.2	1.5	0
27	A	3393.2	0.0	0
28	B	3432.4	1009.8	100
29	A	3721.8	1.5	0
30	B	3722.0	221.2	21

File: h-fam-dc.log  
 Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -337.994365998  
 E(RHF)+ZPE: -337.893477  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C2H6N2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	8	-1.124035	1.436360	0.000000
2	6	-0.112682	2.082593	0.000000
3	7	1.124035	1.581279	0.000000
4	1	-0.144175	3.173793	0.000000
5	1	1.265985	0.588109	0.000000
6	1	1.908666	2.187466	0.000000
7	8	1.124035	-1.436360	0.000000
8	6	0.112682	-2.082593	0.000000
9	7	-1.124035	-1.581279	0.000000
10	1	0.144175	-3.173793	0.000000
11	1	-1.265985	-0.588109	0.000000
12	1	-1.908666	-2.187466	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	59.7	26.0	2
2	AU	119.6	76.2	6
3	AG	128.8	0.0	0
4	AG	150.6	0.0	0
5	BG	153.1	0.0	0
6	BU	179.5	75.8	6
7	AU	447.2	354.6	28
8	BG	452.5	0.0	0
9	AG	649.2	0.0	0
10	BU	659.7	28.3	2
11	BG	791.6	0.0	0
12	AU	840.3	149.8	12
13	BU	1181.6	5.1	0
14	BG	1183.1	0.0	0
15	AU	1184.5	0.2	0
16	AG	1185.6	0.0	0
17	BU	1409.8	305.9	24
18	AG	1418.1	0.0	0
19	BU	1543.4	61.7	4
20	AG	1543.9	0.0	0
21	BU	1787.5	76.8	6
22	AG	1789.5	0.0	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
23	AG	1898.4	0.0	0
24	BU	1935.1	1242.5	100
25	BU	3171.3	228.1	18
26	AG	3173.3	0.0	0
27	AG	3685.9	0.0	0
28	BU	3707.5	629.8	50
29	BU	3927.3	255.6	20
30	AG	3927.5	0.0	0



Übergangszustand 10d

File: b-fam-rts.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -339.919613783  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -339.826968  
 Dipolmomente: X=0.0466 Y=-0.2472 Z=-0.5401 Gesamt=0.5958  
 Framework: C1[X(C2H6N2O2)]  
 Imaginäre Freq.: **-86.7 cm<sup>-1</sup>**  
 IRC Forward: OK  
 IRC Reverse: OK

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.696088	0.212353	0.422420
2	8	1.186285	1.253272	0.041428
3	7	2.186650	-0.748830	-0.392755
4	1	1.828108	-0.020627	1.492104
5	1	2.396004	-1.659608	-0.014844
6	1	1.974486	-0.690303	-1.378796
7	6	-2.062424	-0.380687	0.003516
8	8	-1.248672	-1.266023	0.201037
9	7	-1.765694	0.924664	-0.190101
10	1	-3.149227	-0.584883	-0.038261
11	1	-0.798144	1.237586	-0.151267
12	1	-2.500810	1.599006	-0.324272

File: bp-fam-rts.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -339.941706016  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -339.848969  
 Dipolmomente: X=-0.1166 Y=-0.2756 Z=-0.5510 Gesamt=0.6270  
 Framework: C1[X(C2H6N2O2)]  
 Imaginäre Freq.: **-97.6 cm<sup>-1</sup>**  
 IRC Forward: OK  
 IRC Reverse: OK

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.668864	0.206518	0.415682
2	8	1.223186	1.272035	0.028995
3	7	2.092128	-0.790191	-0.389382
4	1	1.796829	-0.024518	1.484927
5	1	2.221462	-1.708792	-0.001249
6	1	1.860327	-0.732522	-1.368529
7	6	-2.026156	-0.366604	0.008425
8	8	-1.218177	-1.255223	0.202464
9	7	-1.726669	0.933875	-0.184506
10	1	-3.113084	-0.564086	-0.030284
11	1	-0.760633	1.242884	-0.148907
12	1	-2.459433	1.607278	-0.315054

File: m-fam-rts.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -339.767577933  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -339.674349  
 Dipolmomente: X=-0.2303 Y=-0.3320 Z=-0.5397 Gesamt=0.6742  
 Framework: C1[X(C2H6N2O2)]  
 Imaginäre Freq.: **-90.4 cm<sup>-1</sup>**  
 IRC Forward: OK  
 IRC Reverse: OK

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.669341	0.218498	0.419333
2	8	1.169135	1.264558	0.045076
3	7	2.137047	-0.748093	-0.400863
4	1	1.811577	-0.014277	1.486074
5	1	2.324099	-1.663041	-0.024311
6	1	1.902652	-0.689672	-1.380717
7	6	-2.021825	-0.396289	0.008892
8	8	-1.181839	-1.253855	0.209954
9	7	-1.764855	0.914323	-0.195321
10	1	-3.100080	-0.634374	-0.027661
11	1	-0.807722	1.254098	-0.159575
12	1	-2.519334	1.564781	-0.330108

File: l-fam-rts.log  
 Rechenmethode: **RBLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB-LYP): -339.837370851  
 E(RB-LYP)+ZPE: -339.748032  
 Dipolmomente: X=0.8995 Y=0.0200 Z=-0.4335 Gesamt=0.9987  
 Framework: C1[X(C2H6N2O2)]  
 Imaginäre Freq.: **-82.2 cm<sup>-1</sup>**  
 IRC Forward: OK  
 IRC Reverse: OK

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.778085	0.205550	0.431019
2	8	1.214531	1.218576	0.012703

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
3	7	2.361565	-0.740397	-0.360309
4	1	1.884435	-0.014873	1.514343
5	1	2.652929	-1.627775	0.039539
6	1	2.205385	-0.698951	-1.365467
7	6	-2.186066	-0.345804	-0.010222
8	8	-1.437196	-1.306815	0.165031
9	7	-1.784469	0.950119	-0.162778
10	1	-3.294051	-0.458606	-0.063007
11	1	-0.788832	1.192139	-0.121412
12	1	-2.470338	1.687443	-0.289049

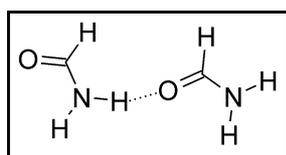
File: mp-fam-rts.log  
 Rechenmethode: **MP2/6-311++G\*\***  
 E(RHF): -337.981669520  
 E(MP2): -339.0238314  
 E(MP2)+ZPE: -338.929619  
 Dipolmomente: X=1.2741 Y=-0.5850 Z=0.4352 Gesamt=1.4680  
 Framework: C1[X(C2H6N2O2)]  
 Imaginäre Freq.: **-69.2 cm<sup>-1</sup>**

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.624500	0.162623	-0.430536
2	8	-1.189228	1.278050	-0.179357
3	7	-2.031611	-0.737917	0.504506
4	1	-1.768545	-0.194638	-1.462371
5	1	-2.063789	-1.706618	0.224146
6	1	-1.739054	-0.558436	1.455237
7	6	1.968063	-0.382591	-0.044359
8	8	1.112316	-1.223332	-0.280489
9	7	1.720445	0.901358	0.330007
10	1	3.046938	-0.617920	-0.082333
11	1	0.773414	1.256092	0.231076
12	1	2.483117	1.559492	0.320784

File: h-fam-rts.log  
 Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -337.986428901  
 E(RHF)+ZPE: -337.886692  
 Dipolmomente: X=-0.7317 Y=-0.3723 Z=-0.2503 Gesamt=0.8583  
 Framework: C1[X(C2H6N2O2)]  
 Imaginäre Freq.: **-94.0 cm<sup>-1</sup>**  
 IRC Forward: OK  
 IRC Reverse: OK

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.763931	0.224174	0.402054
2	8	1.240437	1.238038	0.046072
3	7	2.133698	-0.779660	-0.413908
4	1	2.018697	0.047095	1.447631
5	1	2.315989	-1.671073	-0.014780
6	1	1.765912	-0.773436	-1.339219

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
7	6	-2.066913	-0.374443	0.028650
8	8	-1.249521	-1.223470	0.226085
9	7	-1.801809	0.918574	-0.208230
10	1	-3.135851	-0.603002	0.021239
11	1	-0.857000	1.244532	-0.191522
12	1	-2.540401	1.568547	-0.329861

Offenes trans-Dimer **10e**

File: b-fam-dt-t1.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -339.919584401  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -339.827238  
 Dipolmomente: X=-5.7542 Y=-6.8719 Z=0.0000 Gesamt=8.9629  
 Framework: CS[SG(C2H6N2O2)]  
 Imaginäre Freq.: **-20.2 cm<sup>-1</sup>**

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	8	-1.236155	-0.709856	0.000000
2	6	-1.280057	-1.926766	0.000000
3	7	-2.421554	-2.652086	0.000000
4	1	-0.371575	-2.553151	0.000000
5	1	-3.312918	-2.177819	0.000000
6	1	-2.402161	-3.658849	0.000000
7	8	2.759982	2.443322	0.000000
8	6	1.958675	1.527653	0.000000
9	7	0.611988	1.655113	0.000000
10	1	2.278511	0.467788	0.000000
11	1	0.000000	0.845892	0.000000
12	1	0.212777	2.581898	0.000000

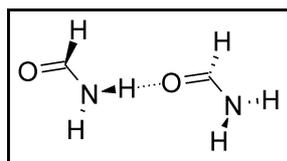
File: bp-fam-dt-t1.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -339.941246448  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -339.848919  
 Dipolmomente: X=-5.9531 Y=-5.9582 Z=0.0000 Gesamt=8.4225  
 Framework: CS[SG(C2H6N2O2)]  
 Imaginäre Freq.: **-35.6 cm<sup>-1</sup>**

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	8	-1.415631	-0.472941	0.000000
2	6	-1.412911	-1.688896	0.000000
3	7	-2.522579	-2.455117	0.000000
4	1	-0.483652	-2.280852	0.000000
5	1	-3.428681	-2.015997	0.000000
6	1	-2.463805	-3.457454	0.000000

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
7	8	2.977065	2.036364	0.000000
8	6	2.037166	1.268007	0.000000
9	7	0.732856	1.612120	0.000000
10	1	2.174790	0.170036	0.000000
11	1	0.000000	0.913810	0.000000
12	1	0.492406	2.589387	0.000000

File: m-fam-dt-t1.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -339.767036558  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -339.674167  
 Dipolmomente: X=-5.9342 Y=-6.6898 Z=0.0000 Gesamt=8.9424  
 Framework: CS[SG(C2H6N2O2)]  
 Imaginäre Freq.: **-18.6 cm<sup>-1</sup>**

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	8	-1.251296	-0.661138	0.000000
2	6	-1.322459	-1.874951	0.000000
3	7	-2.478829	-2.573411	0.000000
4	1	-0.428873	-2.519698	0.000000
5	1	-3.357842	-2.079080	0.000000
6	1	-2.482052	-3.579062	0.000000
7	8	2.825177	2.331483	0.000000
8	6	1.983486	1.455340	0.000000
9	7	0.645567	1.644535	0.000000
10	1	2.254344	0.383540	0.000000
11	1	0.000000	0.863748	0.000000
12	1	0.290044	2.587598	0.000000

Offenes trans-Dimer **10f**

File: b-fam-dt-rw.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -339.919698005  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -339.827289  
 Dipolmomente: X=-8.7735 Y=-0.3463 Z=1.0241 Gesamt=8.8398  
 Framework: C1[X(C2H6N2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-2.230466	-0.173013	0.304321
2	8	-1.361786	0.410261	-0.319814
3	7	-3.530321	-0.228402	-0.063673
4	1	-2.023316	-0.715843	1.242515
5	6	2.420905	-0.348526	-0.159390
6	1	-4.209568	-0.728197	0.486563
7	1	-3.827591	0.233393	-0.910984

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
8	8	3.624899	-0.358765	0.016271
9	7	1.582594	0.659569	0.177570
10	1	1.886999	-1.198897	-0.624403
11	1	0.587068	0.612625	-0.017749
12	1	1.972956	1.496010	0.585541

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	18.4	1.8	0
2	24.0	4.3	0
3	34.9	3.0	0
4	76.6	13.1	1
5	89.0	4.1	0
6	136.1	13.7	1
7	312.9	225.9	21
8	501.8	234.5	22
9	578.4	17.1	1
10	589.8	21.4	2
11	650.3	19.3	1
12	741.4	7.7	0
13	1043.9	2.4	0
14	1044.6	2.6	0
15	1067.1	1.5	0
16	1090.0	3.7	0
17	1280.3	159.6	15
18	1286.6	76.4	7
19	1415.2	13.7	1
20	1418.0	15.2	1
21	1622.5	50.3	4
22	1646.3	44.2	4
23	1767.1	1051.8	100
24	1780.3	120.2	11
25	2937.1	110.0	10
26	2977.1	71.3	6
27	3483.2	476.8	45
28	3577.1	49.4	4
29	3660.8	132.7	12
30	3712.3	56.0	5

File: bp-fam-dt-rw.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -339.941779887  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -339.848997  
 Dipolmomente: X=7.8250 Y=-0.7798 Z=1.1300 Gesamt=7.9446  
 Framework: C1[X(C2H6N2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.025029	-0.179371	0.193661
2	8	1.397348	0.684163	-0.391004
3	7	3.346313	-0.397870	0.041792
4	1	1.552890	-0.868518	0.911963
5	1	3.814778	-1.129426	0.545286

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
6	1	3.873507	0.174774	-0.596957
7	6	-2.301239	-0.262627	-0.273910
8	8	-3.463096	-0.459147	0.017048
9	7	-1.474165	0.617077	0.332552
10	1	-1.794666	-0.812348	-1.088444
11	1	-0.520902	0.755500	0.015380
12	1	-1.847405	1.197429	1.065506

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	28.3	6.5	0
2	48.8	2.2	0
3	61.8	5.2	0
4	84.9	9.5	1
5	98.0	2.1	0
6	150.4	20.7	3
7	312.6	193.9	28
8	511.1	225.5	33
9	580.5	15.7	2
10	591.8	22.2	3
11	661.5	16.7	2
12	769.7	23.9	3
13	1052.6	1.2	0
14	1057.1	1.4	0
15	1069.5	1.2	0
16	1091.9	5.5	0
17	1282.6	140.5	20
18	1293.4	72.9	10
19	1421.1	11.1	1
20	1423.0	16.4	2
21	1622.2	49.9	7
22	1645.3	43.1	6
23	1775.7	677.9	100
24	1793.3	277.9	40
25	2923.7	109.5	16
26	2972.5	59.7	8
27	3455.6	487.4	71
28	3578.8	46.7	6
29	3654.4	105.6	15
30	3715.1	50.1	7

File: m-fam-dt-rw.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -339.767158445  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -339.674203  
 Dipolmomente: X=8.7243 Y=-0.3226 Z=1.0858 Gesamt=8.7975  
 Framework: C1[X(C2H6N2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.205627	-0.159555	0.305421
2	8	1.350236	0.416104	-0.340470
3	7	3.505060	-0.244884	-0.052593
4	1	1.984349	-0.669432	1.256987

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
5	6	-2.394163	-0.346792	-0.159303
6	1	4.173017	-0.735905	0.516708
7	1	3.813119	0.187073	-0.910295
8	8	-3.595305	-0.378525	0.020303
9	7	-1.572843	0.673049	0.178980
10	1	-1.848698	-1.185030	-0.629101
11	1	-0.579444	0.642643	-0.023201
12	1	-1.976093	1.500940	0.588822

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	20.2	4.9	0
2	25.6	1.5	0
3	35.5	3.1	0
4	75.8	13.8	1
5	90.4	3.3	0
6	142.6	14.3	1
7	315.9	229.2	21
8	504.0	238.9	22
9	582.3	17.0	1
10	593.8	22.7	2
11	652.4	19.9	1
12	746.9	8.8	0
13	1053.2	2.1	0
14	1053.8	2.3	0
15	1074.7	1.5	0
16	1098.9	4.3	0
17	1287.4	162.7	15
18	1294.3	81.7	7
19	1422.9	14.0	1
20	1426.1	15.7	1
21	1632.4	51.9	4
22	1655.7	46.5	4
23	1777.2	1061.9	100
24	1790.7	135.5	12
25	2955.1	108.1	10
26	2994.4	68.3	6
27	3501.0	479.4	45
28	3593.4	51.9	4
29	3677.5	137.9	12
30	3728.8	58.3	5

File: l-fam-dt-rw.log  
 Rechenmethode: **RBLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB-LYP): -339.837869936  
 E(RB-LYP)+ZPE: -339.748598  
 Dipolmomente: X=-8.6378 Y=-0.4124 Z=0.9612 Gesamt=8.7009  
 Framework: C1[X(C2H6N2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-2.238563	-0.206708	0.276928
2	8	-1.386865	0.455582	-0.316441

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
3	7	-3.563015	-0.229224	-0.049279
4	1	-1.997812	-0.855315	1.146459
5	1	-4.224882	-0.797528	0.469790
6	1	-3.897243	0.325199	-0.834347
7	6	2.446965	-0.344965	-0.176244
8	8	3.662205	-0.355197	0.011451
9	7	1.590170	0.648452	0.204544
10	1	1.915909	-1.179878	-0.689367
11	1	0.588147	0.605928	-0.003058
12	1	1.972656	1.473957	0.659495

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	23.8	4.1	0
2	29.3	0.8	0
3	36.5	3.7	0
4	76.1	9.7	1
5	86.7	5.5	0
6	129.4	13.7	1
7	286.3	208.5	22
8	480.0	216.2	22
9	559.3	13.8	1
10	570.0	18.9	2
11	637.2	15.4	1
12	724.9	7.5	0
13	994.5	4.5	0
14	996.2	5.0	0
15	1027.9	1.6	0
16	1047.9	4.7	0
17	1232.2	136.9	14
18	1238.5	71.0	7
19	1369.8	17.3	1
20	1372.8	16.2	1
21	1574.1	34.5	3
22	1597.2	32.8	3
23	1690.6	941.7	100
24	1701.9	112.9	11
25	2837.8	126.8	13
26	2881.8	80.6	8
27	3366.2	470.2	49
28	3468.2	32.4	3
29	3548.2	112.7	11
30	3600.7	40.3	4

File: mp-fam-dt-rw.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -337.980298618  
 E(MP2): -339.0218646  
 E(MP2)+ZPE: -338.928395  
 Dipolmomente: X=7.9807 Y=-1.4821 Z=0.7962 Gesamt=8.1561  
 Framework: C1[X(C2H6N2O2)]

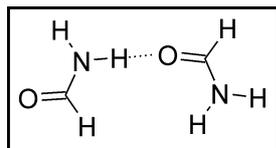
Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.997792	-0.208766	0.180145
2	8	1.389980	0.718060	-0.336282
3	7	3.336931	-0.403817	0.071323
4	1	1.502828	-0.961474	0.816786
5	1	3.746027	-1.268878	0.385467
6	1	3.852098	0.165976	-0.584025
7	6	-2.248963	-0.277890	-0.263689
8	8	-3.394074	-0.570769	0.043194
9	7	-1.534468	0.757472	0.248480
10	1	-1.678294	-0.840287	-1.025349
11	1	-0.552208	0.871042	0.022365
12	1	-1.947915	1.299642	0.992101

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	14.4	6.9	0
2	24.0	3.2	0
3	38.4	0.7	0
4	65.5	3.4	0
5	77.8	12.9	1
6	148.1	18.6	2
7	374.2	259.3	32
8	428.7	244.3	30
9	579.3	13.7	1
10	587.1	15.7	1
11	638.0	26.6	3
12	745.4	8.6	1
13	1049.4	4.9	0
14	1053.9	3.1	0
15	1080.2	3.2	0
16	1097.4	7.5	0
17	1292.7	129.4	16
18	1302.2	101.3	12
19	1433.5	9.3	1
20	1441.6	11.3	1
21	1632.1	39.7	5
22	1652.7	42.0	5
23	1782.4	789.7	100
24	1793.1	245.5	31
25	3010.3	101.8	12
26	3044.1	56.6	7
27	3537.0	426.2	53
28	3620.4	62.6	7
29	3720.5	151.8	19
30	3764.3	64.7	8

File: h-fam-dt-rw.log  
Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
E(RHF): -337.986057735  
E(RHF)+ZPE: -337.886863  
Dipolmomente: X=9.2278 Y=0.4945 Z=0.7073 Gesamt=9.2681  
Framework: C1[X(C2H6N2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.419417	0.187307	0.357775
2	8	1.356456	0.175505	-0.186100
3	7	3.537655	-0.363094	-0.139013
4	1	2.566087	0.661220	1.329542
5	1	4.395134	-0.324378	0.357833
6	1	3.508466	-0.820590	-1.021750
7	6	-2.468765	-0.377204	0.061884
8	8	-3.661806	-0.369080	0.084811
9	7	-1.684880	0.690570	-0.156255
10	1	-1.895867	-1.292789	0.227986
11	1	-0.692993	0.603910	-0.189757
12	1	-2.111361	1.568278	-0.344615

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	10.1	0.9	0
2	23.9	4.7	0
3	30.3	3.7	0
4	59.9	17.3	1
5	73.4	4.2	0
6	119.2	9.9	0
7	290.6	277.7	19
8	469.3	305.5	21
9	624.1	24.1	1
10	634.9	20.0	1
11	675.6	26.2	1
12	740.7	0.8	0
13	1160.2	6.5	0
14	1179.1	5.9	0
15	1179.9	0.2	0
16	1182.2	4.7	0
17	1374.1	228.5	16
18	1379.9	132.0	9
19	1539.7	20.8	1
20	1542.3	20.7	1
21	1768.9	67.4	4
22	1787.7	61.6	4
23	1928.7	1395.0	100
24	1944.4	92.1	6
25	3159.4	94.9	6
26	3183.0	74.2	5
27	3782.8	263.0	18
28	3814.9	69.5	4
29	3927.0	189.0	13
30	3955.4	77.9	5

Offenes trans-Dimer **10g**

File: b-fam-dt-t2.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -339.919431636  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -339.827228  
 Dipolmomente: X=-6.5293 Y=-6.6890 Z=0.0000 Gesamt=9.3475  
 Framework: CS[SG(C2H6N2O2)]  
 Imaginäre Freq.: **-27.3 cm<sup>-1</sup>**

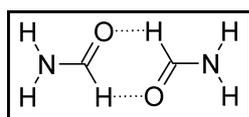
Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	8	-0.887259	-0.974134	0.000000
2	6	-1.882865	-1.674335	0.000000
3	7	-1.869317	-3.027029	0.000000
4	1	-2.903357	-1.254078	0.000000
5	1	-0.986122	-3.516955	0.000000
6	1	-2.724470	-3.558631	0.000000
7	8	2.590809	2.676126	0.000000
8	6	1.884418	1.685297	0.000000
9	7	0.530303	1.683784	0.000000
10	1	2.303264	0.661745	0.000000
11	1	0.000000	0.819947	0.000000
12	1	0.046064	2.568978	0.000000

File: bp-fam-dt-t2.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP) -339.940975898  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE -339.848789  
 Dipolmomente: X=-6.4488 Y=-6.5350 Z=0.0000 Gesamt=9.1811  
 Framework: CS[SG(C2H6N2O2)]  
 Imaginäre Freq.: **-35.7 cm<sup>-1</sup>**

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	8	-0.746735	-1.066757	0.000000
2	6	-1.794445	-1.682713	0.000000
3	7	-1.890393	-3.028062	0.000000
4	1	-2.777077	-1.183782	0.000000
5	1	-1.051575	-3.585116	0.000000
6	1	-2.783374	-3.487070	0.000000
7	8	2.490503	2.752994	0.000000
8	6	1.834025	1.731466	0.000000
9	7	0.485214	1.663187	0.000000
10	1	2.298570	0.728895	0.000000
11	1	0.000000	0.775975	0.000000
12	1	-0.037919	2.522804	0.000000

File: m-fam-dt-t2.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -339.766902122  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -339.674168  
 Dipolmomente: X=-6.5761 Y=-6.6568 Z=0.0000 Gesamt=9.3573  
 Framework: CS[SG(C2H6N2O2)]  
 Imaginäre Freq.: **-18.0 cm<sup>-1</sup>**

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	8	-0.891264	-0.965913	0.000000
2	6	-1.888335	-1.660717	0.000000
3	7	-1.880012	-3.012098	0.000000
4	1	-2.905448	-1.235947	0.000000
5	1	-0.999134	-3.503968	0.000000
6	1	-2.735626	-3.540663	0.000000
7	8	2.601591	2.654618	0.000000
8	6	1.889028	1.670681	0.000000
9	7	0.536210	1.680003	0.000000
10	1	2.300146	0.645555	0.000000
11	1	0.000000	0.821819	0.000000
12	1	0.059907	2.568441	0.000000

Cyclisches Dimer **10h**

File: b-fam-dal.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -339.916133592  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -339.824110  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C2H6N2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.167546	1.293812	0.000000
2	8	1.768990	0.234155	0.000000
3	7	1.768990	2.512664	0.000000
4	1	0.066462	1.344619	0.000000
5	1	1.226589	3.360569	0.000000
6	1	2.776431	2.571830	0.000000
7	6	-1.167546	-1.293812	0.000000
8	8	-1.768990	-0.234155	0.000000
9	7	-1.768990	-2.512664	0.000000
10	1	-0.066462	-1.344619	0.000000
11	1	-1.226589	-3.360569	0.000000
12	1	-2.776431	-2.571830	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	31.6	19.6	2
2	BU	71.1	45.7	5
3	AG	80.1	0.0	0
4	BG	84.1	0.0	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
5	AG	93.9	0.0	0
6	AU	109.6	6.9	0
7	BG	249.7	0.0	0
8	AU	257.0	469.8	55
9	AG	567.0	0.0	0
10	BU	568.6	42.7	5
11	BG	644.5	0.0	0
12	AU	644.9	33.7	3
13	BU	1055.5	16.5	1
14	AG	1058.2	0.0	0
15	AU	1067.9	8.0	0
16	BG	1072.6	0.0	0
17	BU	1253.9	346.9	41
18	AG	1269.0	0.0	0
19	BU	1434.6	42.2	4
20	AG	1437.1	0.0	0
21	AG	1616.5	0.0	0
22	BU	1617.0	120.9	14
23	AG	1744.5	0.0	0
24	BU	1773.6	845.7	100
25	BU	2996.5	43.9	5
26	AG	3001.6	0.0	0
27	BU	3579.2	69.6	8
28	AG	3579.4	0.0	0
29	AG	3717.2	0.0	0
30	BU	3717.2	89.6	10

File: bp-fam-dal.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -339.938289930  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -339.846157  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C2H6N2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.191084	1.260349	0.000000
2	8	1.791093	0.202005	0.000000
3	7	1.791093	2.475330	0.000000
4	1	0.091718	1.313899	0.000000
5	1	1.249790	3.320674	0.000000
6	1	2.795881	2.533460	0.000000
7	6	-1.191084	-1.260349	0.000000
8	8	-1.791093	-0.202005	0.000000
9	7	-1.791093	-2.475330	0.000000
10	1	-0.091718	-1.313899	0.000000
11	1	-1.249790	-3.320674	0.000000
12	1	-2.795881	-2.533460	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	33.3	19.6	2
2	BU	75.9	44.7	6
3	AG	80.3	0.0	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
4	BG	87.0	0.0	0
5	AG	95.9	0.0	0
6	AU	104.6	2.9	0
7	BG	231.6	0.0	0
8	AU	238.8	400.2	55
9	AG	566.6	0.0	0
10	BU	568.7	44.8	6
11	AU	654.8	29.6	4
12	BG	654.9	0.0	0
13	BU	1058.1	14.4	2
14	AG	1060.7	0.0	0
15	AU	1078.8	3.5	0
16	BG	1082.0	0.0	0
17	BU	1260.4	313.9	43
18	AG	1274.3	0.0	0
19	BU	1441.9	39.9	5
20	AG	1445.9	0.0	0
21	AG	1615.6	0.0	0
22	BU	1615.8	120.0	16
23	AG	1754.8	0.0	0
24	BU	1783.8	716.3	100
25	BU	2989.6	45.5	6
26	AG	2996.0	0.0	0
27	BU	3578.2	61.5	8
28	AG	3578.4	0.0	0
29	AG	3717.5	0.0	0
30	BU	3717.6	76.1	10

File: m-fam-dal.log  
 Rechenmethode: **RmPWLLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -339.764012621  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -339.671432  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C2H6N2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.140715	1.299761	0.000000
2	8	1.741790	0.241633	0.000000
3	7	1.741790	2.517062	0.000000
4	1	0.041096	1.348067	0.000000
5	1	1.199600	3.363708	0.000000
6	1	2.748086	2.576103	0.000000
7	6	-1.140715	-1.299761	0.000000
8	8	-1.741790	-0.241633	0.000000
9	7	-1.741790	-2.517062	0.000000
10	1	-0.041096	-1.348067	0.000000
11	1	-1.199600	-3.363708	0.000000
12	1	-2.748086	-2.576103	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	32.7	18.9	2
2	BU	78.3	46.2	5
3	AG	80.3	0.0	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
4	BG	84.1	0.0	0
5	AG	102.3	0.0	0
6	AU	111.0	6.7	0
7	BG	253.9	0.0	0
8	AU	261.4	478.8	55
9	AG	570.9	0.0	0
10	BU	573.5	44.4	5
11	BG	646.4	0.0	0
12	AU	646.8	34.5	3
13	BU	1063.3	17.1	1
14	AG	1066.1	0.0	0
15	AU	1077.6	7.5	0
16	BG	1082.4	0.0	0
17	BU	1261.3	360.0	41
18	AG	1276.8	0.0	0
19	BU	1443.1	43.3	4
20	AG	1444.3	0.0	0
21	AG	1626.7	0.0	0
22	BU	1627.2	124.3	14
23	AG	1753.1	0.0	0
24	BU	1783.2	867.0	100
25	BU	3015.7	41.6	4
26	AG	3020.1	0.0	0
27	BU	3595.0	74.8	8
28	AG	3595.2	0.0	0
29	AG	3732.8	0.0	0
30	BU	3732.9	93.2	10

File: l-fam-dal.log  
 Rechenmethode: **RBLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB-LYP): -339.833915435  
 E(RB-LYP)+ZPE: -339.745122  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C2H6N2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.202163	1.304299	0.000000
2	8	1.808975	0.233198	0.000000
3	7	1.808975	2.534243	0.000000
4	1	0.093738	1.361391	0.000000
5	1	1.261970	3.389242	0.000000
6	1	2.824340	2.596419	0.000000
7	6	-1.202163	-1.304299	0.000000
8	8	-1.808975	-0.233198	0.000000
9	7	-1.808975	-2.534243	0.000000
10	1	-0.093738	-1.361391	0.000000
11	1	-1.261970	-3.389242	0.000000
12	1	-2.824340	-2.596419	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	30.2	18.4	2
2	BU	61.7	43.6	5

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
3	AG	78.5	0.0	0
4	BG	82.6	0.0	0
5	AG	83.8	0.0	0
6	AU	106.9	5.3	0
7	BG	224.7	0.0	0
8	AU	232.0	433.8	57
9	AG	547.5	0.0	0
10	BU	548.5	36.6	4
11	BG	631.8	0.0	0
12	AU	632.1	26.5	3
13	BU	1015.0	19.1	2
14	AG	1017.8	0.0	0
15	AU	1017.9	13.0	1
16	BG	1021.9	0.0	0
17	BU	1206.8	309.5	41
18	AG	1219.5	0.0	0
19	BU	1386.4	50.1	6
20	AG	1391.1	0.0	0
21	AG	1567.8	0.0	0
22	BU	1568.7	89.9	11
23	AG	1669.1	0.0	0
24	BU	1696.1	754.7	100
25	BU	2898.8	53.6	7
26	AG	2904.9	0.0	0
27	BU	3465.6	35.9	4
28	AG	3465.7	0.0	0
29	AG	3601.2	0.0	0
30	BU	3601.3	60.2	7

File: mp-fam-dal-ci.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -337.978610514  
 E(MP2): -339.0190296  
 E(MP2)+ZPE: -338.925415  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: CI[X(C2H6N2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.707967	0.010559	0.290454
2	8	1.578051	0.007270	-0.924870
3	7	2.913682	0.004323	0.932719
4	1	0.846666	-0.017933	0.975917
5	1	2.944125	0.210592	1.918015
6	1	3.742162	0.182725	0.384406
7	6	-1.707967	-0.010559	-0.290454
8	8	-1.578051	-0.007270	0.924870
9	7	-2.913682	-0.004323	-0.932719
10	1	-0.846666	0.017933	-0.975917
11	1	-2.944125	-0.210592	-1.918015
12	1	-3.742162	-0.182725	-0.384406

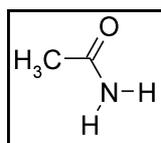
Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	25.7	17.7	2
2	AG	53.4	0.0	0
3	AG	64.4	0.0	0
4	AU	72.6	41.0	5
5	AU	86.6	14.5	1
6	AG	96.3	0.0	0
7	AG	400.9	0.0	0
8	AU	401.7	518.7	68
9	AG	566.9	0.0	0
10	AU	568.5	32.0	4
11	AG	623.7	0.0	0
12	AU	623.9	70.8	9
13	AU	1061.5	15.7	2
14	AG	1063.6	0.0	0
15	AU	1085.2	17.7	2
16	AG	1087.1	0.0	0
17	AU	1272.6	325.1	42
18	AG	1287.0	0.0	0
19	AU	1460.0	30.6	4
20	AG	1465.3	0.0	0
21	AG	1628.5	0.0	0
22	AU	1629.2	104.0	13
23	AG	1763.6	0.0	0
24	AU	1787.4	762.5	100
25	AU	3072.0	33.8	4
26	AG	3073.3	0.0	0
27	AU	3621.3	93.5	12
28	AG	3621.5	0.0	0
29	AG	3764.3	0.0	0
30	AU	3764.3	102.1	13

File: h-fam-dal.log  
 Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -337.983591841  
 E(RHF)+ZPE: -337.884812  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C2H6N2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.153959	1.368523	0.000000
2	8	1.745659	0.330511	0.000000
3	7	1.745659	2.579404	0.000000
4	1	0.065844	1.411148	0.000000
5	1	1.207130	3.411835	0.000000
6	1	2.737740	2.641973	0.000000
7	6	-1.153959	-1.368523	0.000000
8	8	-1.745659	-0.330511	0.000000
9	7	-1.745659	-2.579404	0.000000
10	1	-0.065844	-1.411148	0.000000
11	1	-1.207130	-3.411835	0.000000
12	1	-2.737740	-2.641973	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	29.8	17.6	1
2	BG	70.4	0.0	0
3	BU	71.6	45.7	4
4	AG	81.3	0.0	0
5	AG	89.0	0.0	0
6	AU	100.2	2.7	0
7	BG	211.2	0.0	0
8	AU	223.1	591.0	52
9	AG	619.0	0.0	0
10	BU	619.5	53.4	4
11	BG	667.6	0.0	0
12	AU	668.5	46.0	4
13	BU	1150.0	32.8	2
14	AG	1153.2	0.0	0
15	AU	1196.6	0.1	0
16	BG	1200.7	0.0	0
17	BU	1350.0	453.2	40
18	AG	1367.2	0.0	0
19	BU	1558.3	37.7	3
20	AG	1558.9	0.0	0
21	AG	1764.8	0.0	0
22	BU	1765.2	150.1	13
23	AG	1909.7	0.0	0
24	BU	1939.3	1127.4	100
25	BU	3216.6	47.5	4
26	AG	3217.5	0.0	0
27	BU	3819.4	125.0	11
28	AG	3819.8	0.0	0
29	AG	3960.5	0.0	0
30	BU	3960.6	133.7	11

### Acetamid



Monomer 11a

File: b-aam-mo-cs.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -209.288695408  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -209.215641  
 Dipolmomente: X=1.6406 Y=-3.6185 Z=0.0000 Gesamt=3.9731  
 Framework: CS[SG(C2H3NO),X(H2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.053585	-0.930139	0.000000
2	6	0.000000	0.164161	0.000000
3	1	-0.640608	-1.940731	0.000000
4	1	-1.686404	-0.802137	0.880322
5	1	-1.686404	-0.802137	-0.880322
6	8	-0.293943	1.345948	0.000000

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
7	7	1.300243	-0.260931	0.000000
8	1	2.031253	0.433751	0.000000
9	1	1.553511	-1.233943	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	24.4	2.8	0
2	A''	196.7	211.9	50
3	A'	431.1	4.5	1
4	A''	522.2	8.0	1
5	A'	545.1	12.7	3
6	A''	666.5	9.5	2
7	A'	840.5	2.2	0
8	A'	984.2	12.8	3
9	A''	1055.6	4.1	0
10	A'	1117.8	0.3	0
11	A'	1337.7	147.9	35
12	A'	1398.7	54.1	12
13	A''	1472.8	7.9	1
14	A'	1490.6	9.0	2
15	A'	1620.4	97.7	23
16	A'	1762.2	416.8	99
17	A'	3045.0	8.6	2
18	A''	3118.6	4.8	1
19	A'	3119.4	19.2	4
20	A'	3591.0	34.8	8
21	A'	3726.7	40.0	9

File: bp-aam-mo.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -209.302900833  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -209.229824  
 Dipolmomente: X=0.0668 Y=-3.8131 Z=0.0530 Gesamt=3.8141  
 Framework: C1[X(C2H5NO)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.359419	-0.344869	-0.000359
2	1	1.819715	-0.063225	0.946673
3	1	1.902065	0.167349	-0.792742
4	1	1.457128	-1.421542	-0.134252
5	6	-0.076087	0.146122	-0.003821
6	8	-0.354575	1.329289	0.000502
7	7	-1.033335	-0.825402	-0.002882
8	1	-1.998446	-0.543850	0.016809
9	1	-0.810509	-1.802747	0.004750

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	29.0	5.1	1
2	163.3	180.9	53
3	430.7	4.6	1
4	523.8	5.5	1
5	546.1	13.4	3

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
6	672.3	9.4	2
7	839.3	2.6	0
8	985.7	10.6	3
9	1056.8	4.0	1
10	1121.6	0.3	0
11	1342.7	128.2	37
12	1400.2	52.1	15
13	1474.1	7.2	2
14	1492.0	8.6	2
15	1620.0	96.0	28
16	1773.4	341.2	100
17	3046.0	8.2	2
18	3112.5	13.3	3
19	3124.6	10.8	3
20	3592.7	30.6	8
21	3730.1	33.8	9

File: m-aam-mo-cs.log  
 Rechenmethode: **RmPWLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -209.183413219  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -209.109992  
 Dipolmomente: X=1.6277 Y=-3.6409 Z=0.0000 Gesamt=3.9882  
 Framework: CS[SG(C2H3NO),X(H2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.052860	-0.928702	0.000000
2	6	0.000000	0.163996	0.000000
3	1	-0.638610	-1.937592	0.000000
4	1	-1.684571	-0.800707	0.879761
5	1	-1.684571	-0.800707	-0.879761
6	8	-0.293090	1.344127	0.000000
7	7	1.298638	-0.260814	0.000000
8	1	2.028891	0.432734	0.000000
9	1	1.550269	-1.232812	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A"	22.4	3.0	0
2	A"	193.5	214.8	50
3	A'	433.9	4.4	1
4	A"	524.5	7.8	1
5	A'	548.7	13.2	3
6	A"	668.9	10.0	2
7	A'	847.1	2.0	0
8	A'	991.9	13.4	3
9	A"	1063.0	4.1	0
10	A'	1125.7	0.4	0
11	A'	1346.4	147.0	34
12	A'	1408.3	56.4	13
13	A"	1480.7	7.9	1
14	A'	1498.6	9.3	2
15	A'	1630.5	100.7	23
16	A'	1773.6	425.6	100

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
17	A'	3056.9	8.5	2
18	A''	3129.6	4.9	1
19	A'	3130.3	19.3	4
20	A'	3609.0	37.2	8
21	A'	3745.0	41.9	9

File: l-aam-mo.log  
 Rechenmethode: **RBLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB-LYP): -209.220833191  
 E(RB-LYP)+ZPE: -209.150050  
 Dipolmomente: X=1.6176 Y=-3.5399 Z=0.0000 Gesamt=3.8919  
 Framework: CS[SG(C2H3NO),X(H2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.069188	-0.931201	0.000000
2	6	0.000000	0.165758	0.000000
3	1	-0.661444	-1.951208	0.000000
4	1	-1.705527	-0.799645	0.885417
5	1	-1.705527	-0.799645	-0.885417
6	8	-0.285614	1.362706	0.000000
7	7	1.308944	-0.274384	0.000000
8	1	2.051740	0.419020	0.000000
9	1	1.558187	-1.256821	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A''	38.7	2.8	0
2	A''	155.2	196.8	52
3	A'	418.0	4.3	1
4	A''	505.7	8.4	2
5	A'	525.7	10.5	2
6	A''	645.9	6.8	1
7	A'	803.2	3.0	0
8	A'	948.1	14.5	3
9	A''	1023.3	2.6	0
10	A'	1079.9	0.2	0
11	A'	1283.3	161.5	42
12	A'	1357.4	30.1	7
13	A''	1437.3	7.6	2
14	A'	1452.5	7.4	1
15	A'	1571.0	74.8	19
16	A'	1681.1	377.1	100
17	A'	2970.1	11.5	3
18	A'	3038.6	21.0	5
19	A''	3039.0	6.1	1
20	A'	3481.9	20.2	5
21	A'	3614.5	27.6	7

File: mp-aam-mo-cl.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -208.040281875  
 E(MP2): -208.709517  
 E(MP2)+ZPE: -208.635012  
 Dipolmomente: X=0.7096 Y=-4.1216 Z=0.7286 Gesamt=4.2452  
 Framework: Cl[X(C2H5NO)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.368622	-0.307860	-0.000096
2	1	1.666745	-0.532881	1.028739
3	1	1.996533	0.499836	-0.374364
4	1	1.513710	-1.203832	-0.608483
5	6	-0.076351	0.152425	-0.007538
6	8	-0.401457	1.329009	0.008252
7	7	-1.004743	-0.864996	-0.056878
8	1	-1.958945	-0.604733	0.146909
9	1	-0.726816	-1.802880	0.185132

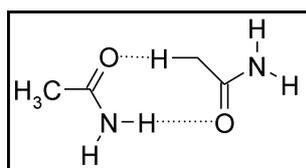
Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	61.3	1.6	0
2	416.4	81.3	24
3	437.7	118.2	35
4	509.4	41.8	12
5	557.7	22.1	6
6	637.0	28.2	8
7	865.0	2.9	0
8	988.9	12.5	3
9	1059.6	2.0	0
10	1145.1	0.4	0
11	1349.1	109.9	32
12	1419.0	84.3	25
13	1492.6	10.1	3
14	1504.8	9.0	2
15	1638.3	84.9	25
16	1786.3	337.2	100
17	3085.6	5.8	1
18	3171.1	8.4	2
19	3210.3	4.4	1
20	3615.7	36.7	10
21	3752.9	40.9	12

File: h-aam-mo-cl.log  
 Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -208.042707793  
 E(RHF)+ZPE: -207.964696  
 Dipolmomente: X=0.4190 Y=-4.1491 Z=0.2050 Gesamt=4.1753  
 Framework: Cl[X(C2H5NO)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.354853	-0.336046	-0.000668
2	1	1.670892	-0.456701	1.031421
3	1	1.982336	0.410875	-0.465714

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
4	1	1.472225	-1.286052	-0.510171
5	6	-0.076558	0.151575	-0.010510
6	8	-0.355680	1.312564	0.002156
7	7	-1.025085	-0.818830	-0.013273
8	1	-1.978477	-0.548351	0.057686
9	1	-0.795707	-1.781652	0.029511

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	51.6	8.2	1
2	144.5	253.2	47
3	455.4	4.1	0
4	552.3	4.2	0
5	598.8	20.9	3
6	697.4	15.1	2
7	908.3	1.0	0
8	1070.3	19.6	3
9	1154.7	7.0	1
10	1224.5	0.9	0
11	1441.9	160.7	29
12	1534.1	79.0	14
13	1588.6	9.5	1
14	1606.2	9.9	1
15	1771.8	120.7	22
16	1938.5	535.9	100
17	3180.6	9.1	1
18	3242.0	21.7	4
19	3287.7	12.0	2
20	3827.4	56.0	10
21	3966.5	59.6	11

Offenes Dimer **11b**

File: b-aam-dl.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -418.590261449  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -418.441630  
 Dipolmomente: X=2.0734 Y=-0.9035 Z=-0.0435 Gesamt=2.2622  
 Framework: C1[X(C4H10N2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.728095	1.256268	0.516068
2	6	2.169463	-0.114999	0.060100
3	1	0.714212	1.439129	0.149502
4	1	1.687187	1.258688	1.608657
5	1	2.396291	2.054645	0.187735
6	8	1.471510	-1.114037	0.207460
7	7	3.400112	-0.199562	-0.515857

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
8	6	-3.633326	0.014538	-0.135083
9	1	3.719523	-1.098665	-0.842352
10	1	3.976911	0.609538	-0.669836
11	6	-2.115229	0.081811	-0.081210
12	1	-4.040220	0.764258	0.546226
13	1	-3.957897	0.278260	-1.143901
14	1	-4.039779	-0.964788	0.125757
15	8	-1.521935	1.128323	-0.319376
16	7	-1.473039	-1.067853	0.242548
17	1	-0.452488	-1.092575	0.272237
18	1	-1.983866	-1.916579	0.415223

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	31.4	4.9	0
2	36.9	18.4	2
3	55.6	0.8	0
4	79.8	1.4	0
5	98.4	4.7	0
6	106.1	4.4	0
7	139.0	26.5	3
8	163.9	2.2	0
9	262.2	197.1	25
10	379.3	141.8	18
11	438.8	3.1	0
12	450.2	22.2	2
13	530.8	8.3	1
14	556.3	13.4	1
15	567.0	10.1	1
16	606.6	10.4	1
17	675.9	10.4	1
18	802.0	49.8	6
19	852.8	2.2	0
20	857.3	6.8	0
21	996.9	6.3	0
22	1007.5	9.5	1
23	1057.7	2.4	0
24	1067.3	5.7	0
25	1125.3	3.0	0
26	1139.9	3.5	0
27	1357.0	230.7	29
28	1370.3	45.4	5
29	1402.9	100.9	13
30	1415.0	47.1	6
31	1473.6	7.1	0
32	1474.7	6.8	0
33	1491.5	16.6	2
34	1506.4	13.6	1
35	1623.0	91.1	11
36	1653.6	25.6	3
37	1720.5	161.7	20
38	1744.7	770.0	100
39	3028.0	47.7	6
40	3042.0	10.5	1

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
41	3099.1	22.0	2
42	3113.8	2.5	0
43	3114.1	22.9	2
44	3116.7	15.7	2
45	3403.4	627.5	81
46	3591.7	40.4	5
47	3687.4	78.7	10
48	3726.9	43.2	5

File: bp-aam-dl.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -418.619634957  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -418.470966  
 Dipolmomente: X=2.2754 Y=-0.9898 Z=-0.0873 Gesamt=2.4829  
 Framework: C1[X(C4H10N2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.707147	1.243752	0.516709
2	6	2.166616	-0.117374	0.056576
3	1	0.695551	1.417030	0.146094
4	1	1.658738	1.240344	1.606520
5	1	2.366290	2.050125	0.197968
6	8	1.481863	-1.124733	0.193563
7	7	3.397664	-0.181980	-0.510878
8	6	-3.624623	-0.014063	-0.140534
9	1	3.728379	-1.072008	-0.842381
10	1	3.961837	0.634167	-0.655490
11	6	-2.110383	0.085169	-0.076874
12	1	-4.050684	0.746728	0.511965
13	1	-3.945060	0.212489	-1.157204
14	1	-4.014054	-0.990520	0.145424
15	8	-1.542288	1.143597	-0.313063
16	7	-1.450475	-1.048110	0.250504
17	1	-0.432071	-1.060531	0.276499
18	1	-1.948390	-1.903012	0.413959

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	28.8	3.8	0
2	35.1	15.8	2
3	42.2	2.3	0
4	77.5	2.0	0
5	99.9	3.5	0
6	106.7	4.3	0
7	137.9	28.0	4
8	166.3	2.3	0
9	249.5	174.3	26
10	386.3	120.4	18
11	439.7	3.5	0
12	450.5	23.0	3
13	534.1	7.6	1
14	556.9	12.7	1

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
15	568.8	11.4	1
16	603.8	8.8	1
17	682.0	10.2	1
18	788.0	37.6	5
19	852.4	2.8	0
20	856.6	8.4	1
21	999.5	4.9	0
22	1009.9	7.9	1
23	1059.6	2.8	0
24	1069.4	4.9	0
25	1128.6	3.1	0
26	1143.4	4.2	0
27	1363.0	202.4	30
28	1375.0	30.8	4
29	1404.8	96.9	14
30	1416.9	44.3	6
31	1473.8	6.5	0
32	1476.6	5.7	0
33	1493.1	14.9	2
34	1508.6	13.2	2
35	1622.2	89.4	13
36	1656.9	31.0	4
37	1726.7	155.8	23
38	1752.2	653.8	99
39	3029.6	50.6	7
40	3044.0	9.9	1
41	3098.1	23.5	3
42	3112.4	10.2	1
43	3114.0	15.4	2
44	3117.8	15.9	2
45	3391.7	659.5	100
46	3591.4	36.8	5
47	3687.4	70.7	10
48	3728.4	37.6	5

File: m-aam-dl.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -418.381475543  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -418.232062  
 Dipolmomente: X=2.0093 Y=-0.8779 Z=-0.0505 Gesamt=2.1933  
 Framework: C1[X(C4H10N2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.716648	1.254384	0.519016
2	6	2.159002	-0.114871	0.060659
3	1	0.704730	1.437472	0.150320
4	1	1.673283	1.252885	1.610450
5	1	2.386238	2.051728	0.194621
6	8	1.463634	-1.113412	0.209048
7	7	3.386653	-0.196982	-0.518528
8	6	-3.620795	0.021983	-0.137943
9	1	3.705403	-1.094098	-0.847402
10	1	3.959861	0.612759	-0.674305

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
11	6	-2.103785	0.080494	-0.081453
12	1	-4.023775	0.772925	0.542608
13	1	-3.941311	0.287732	-1.146339
14	1	-4.031534	-0.954668	0.121623
15	8	-1.505332	1.122442	-0.318496
16	7	-1.468483	-1.071000	0.243172
17	1	-0.449418	-1.099246	0.274596
18	1	-1.983499	-1.915794	0.415239

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	31.1	5.1	0
2	37.3	18.6	2
3	55.5	0.7	0
4	80.1	1.2	0
5	100.2	2.5	0
6	110.2	7.4	0
7	143.7	26.4	3
8	164.2	2.1	0
9	264.7	199.9	25
10	381.7	144.5	18
11	441.4	3.2	0
12	453.6	22.4	2
13	533.9	8.1	1
14	559.6	14.6	1
15	570.4	10.0	1
16	609.7	9.7	1
17	679.1	11.2	1
18	805.5	50.5	6
19	858.0	1.9	0
20	863.3	6.4	0
21	1004.3	6.8	0
22	1014.9	10.1	1
23	1065.1	2.3	0
24	1074.7	5.8	0
25	1133.1	3.3	0
26	1148.1	3.8	0
27	1365.3	232.2	29
28	1378.9	46.1	5
29	1412.8	105.4	13
30	1424.2	47.7	5
31	1481.5	7.1	0
32	1482.6	6.8	0
33	1499.6	17.5	2
34	1514.8	13.6	1
35	1633.1	94.4	11
36	1663.6	26.0	3
37	1730.7	152.8	19
38	1755.0	798.3	100
39	3039.8	48.6	6
40	3054.0	10.2	1
41	3110.2	23.1	2
42	3124.8	1.7	0
43	3125.1	23.1	2

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
44	3127.6	16.6	2
45	3421.5	631.9	79
46	3608.1	42.4	5
47	3704.9	81.6	10
48	3743.6	45.0	5

File: l-aam-dl.log  
 Rechenmethode: **RBLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB-LYP): -418.453111685  
 E(RB-LYP)+ZPE: -418.309076  
 Dipolmomente: X=2.1931 Y=-0.9355 Z=-0.0561 Gesamt=2.3849  
 Framework: Cl[X(C4H10N2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.748969	1.267107	0.517427
2	6	2.193402	-0.115919	0.060621
3	1	0.729942	1.451917	0.146263
4	1	1.704000	1.273275	1.616450
5	1	2.421331	2.070713	0.188105
6	8	1.488802	-1.126645	0.206392
7	7	3.437657	-0.202102	-0.516281
8	6	-3.671632	0.002027	-0.134093
9	1	3.758882	-1.107524	-0.847660
10	1	4.020023	0.612331	-0.674111
11	6	-2.141262	0.085039	-0.081762
12	1	-4.088626	0.747300	0.556611
13	1	-4.004000	0.270254	-1.146328
14	1	-4.072066	-0.988379	0.122746
15	8	-1.549701	1.147167	-0.321971
16	7	-1.482859	-1.069917	0.244925
17	1	-0.453855	-1.087941	0.273150
18	1	-1.988877	-1.931524	0.415741

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	33.1	4.8	0
2	35.7	16.8	2
3	58.5	1.3	0
4	80.3	1.2	0
5	93.2	6.4	1
6	103.1	1.4	0
7	132.7	26.6	4
8	164.2	2.8	0
9	229.2	183.7	28
10	355.4	131.4	20
11	425.8	2.8	0
12	436.1	21.7	3
13	513.6	9.3	1
14	537.4	10.5	1
15	547.5	8.2	1
16	586.1	11.8	1
17	654.4	7.4	1
18	779.7	41.5	6
19	816.8	4.4	0

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
20	819.7	7.9	1
21	962.6	6.9	1
22	972.9	10.3	1
23	1025.1	1.2	0
24	1035.0	3.7	0
25	1088.0	2.7	0
26	1101.2	3.7	0
27	1303.5	245.3	38
28	1319.0	86.9	13
29	1357.3	44.8	7
30	1374.7	26.0	4
31	1437.9	6.9	1
32	1438.7	6.4	1
33	1452.4	12.3	1
34	1467.4	14.2	2
35	1572.7	59.7	9
36	1599.7	6.1	0
37	1645.5	230.3	36
38	1666.6	624.2	97
39	2953.1	52.3	8
40	2966.8	14.1	2
41	3018.3	20.9	3
42	3033.2	4.5	0
43	3033.8	28.4	4
44	3036.0	13.9	2
45	3291.3	637.2	100
46	3482.8	25.5	4
47	3571.7	65.1	10
48	3615.0	30.9	4

File: mp-aam-dl.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -416.091008036  
 E(MP2): -417.4341833  
 E(MP2)+ZPE: -417.283286  
 Dipolmomente: X=1.8048 Y=-0.8623 Z=-0.1390 Gesamt=2.0051  
 Framework: Cl[X(C4H10N2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.976551	-0.268596	1.352610
2	6	-1.877957	0.175444	-0.087727
3	1	-1.064058	-0.824691	1.587159
4	1	-2.036728	0.610044	1.994542
5	1	-2.843553	-0.912097	1.520457
6	8	-1.471472	1.287203	-0.417474
7	7	-2.295876	-0.743510	-1.014154
8	6	3.259018	-0.407007	-0.106830
9	1	-2.001551	-0.559703	-1.963219
10	1	-2.306134	-1.714167	-0.739065
11	6	1.775490	-0.122100	0.034417
12	1	3.490747	-1.335336	0.415644
13	1	3.489077	-0.545107	-1.167692
14	1	3.879877	0.402203	0.284736

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
15	8	0.943585	-1.024434	0.087515
16	7	1.433738	1.197662	0.112109
17	1	0.451763	1.433277	-0.010794
18	1	2.118618	1.897906	-0.122591

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	24.8	8.2	1
2	46.7	7.5	1
3	55.1	12.1	1
4	72.4	1.6	0
5	84.2	0.7	0
6	99.2	2.6	0
7	113.1	3.8	0
8	152.8	29.8	4
9	427.8	7.3	1
10	442.1	45.3	6
11	461.1	135.6	19
12	481.9	43.5	6
13	530.0	169.2	24
14	559.5	10.2	1
15	564.0	24.6	3
16	594.9	28.4	4
17	649.2	95.4	13
18	739.9	58.9	8
19	876.3	3.2	0
20	878.0	3.4	0
21	1002.2	6.0	0
22	1004.8	8.4	1
23	1061.0	1.9	0
24	1062.6	11.2	1
25	1159.8	0.5	0
26	1160.2	3.2	0
27	1360.6	54.9	8
28	1372.1	61.0	8
29	1420.9	88.4	12
30	1429.0	143.2	20
31	1492.7	14.5	2
32	1497.9	15.1	2
33	1506.9	6.1	0
34	1508.0	8.8	1
35	1643.2	68.8	10
36	1650.0	69.5	10
37	1758.5	3.0	0
38	1774.2	684.8	100
39	3085.8	6.3	0
40	3086.4	8.9	1
41	3172.8	9.6	1
42	3177.4	3.8	0
43	3202.4	5.9	0
44	3206.2	5.4	0
45	3513.6	285.5	41
46	3608.4	38.8	5

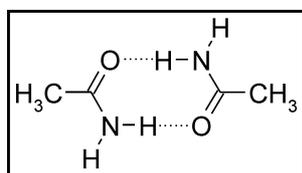
Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
47	3726.6	99.7	14
48	3739.0	39.2	5

File: h-aam-dl.log  
 Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -416.096605308  
 E(RHF)+ZPE: -415.938139  
 Dipolmomente: X=1.7641 Y=-0.9160 Z=-0.2464 Gesamt=2.0030  
 Framework: C1[X(C4H10N2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.836056	1.276068	0.479594
2	6	2.221877	-0.118195	0.052950
3	1	0.823006	1.474028	0.153745
4	1	1.853161	1.310084	1.564266
5	1	2.507508	2.034700	0.094354
6	8	1.501975	-1.063732	0.236885
7	7	3.432349	-0.259464	-0.528333
8	6	-3.679193	0.019021	-0.167527
9	1	3.714178	-1.164248	-0.827109
10	1	4.020052	0.515321	-0.716125
11	6	-2.170715	0.087025	-0.061896
12	1	-4.100087	0.910553	0.278305
13	1	-3.945822	0.011897	-1.219620
14	1	-4.100267	-0.860590	0.305905
15	8	-1.581545	1.111616	-0.278680
16	7	-1.544746	-1.057404	0.266566
17	1	-0.544671	-1.085563	0.297237
18	1	-2.051871	-1.894682	0.417050

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	15.3	5.3	0
2	35.8	20.8	1
3	40.5	1.2	0
4	67.6	0.9	0
5	82.1	6.9	0
6	97.0	4.6	0
7	120.0	11.5	1
8	124.9	12.0	1
9	234.2	236.6	22
10	368.7	198.5	18
11	468.3	3.3	0
12	477.5	16.8	1
13	568.4	4.6	0
14	598.4	18.9	1
15	605.9	21.1	1
16	648.1	6.9	0
17	720.9	18.8	1
18	798.6	59.8	5
19	913.0	0.9	0
20	920.6	2.4	0
21	1085.6	12.8	1

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
22	1092.9	19.4	1
23	1156.0	5.6	0
24	1164.6	9.4	0
25	1227.5	4.7	0
26	1240.5	3.9	0
27	1459.9	270.4	25
28	1471.1	58.6	5
29	1536.5	119.3	11
30	1540.5	55.6	5
31	1590.6	6.1	0
32	1591.9	9.4	0
33	1609.9	18.1	1
34	1621.9	13.4	1
35	1773.2	120.9	11
36	1800.4	71.6	6
37	1889.8	105.4	10
38	1914.6	1052.9	100
39	3180.8	26.6	2
40	3183.0	9.1	0
41	3247.1	23.3	2
42	3248.4	27.6	2
43	3274.0	15.8	1
44	3279.6	4.9	0
45	3732.5	372.9	35
46	3828.5	59.3	5
47	3942.1	114.1	10
48	3969.8	61.5	5

Cyclisches Dimer **11c**

File: b-aam-dc-c2h.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -418.598804876  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -418.449526  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C4H6N2O2),X(H4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.041908	3.581633	0.000000
2	6	0.041908	2.064785	0.000000
3	1	0.585253	3.930947	0.880266
4	1	0.585253	3.930947	-0.880266
5	1	-0.958761	4.017521	0.000000
6	8	1.106107	1.441377	0.000000
7	7	-1.159878	1.451876	0.000000
8	6	-0.041908	-3.581633	0.000000
9	1	-1.210998	0.426538	0.000000
10	1	-2.011609	1.986699	0.000000
11	6	-0.041908	-2.064785	0.000000

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
12	1	-0.585253	-3.930947	0.880266
13	1	-0.585253	-3.930947	-0.880266
14	1	0.958761	-4.017521	0.000000
15	8	-1.106107	-1.441377	0.000000
16	7	1.159878	-1.451876	0.000000
17	1	1.210998	-0.426538	0.000000
18	1	2.011609	-1.986699	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	34.5	2.2	0
2	AU	41.2	17.1	1
3	BG	45.6	0.0	0
4	AU	81.4	3.0	0
5	BG	87.7	0.0	0
6	AG	134.2	0.0	0
7	BU	145.3	43.5	2
8	AG	150.2	0.0	0
9	BG	408.6	0.0	0
10	AU	412.9	248.9	15
11	AG	441.7	0.0	0
12	BU	464.1	60.1	3
13	AG	574.7	0.0	0
14	BU	579.9	18.7	1
15	AU	606.4	21.5	1
16	BG	618.4	0.0	0
17	BG	829.5	0.0	0
18	AG	869.2	0.0	0
19	BU	871.4	9.0	0
20	AU	875.1	120.4	7
21	AG	1005.4	0.0	0
22	BU	1006.2	10.0	0
23	BG	1060.2	0.0	0
24	AU	1060.8	4.1	0
25	BU	1145.6	14.5	0
26	AG	1152.4	0.0	0
27	BU	1380.8	79.6	5
28	AG	1386.4	0.0	0
29	BU	1411.2	284.6	17
30	AG	1415.8	0.0	0
31	AU	1472.8	16.0	1
32	BG	1472.8	0.0	0
33	BU	1492.6	47.8	3
34	AG	1494.2	0.0	0
35	AG	1638.6	0.0	0
36	BU	1654.3	65.1	4
37	AG	1719.1	0.0	0
38	BU	1737.6	881.8	55
39	BU	3044.8	18.9	1
40	AG	3044.8	0.0	0
41	BG	3116.6	0.0	0
42	AU	3116.6	10.7	0
43	AG	3119.7	0.0	0
44	BU	3119.9	38.3	2

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
45	AG	3288.9	0.0	0
46	BU	3331.3	1589.7	100
47	AG	3682.1	0.0	0
48	BU	3682.4	152.2	9

File: bp-aam-dc-c2h.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -418.628729098  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -418.479249  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C4H6N2O2),X(H4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-0.019710	3.565073	0.000000
2	6	0.019710	2.050554	0.000000
3	1	0.514032	3.927431	0.877864
4	1	0.514032	3.927431	-0.877864
5	1	-1.028682	3.974711	0.000000
6	8	1.100699	1.459913	0.000000
7	7	-1.161889	1.410121	0.000000
8	6	0.019710	-3.565073	0.000000
9	1	-1.191878	0.385204	0.000000
10	1	-2.021743	1.926468	0.000000
11	6	-0.019710	-2.050554	0.000000
12	1	-0.514032	-3.927431	0.877864
13	1	-0.514032	-3.927431	-0.877864
14	1	1.028682	-3.974711	0.000000
15	8	-1.100699	-1.459913	0.000000
16	7	1.161889	-1.410121	0.000000
17	1	1.191878	-0.385204	0.000000
18	1	2.021743	-1.926468	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	37.6	6.7	0
2	AU	44.8	11.0	0
3	BG	47.2	0.0	0
4	AU	81.5	3.3	0
5	BG	94.9	0.0	0
6	AG	138.6	0.0	0
7	BU	151.2	45.3	2
8	AG	152.7	0.0	0
9	BG	426.3	0.0	0
10	AU	429.7	208.2	11
11	AG	443.2	0.0	0
12	BU	466.7	66.2	3
13	AG	577.4	0.0	0
14	BU	584.1	19.7	1
15	AU	607.3	17.6	0
16	BG	620.2	0.0	0
17	BG	835.2	0.0	0
18	AG	870.0	0.0	0
19	BU	872.5	12.2	0
20	AU	874.8	95.8	5

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
21	AG	1008.4	0.0	0
22	BU	1009.1	7.5	0
23	BG	1063.1	0.0	0
24	AU	1063.7	4.2	0
25	BU	1151.0	17.0	0
26	AG	1158.5	0.0	0
27	BU	1385.2	49.3	2
28	AG	1390.2	0.0	0
29	BU	1415.3	274.9	15
30	AG	1422.3	0.0	0
31	AU	1473.6	13.8	0
32	BG	1473.7	0.0	0
33	BU	1494.9	45.2	2
34	AG	1497.0	0.0	0
35	AG	1644.5	0.0	0
36	BU	1659.3	60.5	3
37	AG	1723.2	0.0	0
38	BU	1744.5	757.8	42
39	BU	3046.8	18.3	1
40	AG	3046.9	0.0	0
41	BG	3115.6	0.0	0
42	AU	3115.6	11.3	0
43	AG	3120.1	0.0	0
44	BU	3120.3	38.6	2
45	AG	3252.7	0.0	0
46	BU	3301.7	1762.4	100
47	AG	3680.4	0.0	0
48	BU	3680.6	134.7	7

File: m-aam-dc-c2h.log  
 Rechenmethode: **RmPWLLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -418.390012588  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -418.239937  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C4H6N2O2),X(H4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.034084	3.577653	0.000000
2	6	0.034084	2.061959	0.000000
3	1	0.576963	3.926063	0.879586
4	1	0.576963	3.926063	-0.879586
5	1	-0.966030	4.012171	0.000000
6	8	1.096695	1.439629	0.000000
7	7	-1.166646	1.449652	0.000000
8	6	-0.034084	-3.577653	0.000000
9	1	-1.217668	0.426230	0.000000
10	1	-2.016882	1.984493	0.000000
11	6	-0.034084	-2.061959	0.000000
12	1	-0.576963	-3.926063	0.879586
13	1	-0.576963	-3.926063	-0.879586
14	1	0.966030	-4.012171	0.000000
15	8	-1.096695	-1.439629	0.000000
16	7	1.166646	-1.449652	0.000000

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
17	1	1.217668	-0.426230	0.000000
18	1	2.016882	-1.984493	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	37.2	6.2	0
2	AU	42.5	13.4	0
3	BG	48.6	0.0	0
4	AU	81.9	2.8	0
5	BG	88.4	0.0	0
6	AG	132.5	0.0	0
7	BU	146.7	43.2	2
8	AG	152.9	0.0	0
9	BG	412.4	0.0	0
10	AU	416.8	255.2	16
11	AG	444.5	0.0	0
12	BU	467.4	59.6	3
13	AG	577.6	0.0	0
14	BU	582.0	19.7	1
15	AU	609.3	20.6	1
16	BG	621.1	0.0	0
17	BG	828.7	0.0	0
18	AG	874.4	0.0	0
19	AU	874.5	121.7	7
20	BU	876.4	8.0	0
21	AG	1012.5	0.0	0
22	BU	1013.3	11.1	0
23	BG	1067.4	0.0	0
24	AU	1068.0	4.2	0
25	BU	1153.4	14.7	0
26	AG	1159.9	0.0	0
27	BU	1388.7	85.2	5
28	AG	1394.2	0.0	0
29	BU	1420.6	283.4	18
30	AG	1424.4	0.0	0
31	AU	1480.8	15.9	1
32	BG	1480.8	0.0	0
33	BU	1500.8	49.8	3
34	AG	1502.4	0.0	0
35	AG	1648.8	0.0	0
36	BU	1664.3	68.2	4
37	AG	1728.8	0.0	0
38	BU	1748.0	905.5	58
39	BU	3056.4	18.3	1
40	AG	3056.5	0.0	0
41	BG	3127.2	0.0	0
42	AU	3127.2	10.9	0
43	AG	3130.4	0.0	0
44	BU	3130.6	38.4	2
45	AG	3316.9	0.0	0
46	BU	3358.0	1547.1	100
47	AG	3699.6	0.0	0
48	BU	3699.8	158.5	10

File: l-aam-dc.log  
 Rechenmethode: **RBLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB-LYP): -418.461567922  
 E(RB-LYP)+ZPE: -418.316891  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C4H6N2O2),X(H4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.055716	3.609877	0.000000
2	6	0.055716	2.080711	0.000000
3	1	0.601740	3.963142	0.885292
4	1	0.601740	3.963142	-0.885292
5	1	-0.950767	4.049356	0.000000
6	8	1.130855	1.449003	0.000000
7	7	-1.157205	1.462529	0.000000
8	6	-0.055716	-3.609877	0.000000
9	1	-1.210954	0.427849	0.000000
10	1	-2.015962	2.001512	0.000000
11	6	-0.055716	-2.080711	0.000000
12	1	-0.601740	-3.963142	0.885292
13	1	-0.601740	-3.963142	-0.885292
14	1	0.950767	-4.049356	0.000000
15	8	-1.130855	-1.449003	0.000000
16	7	1.157205	-1.462529	0.000000
17	1	1.210954	-0.427849	0.000000
18	1	2.015962	-2.001512	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	36.5	9.4	0
2	AU	42.4	8.9	0
3	BG	50.4	0.0	0
4	AU	80.5	2.6	0
5	BG	83.4	0.0	0
6	AG	135.7	0.0	0
7	BU	142.4	43.4	2
8	AG	145.9	0.0	0
9	BG	384.5	0.0	0
10	AU	388.0	229.0	13
11	AG	428.5	0.0	0
12	BU	450.7	60.7	3
13	AG	555.8	0.0	0
14	BU	561.8	13.9	0
15	AU	587.0	24.2	1
16	BG	598.5	0.0	0
17	BG	814.4	0.0	0
18	AG	833.0	0.0	0
19	BU	835.8	12.3	0
20	AU	855.3	103.8	6
21	AG	973.3	0.0	0
22	BU	974.0	9.1	0
23	BG	1028.2	0.0	0
24	AU	1029.2	1.6	0
25	BU	1107.9	15.4	0
26	AG	1114.3	0.0	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
27	BU	1337.1	200.8	11
28	AG	1345.8	0.0	0
29	BU	1361.8	151.9	8
30	AG	1363.5	0.0	0
31	AU	1437.1	15.3	0
32	BG	1437.1	0.0	0
33	BU	1452.5	35.0	2
34	AG	1453.5	0.0	0
35	AG	1571.0	0.0	0
36	BU	1602.9	57.3	3
37	AG	1659.1	0.0	0
38	BU	1660.7	765.9	44
39	BU	2969.7	26.7	1
40	AG	2969.8	0.0	0
41	BG	3036.2	0.0	0
42	AU	3036.2	13.5	0
43	AG	3038.5	0.0	0
44	BU	3038.8	42.8	2
45	AG	3159.5	0.0	0
46	BU	3204.1	1713.9	100
47	AG	3566.3	0.0	0
48	BU	3566.9	117.6	6

File: mp-aam-dc-c2-3.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -416.097697428  
 E(MP2): -417.4408660  
 E(MP2)+ZPE: -417.289373  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.8702 Gesamt=0.8702  
 Framework: C2[X(C4H10N2O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-1.715839	3.126890	0.164572
2	6	-0.961514	1.825029	-0.014556
3	1	-1.712954	3.386818	1.227062
4	1	-1.189994	3.913334	-0.377722
5	1	-2.749545	3.066823	-0.182968
6	8	0.272921	1.802054	-0.013614
7	7	-1.715839	0.711324	-0.182990
8	6	1.715839	-3.126890	0.164572
9	1	-1.258873	-0.204073	-0.142172
10	1	-2.710407	0.760579	-0.034454
11	6	0.961514	-1.825029	-0.014556
12	1	1.712954	-3.386818	1.227062
13	1	1.189994	-3.913334	-0.377722
14	1	2.749545	-3.066823	-0.182968
15	8	-0.272921	-1.802054	-0.013614
16	7	1.715839	-0.711324	-0.182990
17	1	1.258873	0.204073	-0.142172
18	1	2.710407	-0.760579	-0.034454

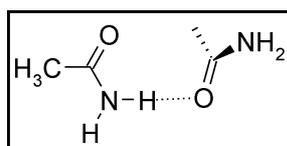
Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A	26.9	18.9	1
2	A	51.0	0.0	0
3	B	60.3	0.1	0
4	A	81.3	2.1	0
5	B	87.3	1.5	0
6	A	125.5	0.1	0
7	B	143.3	39.6	2
8	A	143.7	0.2	0
9	A	443.7	2.7	0
10	B	455.5	61.3	4
11	A	465.0	209.3	15
12	B	466.7	25.7	1
13	A	569.8	5.1	0
14	B	576.0	15.3	1
15	A	603.7	28.1	2
16	B	603.7	14.9	1
17	B	805.7	16.3	1
18	A	847.1	116.0	8
19	B	889.8	7.4	0
20	A	891.7	13.0	0
21	A	1011.8	0.1	0
22	B	1012.2	10.2	0
23	B	1062.3	0.6	0
24	A	1064.1	1.2	0
25	B	1164.4	9.7	0
26	A	1169.3	1.6	0
27	B	1386.4	57.1	4
28	A	1391.1	0.0	0
29	B	1437.7	271.7	20
30	A	1441.9	8.5	0
31	B	1492.1	11.6	0
32	A	1492.7	13.1	0
33	B	1510.6	31.3	2
34	A	1511.8	2.2	0
35	A	1659.6	0.3	0
36	B	1667.0	68.9	5
37	A	1747.1	0.2	0
38	B	1769.2	788.0	58
39	B	3088.5	13.7	1
40	A	3088.5	0.3	0
41	A	3177.2	7.9	0
42	B	3177.3	11.2	0
43	A	3201.1	0.4	0
44	B	3201.2	11.9	0
45	A	3374.4	0.2	0
46	B	3414.4	1347.6	100
47	A	3722.7	0.5	0
48	B	3723.0	191.7	14

File: h-aam-dc.log  
 Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -416.103277330  
 E(RHF)+ZPE: -415.943866  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C4H6N2O2),X(H4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.003454	3.620430	0.000000
2	6	-0.003454	2.108724	0.000000
3	1	0.543851	3.959680	0.875858
4	1	0.543851	3.959680	-0.875858
5	1	-0.989505	4.054192	0.000000
6	8	1.034832	1.493391	0.000000
7	7	-1.200240	1.507427	0.000000
8	6	-0.003454	-3.620430	0.000000
9	1	-1.251480	0.505535	0.000000
10	1	-2.038643	2.034647	0.000000
11	6	0.003454	-2.108724	0.000000
12	1	-0.543851	-3.959680	0.875858
13	1	-0.543851	-3.959680	-0.875858
14	1	0.989505	-4.054192	0.000000
15	8	-1.034832	-1.493391	0.000000
16	7	1.200240	-1.507427	0.000000
17	1	1.251480	-0.505535	0.000000
18	1	2.038643	-2.034647	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	AU	22.4	0.8	0
2	BG	27.0	0.0	0
3	AU	42.4	20.9	1
4	AU	71.7	2.7	0
5	BG	80.4	0.0	0
6	AG	119.0	0.0	0
7	BU	126.4	37.2	3
8	AG	135.3	0.0	0
9	BG	401.9	0.0	0
10	AU	411.5	355.9	30
11	AG	474.2	0.0	0
12	BU	488.5	41.5	3
13	AG	613.0	0.0	0
14	BU	613.9	37.1	3
15	AU	648.4	11.0	0
16	BG	659.3	0.0	0
17	BG	808.0	0.0	0
18	AU	857.8	140.0	12
19	AG	927.3	0.0	0
20	BU	927.6	2.8	0
21	AG	1092.7	0.0	0
22	BU	1094.2	23.4	2
23	BG	1158.8	0.0	0
24	AU	1159.2	12.1	1
25	BU	1243.7	13.4	1
26	AG	1249.3	0.0	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
27	BU	1480.6	202.8	17
28	AG	1487.2	0.0	0
29	AG	1538.5	0.0	0
30	BU	1538.9	226.6	19
31	AU	1591.3	12.3	1
32	BG	1591.3	0.0	0
33	BU	1612.8	57.9	5
34	AG	1613.1	0.0	0
35	BU	1799.1	146.1	12
36	AG	1799.5	0.0	0
37	AG	1873.2	0.0	0
38	BU	1903.0	1156.4	100
39	BU	3187.6	20.9	1
40	AG	3187.7	0.0	0
41	AG	3262.0	0.0	0
42	BU	3262.1	53.6	4
43	BG	3262.9	0.0	0
44	AU	3262.9	20.4	1
45	AG	3683.3	0.0	0
46	BU	3705.0	836.8	72
47	BU	3938.8	229.9	19
48	AG	3938.9	0.0	0

Übergangszustand **11d**

File: b-aam-rts.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -418.588093083  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -418.439617  
 Dipolmomente: X=-0.7137 Y=-0.4930 Z=-0.1861 Gesamt=0.8872  
 Framework: C1[X(C4H10N2O2)]  
 Imaginäre Freq.: **-45.9 cm<sup>-1</sup>**  
 IRC Forward: OK  
 IRC Reverse: OK

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.574324	-0.390454	1.179508
2	6	1.974273	0.179056	-0.087594
3	1	3.003109	0.420324	1.767147
4	1	1.765215	-0.844991	1.758926
5	1	3.334394	-1.149878	0.985917
6	8	1.470468	1.296563	-0.123310
7	7	2.031665	-0.621283	-1.188485
8	6	-3.395217	-0.347104	0.172163
9	1	1.442820	-0.358843	-1.965735
10	1	2.205787	-1.607597	-1.075667
11	6	-1.897679	-0.125136	0.031507
12	1	-3.723210	-1.026851	-0.616441
13	1	-3.586092	-0.838743	1.128596

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
14	1	-3.982818	0.571700	0.120635
15	8	-1.114987	-1.067762	0.014471
16	7	-1.489238	1.165535	-0.077676
17	1	-0.492403	1.368452	-0.125556
18	1	-2.141837	1.928082	-0.017487

File: bp-aam-ts.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -418.617593588  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -418.469025  
 Dipolmomente: X=-0.7566 Y=-0.4143 Z=-0.2984 Gesamt=0.9128  
 Framework: C1[X(C4H10N2O2)]  
 Imaginäre Freq.: **-49.3 cm<sup>-1</sup>**  
 IRC Forward: OK  
 IRC Reverse: Höhere Energien

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.583349	-0.426841	1.139120
2	6	1.951937	0.179080	-0.092518
3	1	3.007357	0.365076	1.750280
4	1	1.795384	-0.921004	1.710985
5	1	3.350447	-1.162566	0.900068
6	8	1.492893	1.314065	-0.095641
7	7	1.928720	-0.612838	-1.196921
8	6	-3.366626	-0.332362	0.183788
9	1	1.304401	-0.326001	-1.933647
10	1	2.050370	-1.605024	-1.087965
11	6	-1.870218	-0.120777	0.037253
12	1	-3.696139	-1.031165	-0.583633
13	1	-3.558700	-0.796773	1.150909
14	1	-3.950135	0.584455	0.108455
15	8	-1.097853	-1.069482	0.015736
16	7	-1.455786	1.163503	-0.069804
17	1	-0.460280	1.361860	-0.113689
18	1	-2.104208	1.925226	-0.001310

File: m-aam-rts.log  
 Rechenmethode: **RmPWLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -418.379400010  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -418.230105  
 Dipolmomente: X=-0.8773 Y=-0.5410 Z=-0.0289 Gesamt=1.0311  
 Framework: C1[X(C4H10N2O2)]  
 Imaginäre Freq.: **-50.4 cm<sup>-1</sup>**  
 IRC Forward: OK  
 IRC Reverse: Höhere Energien

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.591152	-0.346496	1.171249
2	6	1.954624	0.174048	-0.097834
3	1	3.027430	0.485981	1.719572
4	1	1.801352	-0.787877	1.784817

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
5	1	3.351111	-1.105682	0.982194
6	8	1.457614	1.291298	-0.163080
7	7	1.970857	-0.671716	-1.164099
8	1	1.346292	-0.443154	-1.922578
9	1	2.132338	-1.653283	-1.008481
10	6	-3.367743	-0.359122	0.201904
11	6	-1.876971	-0.119244	0.036588
12	1	-3.696272	-1.056887	-0.569039
13	1	-3.537967	-0.835101	1.168860
14	1	-3.966929	0.550309	0.141759
15	8	-1.082667	-1.050262	0.025244
16	7	-1.487798	1.173025	-0.101183
17	1	-0.495364	1.386727	-0.164374
18	1	-2.149357	1.926396	-0.044508

File: l-aam-rts.log  
 Rechenmethode: **RBLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB-LYP): -418.450883631  
 E(RB-LYP)+ZPE: -418.307019  
 Dipolmomente: X=-0.2555 Y=-0.3300 Z=-0.4137 Gesamt=0.5877  
 Framework: C1[X(C4H10N2O2)]  
 Imaginäre Freq.: **-37.9 cm<sup>-1</sup>**

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.567821	-0.474459	1.200109
2	6	2.030701	0.188951	-0.064249
3	1	2.998152	0.294447	1.852113
4	1	1.719796	-0.936299	1.727682
5	1	3.319358	-1.249082	0.996545
6	8	1.491560	1.304436	-0.045502
7	7	2.187594	-0.520162	-1.231657
8	6	-3.478330	-0.319734	0.122951
9	1	1.659955	-0.196065	-2.039060
10	1	2.404751	-1.511838	-1.199459
11	6	-1.959118	-0.139166	0.016644
12	1	-3.817837	-0.947091	-0.712115
13	1	-3.704086	-0.860267	1.052508
14	1	-4.040380	0.624268	0.113473
15	8	-1.196003	-1.112678	-0.027141
16	7	-1.506654	1.154481	-0.033814
17	1	-0.496644	1.333293	-0.056933
18	1	-2.140541	1.940777	0.051954

File: mp-aam-rts.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -416.090776606  
 E(MP2): -417.4335271  
 E(MP2)+ZPE: -417.282687  
 Dipolmomente: X=-1.2017 Y=-0.7270 Z=0.6151 Gesamt=1.5333  
 Framework: C1[X(C4H10N2O2)]

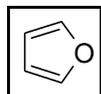
Imaginäre Freq.: **-57.8 cm<sup>-1</sup>**  
 IRC Forward: OK  
 IRC Reverse: Höhere Energien

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.747959	-0.392511	1.059242
2	6	1.935150	0.187998	-0.076135
3	1	3.163537	0.420414	1.654033
4	1	2.075468	-0.982055	1.690826
5	1	3.550358	-1.040845	0.699749
6	8	1.414149	1.298688	-0.008187
7	7	1.834967	-0.600952	-1.190200
8	6	-3.338354	-0.359687	0.328771
9	1	1.066230	-0.369237	-1.804820
10	1	1.983659	-1.591519	-1.065270
11	6	-1.870478	-0.136373	0.015583
12	1	-3.640724	-1.328186	-0.069964
13	1	-3.463773	-0.383047	1.415562
14	1	-3.978000	0.425217	-0.081631
15	8	-1.067400	-1.064474	-0.031389
16	7	-1.508352	1.159156	-0.222127
17	1	-0.512394	1.372488	-0.213078
18	1	-2.150320	1.899066	0.012731

File: h-aam-rts.log  
 Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF) -416.095806864  
 E(RHF)+ZPE -415.937168  
 Dipolmomente: X=-1.1712 Y=-0.5310 Z=0.5063 Gesamt=1.3820  
 Framework: C1[X(C4H10N2O2)]  
 Imaginäre Freq.: **-50.0 cm<sup>-1</sup>**  
 IRC Forward: OK  
 IRC Reverse: OK

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.694730	-0.238965	1.175276
2	6	2.013151	0.167325	-0.108214
3	1	3.029202	0.646586	1.696664
4	1	1.964738	-0.754149	1.793206
5	1	3.531418	-0.905336	0.998968
6	8	1.501482	1.245309	-0.243264
7	7	2.021626	-0.756108	-1.100144
8	6	-3.420692	-0.342389	0.249531
9	1	1.361284	-0.609770	-1.830637
10	1	2.185845	-1.706279	-0.860217
11	6	-1.940676	-0.118147	0.027940
12	1	-3.715311	-1.254490	-0.251818
13	1	-3.589271	-0.473325	1.313989
14	1	-4.030925	0.482299	-0.100604
15	8	-1.164115	-1.034910	0.036510
16	7	-1.554627	1.158088	-0.160336
17	1	-0.579374	1.366118	-0.231276
18	1	-2.204607	1.904344	-0.118085

## 10.1.3 Mischsysteme

**Furan / 1-Hexin**

Furan Monomer 3

File: b-furan-mo.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -230.087883046  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -230.018245  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=-0.7486 Gesamt=0.7486  
 Framework: C2V[C2(O),SGV(C4H4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	1.095600	0.347153
2	6	0.000000	0.717962	-0.957702
3	6	0.000000	-0.717962	-0.957702
4	6	0.000000	-1.095600	0.347153
5	8	0.000000	0.000000	1.158157
6	1	0.000000	2.050490	0.844787
7	1	0.000000	1.373358	-1.814128
8	1	0.000000	-1.373358	-1.814128
9	1	0.000000	-2.050490	0.844787

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A2	609.8	0.0	0
2	B1	618.6	25.0	21
3	A2	731.0	0.0	0
4	B1	755.3	117.1	100
5	B1	850.2	0.0	0
6	A2	880.0	0.0	0
7	A1	887.2	14.9	12
8	B2	893.2	0.8	0
9	A1	1011.2	47.7	40
10	B2	1056.9	1.7	1
11	A1	1082.3	15.4	13
12	A1	1162.2	0.1	0
13	B2	1195.3	20.3	17
14	B2	1283.8	0.2	0
15	A1	1408.3	2.9	2
16	A1	1505.6	20.8	17
17	B2	1587.2	0.0	0
18	B2	3239.9	2.6	2
19	A1	3250.7	0.2	0
20	B2	3276.1	0.2	0
21	A1	3282.3	0.1	0

File: bp-furan-mo.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -230.108741754  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -230.038874  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=-0.6074 Gesamt=0.6074  
 Framework: C2V[C2(O),SGV(C4H4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	1.092805	0.345639
2	6	0.000000	0.715963	-0.955487
3	6	0.000000	-0.715963	-0.955487
4	6	0.000000	-1.092805	0.345639
5	8	0.000000	0.000000	1.157301
6	1	0.000000	2.046876	0.840318
7	1	0.000000	1.369404	-1.810436
8	1	0.000000	-1.369404	-1.810436
9	1	0.000000	-2.046876	0.840318

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A2	618.4	0.0	0
2	B1	624.7	23.0	23
3	A2	737.1	0.0	0
4	B1	760.4	99.4	100
5	B1	857.1	0.0	0
6	A1	887.6	16.4	16
7	A2	891.8	0.0	0
8	B2	894.5	0.6	0
9	A1	1014.2	40.7	40
10	B2	1061.3	1.1	1
11	A1	1086.5	11.4	11
12	A1	1166.4	0.2	0
13	B2	1199.2	18.0	18
14	B2	1294.3	0.2	0
15	A1	1415.2	4.0	4
16	A1	1512.1	17.3	17
17	B2	1594.5	0.3	0
18	B2	3242.7	2.6	2
19	A1	3253.2	0.6	0
20	B2	3275.5	0.8	0
21	A1	3282.1	0.0	0

File: m-furan-mo.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -229.971887722  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -229.901849  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=-0.7576 Gesamt=0.7576  
 Framework: C2V[C2(O),SGV(C4H4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	1.094244	0.346779
2	6	0.000000	0.717721	-0.956666
3	6	0.000000	-0.717721	-0.956666
4	6	0.000000	-1.094244	0.346779

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
5	8	0.000000	0.000000	1.156709
6	1	0.000000	2.047736	0.844147
7	1	0.000000	1.372824	-1.811661
8	1	0.000000	-1.372824	-1.811661
9	1	0.000000	-2.047736	0.844147

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A2	613.2	0.0	0
2	B1	621.3	26.2	22
3	A2	739.4	0.0	0
4	B1	761.8	118.2	100
5	B1	860.1	0.0	0
6	A2	889.3	0.0	0
7	A1	892.3	15.1	12
8	B2	898.7	0.9	0
9	A1	1016.7	47.7	40
10	B2	1063.4	1.6	1
11	A1	1087.8	17.2	14
12	A1	1168.7	0.1	0
13	B2	1203.6	20.7	17
14	B2	1291.8	0.1	0
15	A1	1416.9	2.8	2
16	A1	1515.4	21.8	18
17	B2	1597.5	0.0	0
18	B2	3253.7	2.6	2
19	A1	3264.5	0.2	0
20	B2	3290.5	0.2	0
21	A1	3296.7	0.1	0

File: l-furan-mo.log  
 Rechenmethode: **RBLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB-LYP): -230.011979400  
 E(RB-LYP)+ZPE: -229.944674  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=-0.7520 Gesamt=0.7520  
 Framework: C2V[C2(O),SGV(C4H4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	1.107326	0.347449
2	6	0.000000	0.721352	-0.966314
3	6	0.000000	-0.721352	-0.966314
4	6	0.000000	-1.107326	0.347449
5	8	0.000000	0.000000	1.172862
6	1	0.000000	2.065671	0.851246
7	1	0.000000	1.378266	-1.829507
8	1	0.000000	-1.378266	-1.829507
9	1	0.000000	-2.065671	0.851246

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A2	588.3	0.0	0
2	B1	597.2	20.7	17
3	A2	682.8	0.0	0

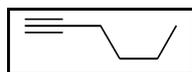
Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
4	B1	718.5	115.7	100
5	B1	798.5	0.7	0
6	A2	833.0	0.0	0
7	A1	857.2	15.2	13
8	B2	865.1	0.7	0
9	A1	972.8	49.8	43
10	B2	1010.2	0.7	0
11	A1	1042.3	4.9	4
12	A1	1125.0	0.0	0
13	B2	1135.9	19.7	17
14	B2	1243.9	0.1	0
15	A1	1358.3	3.2	2
16	A1	1446.3	16.7	14
17	B2	1525.8	0.0	0
18	B2	3162.2	3.0	2
19	A1	3172.9	0.9	0
20	B2	3200.8	0.5	0
21	A1	3206.6	0.1	0

File: h-furan-mo.log  
 Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -228.684900714  
 E(RHF)+ZPE: -228.610031  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=-0.7876 Gesamt=0.7876  
 Framework: C2V[C2(O),SGV(C4H4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	1.080773	0.344840
2	6	0.000000	0.721118	-0.945297
3	6	0.000000	-0.721118	-0.945297
4	6	0.000000	-1.080773	0.344840
5	8	0.000000	0.000000	1.139869
6	1	0.000000	2.030517	0.834142
7	1	0.000000	1.376784	-1.790881
8	1	0.000000	-1.376784	-1.790881
9	1	0.000000	-2.030517	0.834142

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	B1	654.4	37.4	30
2	A2	656.0	0.0	0
3	A2	849.9	0.0	0
4	B1	853.6	124.2	100
5	A1	955.1	18.6	14
6	B2	959.9	1.9	1
7	B1	996.4	1.4	1
8	A2	1008.4	0.0	0
9	A1	1078.0	36.6	29
10	A1	1150.9	49.6	39
11	B2	1151.7	0.2	0
12	A1	1252.7	0.5	0
13	B2	1304.0	26.3	21
14	B2	1396.7	0.1	0
15	A1	1531.2	2.6	2

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
16	A1	1657.5	35.9	28
17	B2	1738.4	0.2	0
18	B2	3392.6	3.9	3
19	A1	3404.7	0.4	0
20	B2	3432.6	1.9	1
21	A1	3439.2	0.1	0

1-Hexin Monomer **4a**

File: b-1hexin-mo.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -234.665659764  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -234.524477  
 Dipolmomente: X=-0.6218 Y=0.4856 Z=0.0736 Gesamt=0.7923  
 Framework: C1[X(C6H10)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.616811	-1.009543	-0.121643
2	6	1.870499	-0.076624	0.020634
3	1	3.278882	-1.831368	-0.243762
4	6	0.958799	1.054508	0.178267
5	1	0.909630	1.326898	1.239566
6	1	1.383289	1.920847	-0.341018
7	6	-0.466824	0.788217	-0.351123
8	1	-1.027309	1.728638	-0.294869
9	1	-0.407133	0.521381	-1.411984
10	6	-1.221206	-0.302749	0.414372
11	1	-0.644117	-1.232524	0.379029
12	1	-1.284707	-0.020417	1.472625
13	6	-2.629271	-0.549388	-0.134690
14	1	-3.146233	-1.327805	0.432996
15	1	-3.240493	0.357614	-0.086756
16	1	-2.594654	-0.869794	-1.180728

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	76.3	0.0	0
2	97.8	0.1	0
3	202.7	1.0	1
4	243.2	0.1	0
5	256.7	0.7	0
6	351.8	7.9	10
7	380.5	2.1	2
8	566.3	6.1	8
9	667.6	52.4	68
10	679.3	51.6	67
11	745.7	2.6	3
12	816.6	0.5	0
13	832.6	0.4	0
14	932.0	0.5	0
15	945.0	2.1	2
16	1014.2	0.4	0

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
17	1062.4	0.0	0
18	1116.3	1.3	1
19	1130.0	0.9	1
20	1239.1	0.4	0
21	1264.7	0.2	0
22	1327.3	0.9	1
23	1334.3	1.4	1
24	1358.5	5.8	7
25	1398.1	2.5	3
26	1412.5	2.9	3
27	1474.5	7.9	10
28	1485.9	0.7	0
29	1495.5	1.0	1
30	1499.8	8.3	10
31	1509.7	7.8	10
32	2210.8	9.5	12
33	3007.6	7.3	9
34	3013.1	18.6	24
35	3015.1	19.2	25
36	3019.0	57.9	76
37	3039.6	6.3	8
38	3046.3	20.5	26
39	3060.2	16.8	22
40	3080.8	76.0	100
41	3084.9	40.3	53
42	3477.8	68.7	90

File: bp-1hexin-mo.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -234.686779750  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -234.545513  
 Dipolmomente: X=-0.5770 Y=0.4728 Z=0.0681 Gesamt=0.7491  
 Framework: C1[X(C6H10)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.609342	-1.008492	-0.121044
2	6	1.867283	-0.076305	0.020714
3	1	3.270044	-1.829422	-0.243010
4	6	0.956568	1.052959	0.177405
5	1	0.906411	1.325616	1.236046
6	1	1.379486	1.917632	-0.340824
7	6	-0.465498	0.785846	-0.351246
8	1	-1.024958	1.724044	-0.299686
9	1	-0.404953	0.515366	-1.408410
10	6	-1.219090	-0.299760	0.415241
11	1	-0.642384	-1.226869	0.385670
12	1	-1.285062	-0.013814	1.469644
13	6	-2.622273	-0.549408	-0.134850
14	1	-3.139315	-1.323791	0.433237
15	1	-3.232589	0.355369	-0.092966
16	1	-2.584678	-0.873170	-1.177020

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	76.9	0.0	0
2	98.2	0.1	0
3	203.1	0.8	1
4	243.5	0.1	0
5	257.0	0.7	0
6	351.3	6.9	9
7	381.0	1.8	2
8	567.0	5.6	7
9	659.2	46.5	64
10	670.6	44.9	62
11	746.5	2.7	3
12	817.6	0.5	0
13	833.7	0.3	0
14	932.5	0.4	0
15	947.6	2.0	2
16	1013.5	0.4	0
17	1062.1	0.0	0
18	1118.4	1.2	1
19	1132.4	0.8	1
20	1241.3	0.4	0
21	1266.5	0.1	0
22	1329.6	0.8	1
23	1338.3	1.6	2
24	1360.4	5.6	7
25	1400.2	2.3	3
26	1416.3	2.2	3
27	1476.2	7.1	9
28	1487.6	0.6	0
29	1497.2	0.9	1
30	1501.4	6.9	9
31	1512.5	6.2	8
32	2218.0	7.0	9
33	3009.4	7.0	9
34	3014.0	17.1	23
35	3017.4	19.0	26
36	3022.0	51.1	71
37	3040.2	6.9	9
38	3046.4	22.5	31
39	3060.9	16.6	23
40	3081.8	71.9	100
41	3086.4	38.4	53
42	3472.9	65.0	90

File: m-1hexin-mo.log  
 Rechenmethode: **RmPWLLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -234.503784383  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -234.361899  
 Dipolmomente: X=-0.6133 Y=0.4808 Z=0.0754 Gesamt=0.7829  
 Framework: C1[X(C6H10)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.611302	-1.010083	-0.121722
2	6	1.868270	-0.076685	0.020541

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
3	1	3.271083	-1.832269	-0.243656
4	6	0.957743	1.055633	0.178288
5	1	0.908340	1.326938	1.238603
6	1	1.382305	1.920417	-0.340815
7	6	-0.466454	0.788584	-0.350768
8	1	-1.028175	1.726924	-0.292482
9	1	-0.406988	0.522956	-1.410910
10	6	-1.217793	-0.303984	0.413510
11	1	-0.641080	-1.232587	0.374637
12	1	-1.279684	-0.023763	1.471364
13	6	-2.625839	-0.548879	-0.134066
14	1	-3.141695	-1.328079	0.431493
15	1	-3.235638	0.357685	-0.082776
16	1	-2.591838	-0.865744	-1.180160

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	78.0	0.0	0
2	99.4	0.1	0
3	204.7	1.0	1
4	245.1	0.1	0
5	258.9	0.7	0
6	355.3	8.2	10
7	383.4	2.3	2
8	570.4	6.7	8
9	677.9	52.5	66
10	689.4	51.7	65
11	749.8	2.4	3
12	821.2	0.6	0
13	836.7	0.4	0
14	936.2	0.5	0
15	950.4	1.9	2
16	1019.4	0.4	0
17	1068.0	0.0	0
18	1123.1	1.3	1
19	1136.9	0.9	1
20	1246.4	0.4	0
21	1272.2	0.2	0
22	1334.7	0.8	1
23	1342.5	1.3	1
24	1367.1	6.0	7
25	1407.3	2.5	3
26	1420.7	2.9	3
27	1483.3	7.8	9
28	1493.7	0.7	0
29	1503.2	1.0	1
30	1507.3	8.3	10
31	1517.8	7.7	9
32	2223.8	9.2	11
33	3018.4	8.7	11
34	3025.1	16.9	21
35	3026.7	20.9	26
36	3030.1	55.8	71
37	3050.7	7.0	8

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
38	3058.6	20.8	26
39	3070.6	15.8	20
40	3090.9	78.5	100
41	3095.2	40.9	52
42	3490.3	69.6	88

File: l-lhexin-mo.log  
 Rechenmethode: **RBLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB-LYP): -234.526975741  
 E(RB-LYP)+ZPE: -234.389810  
 Dipolmomente: X=-0.6390 Y=0.4970 Z=0.0774 Gesamt=0.8132  
 Framework: Cl[X(C6H10)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.644997	-1.013512	-0.122736
2	6	1.889118	-0.075673	0.021970
3	1	3.313708	-1.836790	-0.245639
4	6	0.969431	1.056352	0.179901
5	1	0.916517	1.332420	1.247434
6	1	1.391669	1.931396	-0.341802
7	6	-0.469634	0.789582	-0.354610
8	1	-1.028282	1.738958	-0.301320
9	1	-0.407693	0.518271	-1.420883
10	6	-1.236996	-0.303827	0.417902
11	1	-0.660643	-1.241826	0.386934
12	1	-1.302761	-0.015831	1.481347
13	6	-2.655940	-0.550171	-0.136448
14	1	-3.178324	-1.329312	0.437941
15	1	-3.268719	0.363838	-0.092774
16	1	-2.621330	-0.877640	-1.187107

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	73.0	0.0	0
2	93.6	0.1	0
3	193.7	1.0	1
4	236.6	0.1	0
5	248.6	0.6	0
6	332.1	6.1	8
7	366.5	1.6	2
8	545.5	2.9	3
9	614.7	53.3	69
10	628.0	54.2	71
11	727.7	2.4	3
12	787.9	0.7	0
13	809.7	0.5	0
14	905.5	0.6	0
15	919.5	1.7	2
16	974.0	0.4	0
17	1020.0	0.0	0
18	1081.1	1.3	1
19	1097.7	0.8	1
20	1204.9	0.4	0

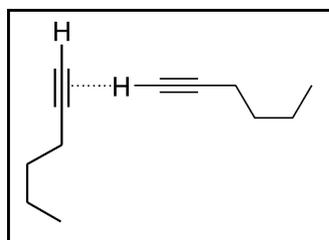
Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
21	1228.4	0.1	0
22	1291.1	1.2	1
23	1298.2	2.4	3
24	1316.6	5.7	7
25	1352.0	3.2	4
26	1375.1	2.4	3
27	1436.6	7.0	9
28	1448.1	0.6	0
29	1459.2	1.0	1
30	1464.2	7.6	10
31	1473.3	6.6	8
32	2137.7	10.4	13
33	2931.1	5.5	7
34	2932.0	23.5	30
35	2938.8	27.8	36
36	2945.5	50.8	66
37	2957.4	16.5	21
38	2964.8	21.7	28
39	2981.9	19.1	25
40	3003.2	76.2	100
41	3007.0	42.9	56
42	3406.0	64.5	84

File: h-lhexin-mo.log  
 Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -233.029850448  
 E(RHF)+ZPE: -232.879288  
 Dipolmomente: X=-0.6143 Y=0.4582 Z=0.0682 Gesamt=0.7694  
 Framework: Cl[X(C6H10)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.620814	-0.992498	-0.121065
2	6	1.872646	-0.083037	0.018569
3	1	3.287331	-1.801292	-0.243461
4	6	0.949018	1.050471	0.182334
5	1	0.903497	1.308695	1.236873
6	1	1.373689	1.907455	-0.331413
7	6	-0.464730	0.778340	-0.352021
8	1	-1.023239	1.710865	-0.300253
9	1	-0.400051	0.510425	-1.403881
10	6	-1.221264	-0.307232	0.412385
11	1	-0.658445	-1.235705	0.374120
12	1	-1.283781	-0.027020	1.462881
13	6	-2.628260	-0.540864	-0.134825
14	1	-3.143430	-1.313099	0.428803
15	1	-3.228256	0.364322	-0.081114
16	1	-2.596656	-0.855729	-1.174817

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	85.8	0.0	0
2	108.8	0.1	0
3	225.2	1.1	0
4	262.5	0.1	0

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
5	278.6	0.8	0
6	396.7	10.8	8
7	411.6	4.3	3
8	612.7	11.6	9
9	794.1	2.4	2
10	808.4	54.4	44
11	817.7	50.7	41
12	869.5	1.4	1
13	887.4	0.5	0
14	990.3	1.2	0
15	1017.9	1.1	0
16	1078.6	0.3	0
17	1132.0	0.1	0
18	1207.0	1.0	0
19	1225.9	1.2	0
20	1340.3	0.5	0
21	1374.3	0.4	0
22	1435.6	0.6	0
23	1446.0	3.1	2
24	1484.0	9.9	8
25	1528.7	2.5	2
26	1541.1	0.7	0
27	1599.5	7.4	6
28	1607.7	1.0	0
29	1612.6	0.4	0
30	1614.6	6.8	5
31	1627.4	5.5	4
32	2372.5	5.4	4
33	3148.6	31.4	25
34	3153.3	16.3	13
35	3158.2	58.5	48
36	3175.6	10.9	9
37	3185.6	17.2	14
38	3197.6	6.8	5
39	3212.8	17.3	14
40	3217.7	72.1	59
41	3221.2	121.2	100
42	3623.5	70.2	57

1-Hexin T-Form Dimer **4b**

File: b-1hexin-dt.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -469.331901825  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -469.048717  
 Dipolmomente: X=-0.0385 Y=-1.2779 Z=0.1809 Gesamt=1.2913  
 Framework: C1[X(C12H20)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.341099	3.140850	-0.250185
2	6	2.660465	2.037448	0.109338
3	1	2.067252	4.119061	-0.561810
4	1	-0.097140	1.453059	-0.202285
5	6	-0.809600	0.663930	-0.140062
6	6	-1.608766	-0.233128	-0.065848
7	6	3.055993	0.695071	0.525371
8	1	2.175946	0.044458	0.485247
9	1	3.369364	0.725901	1.576044
10	6	-2.588544	-1.315395	0.007633
11	1	-2.623601	-1.696812	1.035450
12	1	-2.240911	-2.146670	-0.615844
13	6	4.196339	0.106513	-0.333083
14	1	3.868979	0.065910	-1.377758
15	1	5.045168	0.796423	-0.300640
16	6	-4.008893	-0.904457	-0.435684
17	1	-4.629586	-1.807901	-0.458371
18	1	-3.964605	-0.528291	-1.463677
19	6	4.652867	-1.286251	0.123692
20	1	5.550312	-1.553985	-0.444541
21	1	4.964548	-1.238412	1.174572
22	6	-4.664748	0.142668	0.469319
23	1	-4.710409	-0.246707	1.494050
24	1	-4.029791	1.033791	0.507864
25	6	-6.071692	0.531519	0.006768
26	1	-6.738782	-0.336379	-0.014369
27	1	-6.517014	1.275622	0.672708
28	1	-6.052279	0.958150	-1.001014
29	6	3.604725	-2.391071	-0.051749
30	1	2.716514	-2.218179	0.561935
31	1	3.278185	-2.460522	-1.094289
32	1	4.012372	-3.364695	0.233672

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	7.3	0.0	0
2	13.7	0.0	0
3	21.5	0.1	0
4	29.1	0.3	0
5	42.4	0.2	0
6	48.0	0.4	0
7	79.6	0.3	0
8	92.7	0.1	0
9	108.1	0.4	0
10	120.0	0.1	0
11	153.9	0.4	0
12	209.1	0.7	0
13	239.3	0.5	0
14	241.9	0.1	0
15	258.9	0.8	0
16	298.5	0.5	0
17	351.1	5.6	4
18	361.1	9.2	6
19	382.5	1.9	1

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
20	425.8	4.3	3
21	512.2	6.7	4
22	567.7	5.4	3
23	672.2	37.0	26
24	677.7	47.8	34
25	705.2	50.0	35
26	724.4	66.5	47
27	745.1	4.0	2
28	748.0	2.8	1
29	787.4	2.6	1
30	817.3	0.6	0
31	834.3	0.3	0
32	877.9	1.2	0
33	932.1	0.9	0
34	932.8	0.5	0
35	945.1	2.1	1
36	951.5	1.3	0
37	993.4	1.6	1
38	1014.3	0.4	0
39	1062.6	0.0	0
40	1074.2	0.1	0
41	1115.6	0.4	0
42	1117.4	1.4	1
43	1130.9	1.0	0
44	1132.4	0.6	0
45	1232.1	2.6	1
46	1240.3	0.6	0
47	1267.0	0.3	0
48	1284.8	0.8	0
49	1317.9	0.6	0
50	1328.7	0.9	0
51	1335.3	1.8	1
52	1336.6	1.3	0
53	1359.2	6.2	4
54	1378.9	4.1	2
55	1388.3	2.0	1
56	1399.2	3.1	2
57	1414.3	2.9	2
58	1418.7	5.2	3
59	1475.0	7.2	5
60	1476.4	2.6	1
61	1487.0	0.7	0
62	1489.5	1.5	1
63	1495.4	2.4	1
64	1495.8	1.4	0
65	1500.0	8.0	5
66	1504.3	7.5	5
67	1509.7	10.5	7
68	1511.1	7.1	5
69	2206.7	5.3	3
70	2211.5	22.0	15
71	3007.0	7.2	5
72	3007.8	22.6	16
73	3012.0	15.5	11

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
74	3013.8	24.1	17
75	3014.6	1.1	0
76	3018.7	58.3	41
77	3022.9	32.1	22
78	3025.0	18.1	12
79	3039.2	6.1	4
80	3043.2	27.3	19
81	3045.8	5.9	4
82	3046.0	13.9	9
83	3059.7	12.8	9
84	3070.9	33.2	23
85	3081.6	60.0	42
86	3083.3	58.7	41
87	3084.6	34.4	24
88	3089.4	53.7	38
89	3442.0	140.0	100
90	3476.4	70.2	50

File: m-lhexin-dt.log  
 Rechenmethode: **mpw1lyp/6-311++g\*\***  
 E(RmPW+HF-LYP): -469.009299178  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -468.724661  
 Dipolmomente: X=-0.0670 Y=-1.2756 Z=0.1796 Gesamt=1.2899  
 Framework: C1[X(C12H20)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.352886	3.160223	-0.235423
2	6	2.653593	2.055245	0.129827
3	1	2.096162	4.140301	-0.551771
4	1	-0.030698	1.494128	-0.239690
5	6	-0.733376	0.697753	-0.175352
6	6	-1.520713	-0.207302	-0.097877
7	6	3.024966	0.707768	0.551810
8	1	2.119578	0.095187	0.595458
9	1	3.419771	0.751244	1.572897
10	6	-2.491538	-1.297575	-0.020961
11	1	-2.511801	-1.686350	1.003208
12	1	-2.146686	-2.120223	-0.655066
13	6	4.070255	0.052960	-0.374654
14	1	3.660975	-0.001053	-1.388295
15	1	4.944275	0.707603	-0.426809
16	6	-3.918105	-0.890462	-0.443033
17	1	-4.535024	-1.795254	-0.463533
18	1	-3.888596	-0.506641	-1.467630
19	6	4.505560	-1.344408	0.085063
20	1	5.345521	-1.662751	-0.539972
21	1	4.895941	-1.283486	1.107537
22	6	-4.565353	0.146951	0.477522
23	1	-4.597311	-0.250382	1.498603
24	1	-3.933889	1.039283	0.514494
25	6	-5.978340	0.533328	0.034591
26	1	-6.640944	-0.336738	0.014394
27	1	-6.418484	1.269767	0.710656

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
28	1	-5.971509	0.967111	-0.969199
29	6	3.404698	-2.407958	0.017377
30	1	2.573153	-2.184011	0.689481
31	1	2.998826	-2.487139	-0.995139
32	1	3.793533	-3.389729	0.297028

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	5.6	0.0	0
2	8.8	0.1	0
3	24.6	0.1	0
4	30.5	0.2	0
5	47.2	0.2	0
6	51.0	0.3	0
7	82.9	0.6	0
8	94.0	0.2	0
9	113.2	0.4	0
10	122.7	0.0	0
11	158.1	0.3	0
12	213.9	0.6	0
13	237.8	0.3	0
14	243.9	0.1	0
15	262.0	0.8	0
16	301.2	0.5	0
17	356.6	6.0	3
18	368.2	10.5	6
19	386.6	1.9	1
20	429.3	4.1	2
21	517.1	6.9	4
22	572.7	5.7	3
23	683.3	40.1	25
24	688.1	47.9	30
25	716.4	46.2	29
26	738.9	67.5	43
27	749.7	3.8	2
28	751.9	2.4	1
29	791.3	2.4	1
30	822.0	0.7	0
31	838.5	0.3	0
32	882.2	1.3	0
33	936.2	0.8	0
34	937.2	0.3	0
35	950.5	1.8	1
36	956.6	1.4	0
37	998.3	1.2	0
38	1019.5	0.5	0
39	1068.1	0.0	0
40	1080.0	0.2	0
41	1121.7	0.2	0
42	1124.0	1.5	0
43	1137.7	0.8	0
44	1140.0	0.4	0
45	1239.5	2.6	1
46	1247.4	0.6	0

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
47	1274.3	0.3	0
48	1291.7	0.9	0
49	1325.5	0.7	0
50	1335.9	0.9	0
51	1342.9	1.9	1
52	1344.4	1.2	0
53	1367.8	6.2	3
54	1386.5	3.6	2
55	1397.5	1.4	0
56	1408.1	2.9	1
57	1422.4	2.7	1
58	1424.8	5.5	3
59	1483.7	7.4	4
60	1485.0	2.4	1
61	1494.6	0.9	0
62	1497.6	1.2	0
63	1503.4	1.3	0
64	1503.8	2.0	1
65	1507.6	7.8	5
66	1511.6	9.2	5
67	1516.7	10.5	6
68	1519.0	7.5	4
69	2218.6	4.8	3
70	2223.3	12.0	7
71	3018.2	8.0	5
72	3018.6	26.2	16
73	3024.0	19.1	12
74	3025.7	4.6	2
75	3025.8	20.6	13
76	3029.9	59.4	38
77	3033.9	24.7	15
78	3036.7	18.0	11
79	3050.6	7.7	4
80	3053.9	28.8	18
81	3057.5	22.2	14
82	3057.6	3.2	2
83	3070.4	15.6	9
84	3081.7	39.6	25
85	3090.7	74.8	47
86	3093.2	49.0	31
87	3094.9	43.0	27
88	3099.1	52.9	33
89	3455.4	156.3	100
90	3490.7	76.3	48

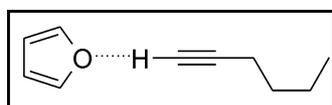
File: h-lhexin-dt.log  
 Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -466.060085245  
 E(RHF)+ZPE: -465.758548  
 Dipolmomente: X=0.1408 Y=-1.2184 Z=-0.0658 Gesamt=1.2283  
 Framework: Cl[X(C12H20)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-2.520367	3.182945	0.118466
2	6	-2.895771	2.102416	-0.195751
3	1	-2.193538	4.147790	0.394070
4	1	0.028892	1.337312	0.111866
5	6	0.767650	0.584789	0.043950
6	6	1.596236	-0.260370	-0.036074
7	6	-3.364983	0.760536	-0.572416
8	1	-2.547699	0.240282	-1.060129
9	1	-4.155804	0.868755	-1.309852
10	6	2.623159	-1.310487	-0.124747
11	1	2.711001	-1.621572	-1.162271
12	1	2.272302	-2.174159	0.431893
13	6	-3.878728	-0.041721	0.632291
14	1	-3.069206	-0.162805	1.348047
15	1	-4.647826	0.542094	1.129975
16	6	3.996438	-0.878144	0.409544
17	1	4.640681	-1.755263	0.415979
18	1	3.889586	-0.560693	1.444043
19	6	-4.451576	-1.412589	0.261444
20	1	-4.903879	-1.839849	1.153269
21	1	-5.261009	-1.283564	-0.455772
22	6	4.660649	0.230887	-0.405280
23	1	4.765327	-0.098271	-1.438111
24	1	4.013367	1.103094	-0.423899
25	6	6.031226	0.624245	0.142924
26	1	6.713741	-0.222203	0.144792
27	1	6.480852	1.410364	-0.456514
28	1	5.954455	0.989701	1.163849
29	6	-3.428592	-2.404102	-0.295057
30	1	-3.015373	-2.076253	-1.244077
31	1	-2.601028	-2.540200	0.396524
32	1	-3.886884	-3.374991	-0.459437

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	1.3	0.0	0
2	5.9	0.1	0
3	11.2	0.1	0
4	26.1	0.2	0
5	34.4	0.1	0
6	38.6	0.2	0
7	80.2	0.3	0
8	89.2	0.2	0
9	115.8	0.1	0
10	124.8	0.0	0
11	166.5	0.4	0
12	228.5	0.7	0
13	255.5	0.4	0
14	262.5	0.1	0
15	279.6	0.8	0
16	316.9	0.4	0
17	396.6	9.2	7
18	402.9	14.3	11
19	412.2	3.3	2

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
20	456.2	3.6	2
21	552.4	10.6	8
22	613.3	10.3	8
23	794.2	1.7	1
24	795.1	0.4	0
25	810.3	58.4	47
26	811.8	35.8	29
27	832.2	57.8	47
28	843.1	5.8	4
29	847.5	52.2	42
30	869.7	1.4	1
31	887.3	0.4	0
32	931.3	1.1	0
33	985.6	2.9	2
34	990.3	1.1	0
35	1017.9	1.1	0
36	1022.1	0.9	0
37	1054.4	0.5	0
38	1078.6	0.3	0
39	1132.0	0.1	0
40	1145.1	0.2	0
41	1206.1	0.3	0
42	1206.9	1.2	0
43	1225.6	1.1	0
44	1228.4	0.5	0
45	1332.4	1.2	0
46	1340.2	0.7	0
47	1374.1	0.5	0
48	1388.1	0.9	0
49	1425.7	1.0	0
50	1435.6	0.6	0
51	1442.2	4.4	3
52	1445.9	3.4	2
53	1483.8	10.6	8
54	1496.0	3.0	2
55	1527.7	1.1	0
56	1528.6	2.7	2
57	1541.0	0.7	0
58	1542.3	4.3	3
59	1599.7	6.5	5
60	1600.3	5.3	4
61	1607.5	0.6	0
62	1607.7	0.8	0
63	1612.6	0.5	0
64	1614.1	0.7	0
65	1614.5	6.7	5
66	1621.7	9.1	7
67	1624.4	7.0	5
68	1627.4	5.4	4
69	2368.9	3.4	2
70	2371.3	6.7	5
71	3147.6	40.7	33
72	3148.3	30.0	24
73	3152.8	17.4	14
74	3157.4	61.9	50

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
75	3158.9	24.9	20
76	3164.5	3.1	2
77	3174.7	12.2	9
78	3180.0	11.4	9
79	3184.3	44.5	36
80	3185.9	19.5	15
81	3197.1	5.9	4
82	3200.0	16.6	13
83	3211.3	16.9	13
84	3216.7	63.7	52
85	3217.4	67.8	55
86	3221.2	122.3	100
87	3223.1	90.7	74
88	3232.2	47.6	38
89	3604.9	115.8	94
90	3621.7	75.1	61



Dimer Furan/1-Hexin 1:1 5

File: b-fu-1hexi.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -464.755612970  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -464.544005  
 Dipolmomente: X=-0.4167 Y=0.2646 Z=0.0294 Gesamt=0.4945  
 Framework: C1[X(C10H14O)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-3.934358	-0.862736	0.331505
2	6	-5.098004	-0.169879	0.240769
3	6	-4.745741	1.150697	-0.199402
4	6	-3.395843	1.156069	-0.341294
5	8	-2.881548	-0.067690	-0.020846
6	1	-3.687604	-1.871770	0.614458
7	1	-6.084720	-0.546244	0.458458
8	1	-5.411163	1.978976	-0.383376
9	1	-2.681034	1.902168	-0.643702
10	6	0.431386	-0.950096	-0.055603
11	6	1.595517	-1.256149	-0.067530
12	1	-0.599497	-0.681774	-0.042036
13	6	3.011846	-1.616277	-0.096914
14	1	3.301978	-2.007365	0.885957
15	1	3.150730	-2.439277	-0.806815
16	6	3.946284	-0.448722	-0.480553
17	1	4.961119	-0.849795	-0.586867
18	1	3.653545	-0.069725	-1.465908
19	6	3.954603	0.699804	0.532332
20	1	2.934319	1.076856	0.656829
21	1	4.260797	0.312470	1.512038
22	6	4.882200	1.847608	0.123291
23	1	4.872083	2.650425	0.865549

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
24	1	5.917018	1.505945	0.018103
25	1	4.577479	2.278723	-0.835532

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	14.0	0.2	0
2	14.8	0.1	0
3	19.1	0.7	0
4	38.4	0.1	0
5	50.1	0.2	0
6	55.6	0.3	0
7	89.2	0.3	0
8	111.6	0.4	0
9	211.2	0.3	0
10	245.3	0.0	0
11	259.9	0.5	0
12	356.2	6.0	2
13	383.2	1.4	0
14	567.8	4.4	1
15	608.0	0.0	0
16	615.4	20.6	8
17	728.7	15.0	6
18	729.0	17.7	7
19	746.0	2.8	1
20	750.2	36.3	15
21	755.0	125.3	52
22	817.7	0.8	0
23	834.1	0.2	0
24	851.3	0.1	0
25	881.3	0.0	0
26	889.3	19.1	7
27	892.2	0.9	0
28	932.5	0.3	0
29	945.4	1.8	0
30	1010.4	70.3	29
31	1014.2	0.5	0
32	1056.3	1.4	0
33	1063.1	0.1	0
34	1078.4	26.8	11
35	1117.3	1.4	0
36	1130.2	0.8	0
37	1163.4	0.0	0
38	1192.3	21.6	9
39	1239.5	0.5	0
40	1266.4	0.2	0
41	1285.2	0.0	0
42	1328.0	0.9	0
43	1335.8	1.2	0
44	1359.1	7.0	2
45	1398.7	3.1	1
46	1409.3	1.8	0
47	1412.4	3.0	1
48	1475.5	7.5	3
49	1486.0	0.9	0

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
50	1495.6	1.1	0
51	1500.6	8.1	3
52	1507.9	30.6	12
53	1510.0	7.7	3
54	1591.3	0.1	0
55	2206.3	0.6	0
56	3007.6	4.9	2
57	3011.7	21.4	8
58	3014.3	22.5	9
59	3018.5	59.5	24
60	3039.3	8.7	3
61	3045.4	21.8	9
62	3059.8	17.0	7
63	3080.8	77.2	32
64	3084.2	40.5	16
65	3242.6	2.5	1
66	3253.2	0.1	0
67	3278.0	0.0	0
68	3284.2	0.4	0
69	3440.1	239.7	100

File: bp-fu-lhexi.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -464.797642599  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -464.585884  
 Dipolmomente: X=-0.3312 Y=0.2422 Z=0.0219 Gesamt=0.4108  
 Framework: C1[X(C10H14O)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-3.963463	-0.859863	0.333313
2	6	-5.110261	-0.147286	0.235828
3	6	-4.732282	1.162153	-0.204676
4	6	-3.385545	1.142276	-0.340162
5	8	-2.895386	-0.087730	-0.015349
6	1	-3.739792	-1.871173	0.619500
7	1	-6.103026	-0.503100	0.449244
8	1	-5.380503	2.000088	-0.392915
9	1	-2.658636	1.874409	-0.640581
10	6	0.454777	-0.988260	-0.059991
11	6	1.619649	-1.277947	-0.068325
12	1	-0.578201	-0.735895	-0.050741
13	6	3.039373	-1.615547	-0.092781
14	1	3.332946	-1.998033	0.889701
15	1	3.193059	-2.436696	-0.798007
16	6	3.953942	-0.436985	-0.476886
17	1	4.972353	-0.821242	-0.583423
18	1	3.655720	-0.063899	-1.459910
19	6	3.945058	0.709948	0.532248
20	1	2.921379	1.069471	0.657688
21	1	4.257859	0.329761	1.509720
22	6	4.850994	1.869571	0.121665
23	1	4.829242	2.671265	0.861018

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
24	1	5.888537	1.545335	0.015175
25	1	4.538699	2.293194	-0.835084

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	12.5	0.2	0
2	17.5	0.4	0
3	18.0	0.2	0
4	34.1	0.0	0
5	42.6	0.2	0
6	52.1	0.3	0
7	88.6	0.2	0
8	108.2	0.4	0
9	209.9	0.2	0
10	246.0	0.0	0
11	259.8	0.4	0
12	353.5	5.2	2
13	383.5	1.1	0
14	568.8	3.8	1
15	617.6	0.0	0
16	621.4	17.1	7
17	661.1	30.5	13
18	736.8	0.1	0
19	739.5	30.0	13
20	747.0	3.3	1
21	760.7	100.0	45
22	818.8	0.5	0
23	835.4	0.1	0
24	859.4	0.0	0
25	889.1	19.8	9
26	893.5	0.7	0
27	894.4	0.0	0
28	933.0	0.3	0
29	948.2	1.8	0
30	1013.0	43.6	19
31	1013.8	17.0	7
32	1061.3	1.0	0
33	1063.1	0.1	0
34	1082.0	22.8	10
35	1119.6	1.2	0
36	1132.8	0.7	0
37	1167.4	0.1	0
38	1197.0	19.3	8
39	1241.9	0.5	0
40	1268.4	0.1	0
41	1295.3	0.1	0
42	1330.6	0.9	0
43	1340.0	1.3	0
44	1361.4	6.8	3
45	1401.3	3.0	1
46	1415.5	2.6	1
47	1416.5	2.3	1
48	1477.4	6.8	3
49	1487.7	0.7	0

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
50	1497.3	0.9	0
51	1502.3	6.8	3
52	1512.7	6.1	2
53	1513.8	25.7	11
54	1598.2	0.4	0
55	2213.9	0.3	0
56	3009.5	5.0	2
57	3012.8	19.6	8
58	3016.9	22.3	10
59	3021.6	52.5	24
60	3039.8	9.5	4
61	3045.8	22.8	10
62	3060.6	16.8	7
63	3081.8	73.5	33
64	3085.8	38.9	17
65	3244.7	2.6	1
66	3255.1	0.2	0
67	3277.5	0.2	0
68	3283.9	0.3	0
69	3440.4	218.1	100

File: m-fu-lhexi.log  
 Rechenmethode: **RmPWLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -464.478792253  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -464.266007  
 Dipolmomente: X=-0.4580 Y=0.2744 Z=0.0301 Gesamt=0.5348  
 Framework: C1[X(C10H14O)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-3.902208	-0.859154	0.337441
2	6	-5.061608	-0.162891	0.242207
3	6	-4.703156	1.153813	-0.204673
4	6	-3.354692	1.152063	-0.345103
5	8	-2.847251	-0.071007	-0.017863
6	1	-3.660579	-1.866694	0.625575
7	1	-6.048920	-0.533687	0.460710
8	1	-5.363798	1.983218	-0.393584
9	1	-2.637227	1.892622	-0.650615
10	6	0.406150	-0.947588	-0.056105
11	6	1.568098	-1.255691	-0.069425
12	1	-0.623462	-0.678148	-0.041744
13	6	2.984205	-1.617147	-0.100446
14	1	3.274453	-2.009346	0.880602
15	1	3.121890	-2.437350	-0.811837
16	6	3.916622	-0.448901	-0.481606
17	1	4.931137	-0.847801	-0.588340
18	1	3.623267	-0.067813	-1.464849
19	6	3.923294	0.696179	0.533692
20	1	2.903747	1.072016	0.658455
21	1	4.229833	0.306771	1.511323
22	6	4.849901	1.844375	0.126853
23	1	4.840167	2.644839	0.870071

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
24	1	5.883495	1.502672	0.020279
25	1	4.544368	2.276421	-0.830148

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	14.3	0.1	0
2	15.7	0.3	0
3	19.6	0.7	0
4	40.1	0.1	0
5	54.7	0.2	0
6	62.0	0.4	0
7	91.0	0.3	0
8	115.6	0.4	0
9	215.1	0.2	0
10	247.1	0.0	0
11	263.0	0.5	0
12	366.2	5.8	2
13	387.9	1.5	0
14	573.3	4.6	1
15	611.6	0.0	0
16	617.9	21.9	8
17	737.6	0.0	0
18	745.4	22.9	8
19	750.1	2.9	1
20	762.0	134.2	51
21	766.5	36.2	13
22	822.5	0.9	0
23	838.4	0.1	0
24	861.4	0.0	0
25	890.7	0.0	0
26	894.6	19.7	7
27	897.7	1.0	0
28	936.9	0.3	0
29	950.9	1.8	0
30	1015.5	71.1	27
31	1019.6	0.4	0
32	1062.9	1.3	0
33	1068.8	0.1	0
34	1082.6	30.6	11
35	1124.0	1.3	0
36	1137.2	0.8	0
37	1169.7	0.0	0
38	1200.0	22.0	8
39	1246.6	0.5	0
40	1273.9	0.2	0
41	1293.0	0.0	0
42	1335.4	0.9	0
43	1343.8	1.1	0
44	1367.7	7.2	2
45	1407.9	3.1	1
46	1417.1	1.7	0
47	1420.6	3.0	1
48	1484.3	7.6	2
49	1493.7	0.9	0

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
50	1503.3	1.1	0
51	1508.1	8.1	3
52	1517.4	32.5	12
53	1518.1	7.5	2
54	1601.3	0.0	0
55	2218.2	0.3	0
56	3018.5	6.6	2
57	3023.8	20.4	7
58	3025.6	23.0	8
59	3029.6	57.9	22
60	3050.5	8.9	3
61	3057.3	22.2	8
62	3070.2	16.2	6
63	3090.9	80.4	30
64	3094.4	41.3	15
65	3255.6	2.6	0
66	3266.2	0.0	0
67	3291.0	0.0	0
68	3297.1	0.4	0
69	3450.9	260.9	100

File: l-fu-lhexi.log  
 Rechenmethode: **RBLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB-LYP): -464.540594458  
 E(RB-LYP)+ZPE: -464.335306  
 Dipolmomente: X=-0.3835 Y=0.2661 Z=0.0321 Gesamt=0.4679  
 Framework: Cl[X(ClO<sub>10</sub>H<sub>14</sub>O)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-3.996918	-0.870475	0.339077
2	6	-5.165246	-0.164604	0.243991
3	6	-4.807534	1.160104	-0.203306
4	6	-3.446943	1.166247	-0.348494
5	8	-2.925703	-0.072485	-0.020486
6	1	-3.748376	-1.884172	0.626698
7	1	-6.160011	-0.536670	0.464000
8	1	-5.477056	1.992717	-0.390204
9	1	-2.723629	1.911119	-0.655123
10	6	0.453618	-0.971110	-0.058913
11	6	1.628964	-1.273816	-0.069117
12	1	-0.583706	-0.707005	-0.046220
13	6	3.052980	-1.626907	-0.098067
14	1	3.349472	-2.020495	0.889862
15	1	3.200605	-2.453502	-0.813124
16	6	3.994777	-0.447106	-0.484112
17	1	5.014287	-0.852998	-0.595695
18	1	3.696332	-0.064255	-1.473456
19	6	4.009497	0.708333	0.538512
20	1	2.983999	1.087584	0.670469
21	1	4.323585	0.316653	1.521393
22	6	4.941062	1.867386	0.125623
23	1	4.933370	2.671546	0.876109

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
24	1	5.982048	1.525839	0.013291
25	1	4.629159	2.305202	-0.835272

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	14.6	0.3	0
2	16.0	0.1	0
3	19.7	0.7	0
4	36.8	0.1	0
5	48.2	0.2	0
6	52.6	0.2	0
7	87.4	0.3	0
8	109.0	0.4	0
9	204.0	0.3	0
10	238.3	0.0	0
11	252.0	0.5	0
12	346.0	4.5	2
13	369.9	1.2	0
14	547.9	3.0	1
15	586.9	0.0	0
16	594.4	16.3	7
17	675.9	36.6	16
18	681.4	0.1	0
19	697.4	36.9	16
20	718.5	120.5	53
21	728.0	2.9	1
22	789.3	0.8	0
23	800.1	1.0	0
24	811.7	0.2	0
25	834.4	0.0	0
26	859.3	19.2	8
27	864.1	0.8	0
28	906.0	0.4	0
29	920.2	1.6	0
30	970.6	73.6	32
31	973.9	1.2	0
32	1009.1	0.5	0
33	1021.2	0.1	0
34	1039.3	9.8	4
35	1082.2	1.4	0
36	1098.0	0.6	0
37	1126.1	0.2	0
38	1134.4	20.8	9
39	1205.5	0.5	0
40	1230.3	0.1	0
41	1245.4	0.0	0
42	1291.9	1.4	0
43	1300.0	2.0	0
44	1317.3	6.9	3
45	1352.5	4.0	1
46	1358.7	2.3	1
47	1374.9	2.6	1
48	1437.7	6.7	2
49	1448.2	1.1	0

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
50	1448.6	23.9	10
51	1459.3	1.0	0
52	1465.0	7.5	3
53	1473.6	6.5	2
54	1529.6	0.0	0
55	2132.5	1.3	0
56	2929.5	11.9	5
57	2931.9	17.8	7
58	2938.0	29.2	13
59	2945.3	50.5	22
60	2956.1	21.8	9
61	2964.9	21.0	9
62	2981.5	19.0	8
63	3003.2	79.4	35
64	3006.1	43.5	19
65	3164.5	2.9	1
66	3174.9	0.7	0
67	3201.9	0.1	0
68	3207.7	0.3	0
69	3369.9	223.8	99

File: h-fu-lhexi.log  
 Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -461.716771435  
 E(RHF)+ZPE: -461.490785  
 Dipolmomente: X=0.4105 Y=0.2655 Z=-0.0076 Gesamt=0.4889  
 Framework: Cl[X(ClO<sub>10</sub>H<sub>14</sub>O)]

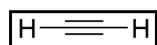
Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	3.745119	0.065318	-1.069521
2	6	4.987582	0.408838	-0.709025
3	6	4.968145	0.484767	0.731560
4	6	3.715947	0.179270	1.092595
5	8	2.959669	-0.078132	0.011705
6	1	3.284502	-0.108091	-2.017782
7	1	5.815075	0.587154	-1.363426
8	1	5.777990	0.732032	1.385624
9	1	3.229779	0.105810	2.041105
10	6	-0.481425	-0.927988	-0.026687
11	6	-1.631421	-1.218810	-0.049265
12	1	0.543479	-0.669820	-0.008509
13	6	-3.056510	-1.584644	-0.066572
14	1	-3.329861	-1.863381	-1.080793
15	1	-3.184921	-2.471723	0.546193
16	6	-3.987094	-0.472437	0.438419
17	1	-4.992139	-0.884942	0.503771
18	1	-3.694910	-0.198563	1.449412
19	6	-4.008396	0.772162	-0.447884
20	1	-3.003703	1.177925	-0.525357
21	1	-4.305367	0.487613	-1.456318
22	6	-4.955633	1.851047	0.074159
23	1	-4.953697	2.720908	-0.576142

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
24	1	-5.977571	1.484385	0.133734
25	1	-4.663889	2.180606	1.068169

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	1.0	0.0	0
2	9.1	0.5	0
3	10.4	0.4	0
4	29.7	0.1	0
5	46.4	0.2	0
6	60.2	0.3	0
7	91.1	0.2	0
8	118.1	0.2	0
9	230.4	0.5	0
10	262.8	0.1	0
11	280.2	0.6	0
12	404.9	5.9	3
13	416.3	5.2	2
14	614.1	7.8	4
15	652.2	34.8	18
16	654.5	0.0	0
17	794.4	1.9	0
18	848.5	0.1	0
19	852.5	6.8	3
20	855.0	157.8	85
21	863.5	40.2	21
22	870.0	4.5	2
23	887.4	0.1	0
24	955.8	23.1	12
25	958.9	1.9	1
26	990.5	0.6	0
27	996.5	1.0	0
28	1008.5	0.0	0
29	1017.9	1.0	0
30	1077.5	47.6	25
31	1078.9	1.0	0
32	1132.2	0.0	0
33	1145.0	75.8	40
34	1150.9	0.1	0
35	1206.8	1.0	0
36	1225.6	1.2	0
37	1253.6	0.3	0
38	1300.5	27.5	14
39	1340.1	0.6	0
40	1374.1	0.3	0
41	1397.9	0.0	0
42	1435.4	0.5	0
43	1445.8	3.1	1
44	1483.9	11.8	6
45	1528.4	2.7	1
46	1530.9	1.5	0
47	1540.8	0.8	0
48	1599.8	7.4	3
49	1607.5	1.1	0

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
50	1612.5	0.5	0
51	1614.5	6.7	3
52	1627.4	5.3	2
53	1659.3	49.4	26
54	1741.5	0.3	0
55	2368.3	0.3	0
56	3147.9	29.7	15
57	3152.4	19.0	10
58	3157.0	60.2	32
59	3174.2	13.2	7
60	3185.6	20.8	11
61	3196.7	6.5	3
62	3210.9	18.2	9
63	3216.9	71.6	38
64	3220.9	123.7	66
65	3393.6	3.8	2
66	3405.5	0.3	0
67	3433.2	1.0	0
68	3439.7	0.2	0
69	3602.0	185.6	100

Acetylen / Aceton



Acetylen Monomer **6a**

File: b-ethin-mo.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -77.3566625072  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -77.329679  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: D\*H[C\*(HC.CH)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.000000	0.599708
2	6	0.000000	0.000000	-0.599708
3	1	0.000000	0.000000	1.662826
4	1	0.000000	0.000000	-1.662826

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	PIG	647.5	0.0	0
2	PIG	647.5	0.0	0
3	PIU	772.7	112.0	100
4	PIU	772.7	112.0	99
5	SGG	2061.9	0.0	0
6	SGU	3419.7	93.9	83
7	SGG	3522.5	0.0	0

File: bp-ethin-mo.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -77.3635521005  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -77.336562  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: D\*H[C\*(HC.CH)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.000000	0.598012
2	6	0.000000	0.000000	-0.598012
3	1	0.000000	0.000000	1.659618
4	1	0.000000	0.000000	-1.659618

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	PIG	653.2	0.0	0
2	PIG	653.2	0.0	0
3	PIU	767.9	96.2	100
4	PIU	767.9	96.2	100
5	SGG	2071.8	0.0	0
6	SGU	3414.8	89.1	92
7	SGG	3518.3	0.0	0

File: m-ethin-mo.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -77.3089706675  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -77.281819  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: D\*H[C\*(HC.CH)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.000000	0.598920
2	6	0.000000	0.000000	-0.598920
3	1	0.000000	0.000000	1.660875
4	1	0.000000	0.000000	-1.660875

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	PIG	659.1	0.0	0
2	PIG	659.1	0.0	0
3	PIU	779.5	113.6	100
4	PIU	779.5	113.6	100
5	SGG	2073.5	0.0	0
6	SGU	3432.1	95.7	84
7	SGG	3535.5	0.0	0

File: l-ethin-mo.log  
 Rechenmethode: **RBLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB-LYP): -77.3251441945  
 E(RB-LYP)+ZPE: -77.299129  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: D\*H[C\*(HC.CH)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.000000	0.604388
2	6	0.000000	0.000000	-0.604388
3	1	0.000000	0.000000	1.672848
4	1	0.000000	0.000000	-1.672848

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	PIG	570.3	0.0	0
2	PIG	570.3	0.0	0
3	PIU	739.6	109.1	100
4	PIU	739.6	109.1	100
5	SGG	1998.6	0.0	0
6	SGU	3351.5	84.6	77
7	SGG	3449.3	0.0	0

File: mp-ethin-mo.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -76.8403648786  
 E(MP2): -77.1133018  
 E(MP2)+ZPE: -77.086980  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: D\*H[C\*(HC.CH)]

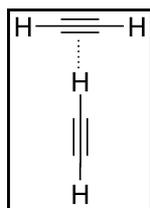
Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.000000	0.608091
2	6	0.000000	0.000000	-0.608091
3	1	0.000000	0.000000	1.673032
4	1	0.000000	0.000000	-1.673032

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	PIG	528.1	0.0	0
2	PIG	528.1	0.0	0
3	PIU	765.0	104.8	100
4	PIU	765.0	104.8	100
5	SGG	1963.3	0.0	0
6	SGU	3457.3	95.5	91
7	SGG	3547.2	0.0	0

File: h-ethin-mo.log  
 Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -76.8427783607  
 E(RHF)+ZPE: -76.813574  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: D\*H[C\*(HC.CH)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.000000	0.591734
2	6	0.000000	0.000000	-0.591734
3	1	0.000000	0.000000	1.647513
4	1	0.000000	0.000000	-1.647513

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	PIG	816.8	0.0	0
2	PIG	816.8	0.0	0
3	PIU	872.5	126.3	100
4	PIU	872.5	126.3	100
5	SGG	2205.5	0.0	0
6	SGU	3560.4	101.4	80
7	SGG	3674.6	0.0	0

Acetylen T-Form Dimer **6b**

File: b-ethin-dt.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -154.714671214  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -154.659971  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=-0.2799 Gesamt=0.2799  
 Framework: C2V[C2(HCCH),SGV(C2H2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.599826	-2.259786
2	6	0.000000	-0.599826	-2.259786
3	1	0.000000	1.663369	-2.265647
4	1	0.000000	-1.663369	-2.265647
5	1	0.000000	0.000000	0.595478
6	6	0.000000	0.000000	1.660839
7	6	0.000000	0.000000	2.860737
8	1	0.000000	0.000000	3.923786

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	B2	32.4	0.0	0
2	A1	55.2	0.2	0
3	B1	63.4	0.1	0
4	B2	97.6	0.6	0
5	A2	653.2	0.0	0
6	B1	662.2	4.5	2
7	B2	663.8	0.7	0
8	B2	674.3	6.1	3
9	B1	772.5	45.2	26
10	A1	781.4	122.9	71
11	B1	791.8	154.2	89
12	B2	797.8	84.8	49
13	A1	2056.9	2.7	1
14	A1	2060.8	0.0	0
15	A1	3401.9	172.0	99
16	B2	3415.8	100.0	58
17	A1	3510.8	1.1	0
18	A1	3518.9	0.0	0

File: bp-ethin-dt.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -154.728496993  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -154.673932  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=-0.3305 Gesamt=0.3305  
 Framework: C2V[C2(HCCH),SGV(C2H2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.598231	-2.248082
2	6	0.000000	-0.598231	-2.248082
3	1	0.000000	1.660218	-2.253043
4	1	0.000000	-1.660218	-2.253043
5	1	0.000000	0.000000	0.586820
6	6	0.000000	0.000000	1.650670
7	6	0.000000	0.000000	2.847246
8	1	0.000000	0.000000	3.908747

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	B2	25.8	0.0	0
2	B1	53.9	0.2	0
3	A1	56.1	0.2	0
4	B2	96.3	0.6	0
5	B1	653.6	3.2	1
6	A2	656.6	0.0	0
7	B2	661.1	2.8	1
8	B2	668.8	2.9	1
9	B1	767.1	31.6	18
10	A1	775.4	113.0	66
11	B1	782.1	143.0	84
12	B2	790.8	71.9	42
13	A1	2066.4	3.2	1
14	A1	2069.8	0.1	0
15	A1	3396.0	169.7	100
16	B2	3411.1	95.9	56
17	A1	3506.1	1.2	0
18	A1	3514.5	0.0	0

File: m-ethin-dt.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -154.620061700  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -154.564979  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=-0.2926 Gesamt=0.2926  
 Framework: C2V[C2(HCCH),SGV(C2H2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.599073	-2.223889
2	6	0.000000	-0.599073	-2.223889
3	1	0.000000	1.661478	-2.229145
4	1	0.000000	-1.661478	-2.229145
5	1	0.000000	0.000000	0.561328

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
6	6	0.000000	0.000000	1.625587
7	6	0.000000	0.000000	2.824032
8	1	0.000000	0.000000	3.885912

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	B2	35.2	0.0	0
2	A1	65.1	0.2	0
3	B1	66.2	0.2	0
4	B2	102.3	0.7	0
5	A2	664.9	0.0	0
6	B1	672.9	5.2	2
7	B2	675.5	0.8	0
8	B2	686.2	7.0	3
9	B1	779.0	46.1	25
10	A1	788.2	124.1	68
11	B1	799.6	153.7	84
12	B2	806.6	83.6	45
13	A1	2067.9	3.1	1
14	A1	2072.0	0.0	0
15	A1	3413.8	182.4	99
16	B2	3427.9	102.4	56
17	A1	3523.5	1.5	0
18	A1	3531.6	0.0	0

File: l-ethin-dt.log  
 Rechenmethode: **RBLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB-LYP): -154.651258661  
 E(RB-LYP)+ZPE: -154.598515  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=-0.2694 Gesamt=0.2694  
 Framework: C2V[C2(HCCH),SGV(C2H2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.604519	-2.307865
2	6	0.000000	-0.604519	-2.307865
3	1	0.000000	1.673312	-2.313719
4	1	0.000000	-1.673312	-2.313719
5	1	0.000000	0.000000	0.633788
6	6	0.000000	0.000000	1.704211
7	6	0.000000	0.000000	2.913483
8	1	0.000000	0.000000	3.981873

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	B2	29.6	0.0	0
2	A1	46.5	0.1	0
3	B1	58.3	0.1	0
4	B2	90.2	0.5	0
5	A2	576.9	0.0	0
6	B1	588.2	2.6	1
7	B2	591.7	0.4	0
8	B2	604.1	4.0	2

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
9	B1	738.9	42.3	26
10	A1	748.1	119.4	76
11	B1	756.7	154.1	98
12	B2	762.3	85.9	54
13	A1	1993.8	2.4	1
14	A1	1997.4	0.0	0
15	A1	3335.5	156.9	100
16	B2	3348.6	90.0	57
17	A1	3438.5	1.4	0
18	A1	3446.5	0.0	0

File: mp-ethin-dt.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -153.681490405  
 E(MP2): -154.2297859  
 E(MP2)+ZPE: -154.176094  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=-0.3157 Gesamt=0.3157  
 Framework: C2V[C2(HCCH),SGV(C2H2)]

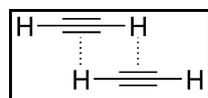
Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.608410	-2.185663
2	6	0.000000	-0.608410	-2.185663
3	1	0.000000	1.673889	-2.190412
4	1	0.000000	-1.673889	-2.190412
5	1	0.000000	0.000000	0.511336
6	6	0.000000	0.000000	1.578091
7	6	0.000000	0.000000	2.794863
8	1	0.000000	0.000000	3.859726

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	B2	44.2	0.0	0
2	B1	72.1	0.2	0
3	A1	81.0	0.1	0
4	B2	103.9	0.8	0
5	A2	527.1	0.0	0
6	B2	528.9	0.0	0
7	B1	558.1	4.8	2
8	B2	608.1	9.3	5
9	B1	764.4	62.2	34
10	A1	769.2	113.4	63
11	B1	798.9	122.4	68
12	B2	815.4	73.0	40
13	A1	1958.7	1.9	1
14	A1	1960.6	0.2	0
15	A1	3444.3	178.3	99
16	B2	3452.7	103.6	58
17	A1	3537.9	2.3	1
18	A1	3542.6	0.0	0

File: h-ethin-dt.log  
 Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -153.686838890  
 E(RHF)+ZPE: -153.627840  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=-0.2209 Gesamt=0.2209  
 Framework: C2V[C2(HCCH),SGV(C2H2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.591857	-2.360010
2	6	0.000000	-0.591857	-2.360010
3	1	0.000000	1.648079	-2.365098
4	1	0.000000	-1.648079	-2.365098
5	1	0.000000	0.000000	0.711873
6	6	0.000000	0.000000	1.768902
7	6	0.000000	0.000000	2.952750
8	1	0.000000	0.000000	4.008533

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	B2	28.0	0.0	0
2	A1	47.6	0.1	0
3	B1	59.2	0.1	0
4	B2	93.0	0.4	0
5	A2	818.6	0.0	0
6	B2	820.7	0.4	0
7	B1	824.0	8.1	4
8	B2	826.8	8.9	4
9	B1	872.0	43.0	23
10	A1	878.2	139.4	75
11	B1	886.5	184.1	100
12	B2	889.5	98.7	53
13	A1	2201.9	1.6	0
14	A1	2204.3	0.0	0
15	A1	3552.2	145.8	79
16	B2	3556.0	106.2	57
17	A1	3668.2	0.9	0
18	A1	3670.6	0.0	0

Acetylen verschoben-paralleles Dimer **6c**

File: b-ethin-dp.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -154.714240720  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -154.659756  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C4H4)]  
 Imaginäre Freq.: **-30.9 cm<sup>-1</sup>**

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.505601	2.269533	0.000000
2	1	1.511952	3.332723	0.000000
3	6	1.505601	1.069864	0.000000

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
4	1	1.499058	0.006081	0.000000
5	1	-1.499058	-0.006081	0.000000
6	6	-1.505601	-1.069864	0.000000
7	6	-1.505601	-2.269533	0.000000
8	1	-1.511952	-3.332723	0.000000

File: bp-ethin-dp.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP) -154.728147637  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE -154.673716  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C4H4)]  
 Imaginäre Freq.: **-30.8 cm<sup>-1</sup>**

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.491879	2.268128	0.000000
2	1	1.497222	3.329778	0.000000
3	6	1.491879	1.071687	0.000000
4	1	1.485077	0.009440	0.000000
5	1	-1.485077	-0.009440	0.000000
6	6	-1.491879	-1.071687	0.000000
7	6	-1.491879	-2.268128	0.000000
8	1	-1.497222	-3.329778	0.000000

File: m-ethin-dp.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP) -154.619661894  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE -154.564751  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C4H4)]  
 Imaginäre Freq.: **-23.7 cm<sup>-1</sup>**

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.459849	2.225286	0.000000
2	1	1.466322	3.287309	0.000000
3	6	1.459849	1.027121	0.000000
4	1	1.451187	-0.035560	0.000000
5	1	-1.451187	0.035560	0.000000
6	6	-1.459849	-1.027121	0.000000
7	6	-1.459849	-2.225286	0.000000
8	1	-1.466322	-3.287309	0.000000

File: l-ethin-dp.log  
 Rechenmethode: **RBLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB-LYP): -154.650844559  
 E(RB-LYP)+ZPE: -154.598305  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C4H4)]  
 Imaginäre Freq.: **-29.2 cm<sup>-1</sup>**

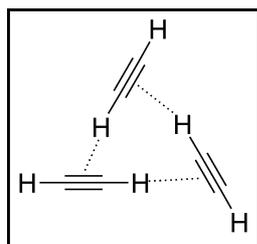
Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.560856	2.351245	0.000000
2	1	1.566802	3.419757	0.000000
3	6	1.560856	1.142236	0.000000
4	1	1.555456	0.073316	0.000000
5	1	-1.555456	-0.073316	0.000000
6	6	-1.560856	-1.142236	0.000000
7	6	-1.560856	-2.351245	0.000000
8	1	-1.566802	-3.419757	0.000000

File: mp-ethin-dp.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -153.681318067  
 E(MP2): -154.2289725  
 E(MP2)+ZPE: -154.175955  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C4H4)]  
 Imaginäre Freq.: **-47.4 cm<sup>-1</sup>**

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.425617	2.190367	0.000000
2	1	1.429769	3.255342	0.000000
3	6	1.425617	0.973870	0.000000
4	1	1.415949	-0.091455	0.000000
5	1	-1.415949	0.091455	0.000000
6	6	-1.425617	-0.973870	0.000000
7	6	-1.425617	-2.190367	0.000000
8	1	-1.429769	-3.255342	0.000000

File: h-ethin-dp.log  
 Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF) -153.686569478  
 E(RHF)+ZPE -153.627733  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C2H[SGH(C4H4)]  
 Imaginäre Freq.: **-19.3 cm<sup>-1</sup>**

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.585410	2.270934	0.000000
2	1	1.590107	3.326840	0.000000
3	6	1.585410	1.087213	0.000000
4	1	1.581364	0.030782	0.000000
5	1	-1.581364	-0.030782	0.000000
6	6	-1.585410	-1.087213	0.000000
7	6	-1.585410	-2.270934	0.000000
8	1	-1.590107	-3.326840	0.000000

Acetylen cyclisches Trimer **6d**

File: b-ethin-tc.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -232.073916498  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -231.991169  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C3H[SGH(C6H6)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	1	0.000000	1.777372	0.000000
2	6	-1.056576	1.917578	0.000000
3	6	-2.247214	2.068859	0.000000
4	1	-3.300728	2.213443	0.000000
5	1	-1.539249	-0.888686	0.000000
6	6	-1.132383	-1.873811	0.000000
7	6	-0.668078	-2.980574	0.000000
8	1	-0.266534	-3.965236	0.000000
9	1	1.539249	-0.888686	0.000000
10	6	2.188959	-0.043768	0.000000
11	6	2.915292	0.911715	0.000000
12	1	3.567262	1.751793	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	E'	45.3	0.3	0
2	E'	45.3	0.3	0
3	E''	55.3	0.0	0
4	E''	55.3	0.0	0
5	A'	64.7	0.0	0
6	A''	66.6	0.4	0
7	E'	81.2	0.3	0
8	E'	81.2	0.3	0
9	A'	133.6	0.0	0
10	A''	664.4	12.7	4
11	E''	664.5	0.0	0
12	E''	664.5	0.0	0
13	E'	679.5	5.7	2
14	E'	679.5	5.7	2
15	A'	689.4	0.0	0
16	E''	783.7	0.0	0
17	E''	783.7	0.0	0
18	E'	798.1	162.7	61
19	E'	798.1	162.6	61
20	A''	799.5	263.0	100
21	A'	810.4	0.0	0
22	A'	2053.3	0.0	0
23	E'	2056.7	2.0	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
24	E'	2056.7	2.0	0
25	A'	3395.8	0.0	0
26	E'	3397.8	245.6	93
27	E'	3397.8	245.5	93
28	A'	3505.8	0.0	0
29	E'	3507.1	0.7	0
30	E'	3507.1	0.7	0

File: bp-ethin-tc.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -232.094856414  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -232.012278  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C3H[SGH(C6H6)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	1	0.000000	1.766890	0.000000
2	6	-1.055579	1.903780	0.000000
3	6	-2.243662	2.050086	0.000000
4	1	-3.296255	2.189783	0.000000
5	1	-1.530172	-0.883445	0.000000
6	6	-1.120932	-1.866048	0.000000
7	6	-0.653596	-2.968111	0.000000
8	1	-0.248280	-3.949532	0.000000
9	1	1.530172	-0.883445	0.000000
10	6	2.176511	-0.037731	0.000000
11	6	2.897258	0.918025	0.000000
12	1	3.544535	1.759749	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	E'	45.7	0.4	0
2	E'	45.7	0.4	0
3	E''	52.6	0.0	0
4	E''	52.6	0.0	0
5	A''	61.9	0.5	0
6	A'	65.7	0.0	0
7	E'	81.4	0.4	0
8	E'	81.4	0.4	0
9	A'	132.7	0.0	0
10	A''	659.9	11.5	4
11	E''	661.6	0.0	0
12	E''	661.6	0.0	0
13	E'	675.3	5.4	2
14	E'	675.3	5.3	2
15	A'	684.7	0.0	0
16	E''	778.2	0.0	0
17	E''	778.2	0.0	0
18	A''	792.9	235.0	96
19	E'	793.5	147.6	60
20	E'	793.5	147.6	60
21	A'	804.4	0.0	0
22	A'	2061.6	0.0	0
23	E'	2065.4	2.1	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
24	E'	2065.4	2.1	0
25	A'	3389.4	0.0	0
26	E'	3391.4	244.0	100
27	E'	3391.4	244.0	99
28	A'	3500.8	0.0	0
29	E'	3501.9	0.9	0
30	E'	3501.9	0.8	0

File: m-ethin-tc.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -231.932980353  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -231.849597  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C3H[SGH(C6H6)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	1	0.000000	1.748898	0.000000
2	6	-1.057169	1.876882	0.000000
3	6	-2.248234	2.012376	0.000000
4	1	-3.302324	2.143606	0.000000
5	1	-1.514590	-0.874449	0.000000
6	6	-1.096843	-1.853976	0.000000
7	6	-0.618652	-2.953216	0.000000
8	1	-0.205255	-3.931700	0.000000
9	1	1.514590	-0.874449	0.000000
10	6	2.154012	-0.022906	0.000000
11	6	2.866886	0.940840	0.000000
12	1	3.507579	1.788094	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	E'	52.8	0.3	0
2	E'	52.8	0.3	0
3	E''	59.1	0.0	0
4	E''	59.1	0.0	0
5	A''	70.2	0.5	0
6	A'	74.5	0.0	0
7	E'	86.5	0.4	0
8	E'	86.5	0.4	0
9	A'	141.3	0.0	0
10	A''	675.9	14.7	5
11	E''	676.1	0.0	0
12	E''	676.1	0.0	0
13	E'	692.0	6.8	2
14	E'	692.0	6.8	2
15	A'	701.8	0.0	0
16	E''	791.5	0.0	0
17	E''	791.5	0.0	0
18	E'	807.3	162.5	62
19	E'	807.3	162.5	62
20	A''	808.0	260.3	100
21	A'	819.8	0.0	0
22	A'	2064.3	0.0	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
23	E'	2067.7	2.3	0
24	E'	2067.7	2.3	0
25	A'	3406.2	0.0	0
26	E'	3408.5	257.6	98
27	E'	3408.5	257.6	98
28	A'	3517.7	0.0	0
29	E'	3519.2	0.7	0
30	E'	3519.2	0.7	0

File: l-ethin-tc.log  
 Rechenmethode: **RBLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB-LYP): -231.978237684  
 E(RB-LYP)+ZPE: -231.898413  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C3H[SGH(C6H6)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	1	0.000000	1.817103	0.000000
2	6	-1.059191	1.975147	0.000000
3	6	-2.256494	2.147007	0.000000
4	1	-3.312658	2.310147	0.000000
5	1	-1.573658	-0.908552	0.000000
6	6	-1.180932	-1.904860	0.000000
7	6	-0.731116	-3.027685	0.000000
8	1	-0.344317	-4.023919	0.000000
9	1	1.573658	-0.908552	0.000000
10	6	2.240123	-0.070287	0.000000
11	6	2.987610	0.880677	0.000000
12	1	3.656975	1.713772	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	E'	38.3	0.3	0
2	E'	38.3	0.3	0
3	E''	52.1	0.0	0
4	E''	52.1	0.0	0
5	A'	55.4	0.0	0
6	A''	62.7	0.4	0
7	E'	76.2	0.3	0
8	E'	76.2	0.3	0
9	A'	123.4	0.0	0
10	E''	591.4	0.0	0
11	E''	591.4	0.0	0
12	A''	591.8	7.9	3
13	E'	612.3	3.9	1
14	E'	612.3	3.9	1
15	A'	623.9	0.0	0
16	E''	749.3	0.0	0
17	E''	749.3	0.0	0
18	E'	763.7	160.4	61
19	E'	763.7	160.5	61
20	A''	764.4	261.1	100
21	A'	775.6	0.0	0
22	A'	1990.5	0.0	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
23	E'	1993.6	1.8	0
24	E'	1993.6	1.8	0
25	A'	3330.0	0.0	0
26	E'	3331.7	225.0	86
27	E'	3331.7	225.0	86
28	A'	3434.1	0.0	0
29	E'	3435.2	0.8	0
30	E'	3435.2	0.8	0

File: mp-ethin-tc.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -230.523067377  
 E(MP2): -231.3489888  
 E(MP2)+ZPE: -231.267637  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C3H[SGH(C6H6)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	1	0.000000	1.684154	0.000000
2	6	-1.060154	1.811046	0.000000
3	6	-2.272377	1.925569	0.000000
4	1	-3.330774	2.047566	0.000000
5	1	-1.458520	-0.842077	0.000000
6	6	-1.038335	-1.823644	0.000000
7	6	-0.531404	-2.930721	0.000000
8	1	-0.107858	-3.908318	0.000000
9	1	1.458520	-0.842077	0.000000
10	6	2.098489	0.012597	0.000000
11	6	2.803780	1.005151	0.000000
12	1	3.438631	1.860751	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	E''	56.8	0.0	0
2	E''	56.8	0.0	0
3	A''	60.7	0.6	0
4	E'	62.2	0.1	0
5	E'	62.2	0.1	0
6	A'	90.2	0.0	0
7	E'	94.5	0.6	0
8	E'	94.5	0.6	0
9	A'	151.5	0.0	0
10	E''	551.5	0.0	0
11	E''	551.5	0.0	0
12	A''	551.7	11.1	4
13	E'	590.5	6.5	2
14	E'	590.5	6.5	2
15	A'	600.1	0.0	0
16	E''	783.2	0.0	0
17	E''	783.2	0.0	0
18	E'	800.1	145.7	55
19	E'	800.1	145.7	55
20	A''	801.4	243.5	93

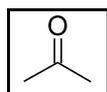
Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
21	A'	811.1	0.0	0
22	A'	1952.6	0.0	0
23	E'	1955.8	1.7	0
24	E'	1955.8	1.7	0
25	A'	3433.8	0.0	0
26	E'	3436.7	261.7	99
27	E'	3436.7	261.7	100
28	A'	3529.4	0.0	0
29	E'	3532.0	1.1	0
30	E'	3532.0	1.1	0

File: h-ethin-tc.log  
 Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -230.532057420  
 E(RHF)+ZPE: -230.442972  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0000 Gesamt=0.0000  
 Framework: C3H[SGH(C6H6)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	1	0.000000	1.897300	0.000000
2	6	-1.044087	2.065178	0.000000
3	6	-2.213392	2.251739	0.000000
4	1	-3.254982	2.425984	0.000000
5	1	-1.643110	-0.948650	0.000000
6	6	-1.266453	-1.936794	0.000000
7	6	-0.843367	-3.042723	0.000000
8	1	-0.473473	-4.031889	0.000000
9	1	1.643110	-0.948650	0.000000
10	6	2.310540	-0.128384	0.000000
11	6	3.056759	0.790984	0.000000
12	1	3.728455	1.605905	0.000000

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	E'	40.2	0.2	0
2	E'	40.2	0.2	0
3	E''	51.2	0.0	0
4	E''	51.2	0.0	0
5	A'	55.8	0.0	0
6	A''	63.4	0.2	0
7	E'	73.0	0.1	0
8	E'	73.0	0.1	0
9	A'	128.5	0.0	0
10	A''	823.1	20.3	6
11	E''	823.2	0.0	0
12	E''	823.2	0.0	0
13	E'	826.8	7.8	2
14	E'	826.8	7.8	2
15	A'	831.5	0.0	0
16	E''	879.7	0.0	0
17	E''	879.7	0.0	0
18	E'	889.6	183.9	59
19	E'	889.6	183.9	59
20	A''	893.0	308.8	100

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
21	A'	899.2	0.0	0
22	A'	2199.0	0.0	0
23	E'	2201.8	1.0	0
24	E'	2201.8	1.0	0
25	A'	3547.6	0.0	0
26	E'	3548.5	211.3	68
27	E'	3548.5	211.3	68
28	A'	3664.0	0.0	0
29	E'	3665.3	0.5	0
30	E'	3665.3	0.5	0



Aceton Monomer 7

File: b-aceton-mo-c2.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -193.218269306  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -193.135042  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=-3.1383 Gesamt=3.1383  
 Framework: C2[C2(CO),X(C2H6)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.000000	0.184910
2	6	0.000000	1.290568	-0.612846
3	1	-0.110484	2.143383	0.055526
4	1	0.941113	1.382234	-1.165517
5	1	-0.805377	1.288881	-1.353634
6	6	0.000000	-1.290568	-0.612846
7	1	-0.941113	-1.382234	-1.165517
8	1	0.805377	-1.288881	-1.353634
9	1	0.110484	-2.143383	0.055526
10	8	0.000000	0.000000	1.396493

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A	65.5	0.0	0
2	B	131.6	0.1	0
3	A	380.0	1.6	0
4	B	489.8	0.5	0
5	B	535.7	13.5	6
6	A	782.5	1.7	0
7	A	883.7	0.1	0
8	B	888.8	8.9	4
9	A	1083.1	0.0	0
10	B	1115.8	2.8	1
11	B	1232.3	75.0	35
12	A	1385.6	20.8	9
13	B	1386.7	61.7	29
14	B	1461.3	0.8	0
15	A	1464.8	7.0	3
16	A	1471.8	24.5	11
17	B	1487.7	23.5	11

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
18	A	1786.0	208.6	100
19	B	3024.2	1.4	0
20	A	3031.0	7.2	3
21	A	3079.4	0.8	0
22	B	3086.3	19.7	9
23	B	3139.2	12.3	5
24	A	3140.2	7.6	3

File: bp-aceton-mo.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -193.233158041  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -193.150003  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=-2.9152 Gesamt=2.9152  
 Framework: C2V[C2(CO),SGV(C2H2),X(H4)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.000000	0.184854
2	6	0.000000	1.288133	-0.611599
3	1	0.000000	2.140867	0.061921
4	1	0.876889	1.331869	-1.261508
5	1	-0.876889	1.331869	-1.261508
6	6	0.000000	-1.288133	-0.611599
7	1	-0.876889	-1.331869	-1.261508
8	1	0.876889	-1.331869	-1.261508
9	1	0.000000	-2.140867	0.061921
10	8	0.000000	0.000000	1.394032

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A2	18.5	0.0	0
2	B1	132.8	0.0	0
3	A1	377.9	1.5	0
4	B1	489.6	0.4	0
5	B2	535.3	14.8	8
6	A1	781.8	1.8	1
7	B2	884.8	9.9	5
8	A2	885.7	0.0	0
9	A1	1084.4	0.0	0
10	B1	1120.4	2.6	1
11	B2	1233.9	75.2	42
12	A1	1386.9	18.5	10
13	B2	1387.5	56.7	32
14	B2	1460.5	0.5	0
15	A2	1466.0	0.0	0
16	A1	1470.5	28.1	16
17	B1	1488.1	18.6	10
18	A1	1794.2	175.1	100
19	B2	3026.0	1.2	0
20	A1	3033.2	7.1	4
21	A2	3078.0	0.0	0
22	B1	3085.5	19.7	11
23	B2	3139.2	12.4	7
24	A1	3140.3	7.5	4

File: m-aceton-mo.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -193.109786286  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -193.026136  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=-3.1529 Gesamt=3.1529  
 Framework: C2[C2(CO),X(C2H6)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.000000	0.184989
2	6	0.000000	1.289570	-0.612257
3	1	-0.110479	2.141261	0.055843
4	1	0.940356	1.380540	-1.164197
5	1	-0.804903	1.287112	-1.351984
6	6	0.000000	-1.289570	-0.612257
7	1	-0.940356	-1.380540	-1.164197
8	1	0.804903	-1.287112	-1.351984
9	1	0.110479	-2.141261	0.055843
10	8	0.000000	0.000000	1.394728

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A	68.4	0.0	0
2	B	133.6	0.1	0
3	A	381.9	1.6	0
4	B	492.4	0.7	0
5	B	538.8	14.1	6
6	A	787.9	1.5	0
7	A	890.1	0.1	0
8	B	895.9	8.4	3
9	A	1090.3	0.0	0
10	B	1123.7	2.6	1
11	B	1240.6	73.1	34
12	A	1395.0	20.0	9
13	B	1396.7	61.7	29
14	B	1469.4	0.9	0
15	A	1472.8	6.8	3
16	A	1479.8	24.7	11
17	B	1495.6	23.5	11
18	A	1799.6	212.6	100
19	B	3035.7	1.4	0
20	A	3042.6	7.4	3
21	A	3089.9	0.8	0
22	B	3096.8	20.4	9
23	B	3149.8	12.2	5
24	A	3150.8	7.7	3

File: l-aceton-mo.log  
 Rechenmethode: **RBLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB-LYP): -193.139483585  
 E(RB-LYP)+ZPE: -193.058618  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=-3.0619 Gesamt=3.0619  
 Framework: C2[C2(CO),X(C2H6)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.000000	0.185721
2	6	0.000000	1.301275	-0.618548
3	1	-0.125227	2.158478	0.052106
4	1	0.953482	1.401354	-1.162157
5	1	-0.798988	1.295610	-1.375997
6	6	0.000000	-1.301275	-0.618548
7	1	-0.953482	-1.401354	-1.162157
8	1	0.798988	-1.295610	-1.375997
9	1	0.125227	-2.158478	0.052106
10	8	0.000000	0.000000	1.410043

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A	71.4	0.0	0
2	B	127.8	0.0	0
3	A	371.2	1.5	0
4	B	474.5	0.3	0
5	B	518.3	10.8	5
6	A	746.7	2.8	1
7	B	855.0	14.7	7
8	A	859.0	0.1	0
9	A	1052.1	0.0	0
10	B	1079.5	2.1	1
11	B	1184.1	84.3	44
12	B	1341.1	48.2	25
13	A	1345.1	22.4	11
14	B	1426.1	0.8	0
15	A	1428.4	8.3	4
16	A	1436.1	24.7	13
17	B	1450.9	21.9	11
18	A	1697.2	188.9	99
19	B	2948.6	2.1	1
20	A	2955.8	8.5	4
21	A	2998.6	1.2	0
22	B	3005.2	21.9	11
23	B	3061.1	14.0	7
24	A	3062.1	9.0	4

File: mp-aceton-mo-c2.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -192.015188475  
 E(MP2): -192.6556301  
 E(MP2)+ZPE: -192.571188  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=-3.5429 Gesamt=3.5429  
 Framework: C2[C2(CO),X(C2H6)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.000000	0.185485
2	6	0.000000	1.285913	-0.617182
3	1	-0.149620	2.139963	0.043722
4	1	0.960202	1.388036	-1.134404
5	1	-0.781068	1.258504	-1.383169
6	6	0.000000	-1.285913	-0.617182

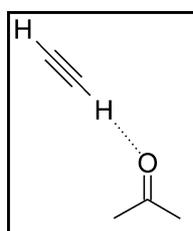
Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
7	1	-0.960202	-1.388036	-1.134404
8	1	0.781068	-1.258504	-1.383169
9	1	0.149620	-2.139963	0.043722
10	8	0.000000	0.000000	1.405122

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A	74.8	0.0	0
2	B	130.3	0.1	0
3	A	379.2	0.9	0
4	B	480.3	0.6	0
5	B	534.6	13.0	9
6	A	805.9	1.7	1
7	A	890.5	0.1	0
8	B	908.9	5.5	4
9	A	1090.6	0.0	0
10	B	1117.5	0.9	0
11	B	1255.9	57.8	43
12	A	1397.4	15.9	11
13	B	1405.5	65.9	49
14	B	1481.8	1.0	0
15	A	1482.7	7.3	5
16	A	1490.3	20.1	15
17	B	1504.2	22.4	16
18	A	1767.1	133.7	100
19	B	3072.6	1.9	1
20	A	3077.4	6.1	4
21	A	3154.5	0.8	0
22	B	3159.5	14.7	10
23	B	3201.8	8.9	6
24	A	3202.8	5.3	3

File: h-aceton-mo.log  
 Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -192.017243642  
 E(RHF)+ZPE: -191.928602  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=-3.3388 Gesamt=3.3388  
 Framework: C2[C2(CO),X(C2H6)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.000000	0.188607
2	6	0.000000	1.286948	-0.606546
3	1	0.000230	2.135436	0.063588
4	1	0.875276	1.327233	-1.249193
5	1	-0.875550	1.327427	-1.248809
6	6	0.000000	-1.286948	-0.606546
7	1	-0.875276	-1.327233	-1.249193
8	1	0.875550	-1.327427	-1.248809
9	1	-0.000230	-2.135436	0.063588
10	8	0.000000	0.000000	1.376968

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A	13.3	0.0	0
2	B	140.9	0.3	0
3	A	402.7	1.7	0
4	B	530.7	2.5	0
5	B	576.8	21.8	7
6	A	841.3	0.1	0
7	A	961.7	0.0	0
8	B	968.7	4.3	1
9	A	1177.2	0.5	0
10	B	1223.8	2.5	0
11	B	1337.4	69.7	24
12	A	1516.0	9.7	3
13	B	1527.3	54.4	19
14	B	1578.2	0.2	0
15	A	1584.4	0.0	0
16	A	1586.9	28.4	9
17	B	1606.4	21.4	7
18	A	1983.8	285.3	100
19	B	3165.6	3.2	1
20	A	3173.6	12.4	4
21	A	3220.4	0.0	0
22	B	3229.6	38.8	13
23	B	3280.4	18.4	6
24	A	3281.9	13.7	4

Dimer Acetylen/Aceton 1:1 gewinkelt **8a**

File: b-AyAon-dg.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -270.579671433  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -270.468357  
 Dipolmomente: X=3.4051 Y=1.7127 Z=0.0765 Gesamt=3.8124  
 Framework: C1[X(C5H8O)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-2.881960	-0.217521	-0.006978
2	6	-4.055745	0.034958	0.021010
3	1	-1.835215	-0.436571	-0.031614
4	1	-5.095325	0.254621	0.045714
5	8	0.341967	-0.712330	-0.037624
6	6	1.363565	-0.056901	-0.007913
7	6	2.725202	-0.719383	0.025806
8	1	3.204875	-0.520374	0.990173
9	1	2.622514	-1.794971	-0.110266
10	1	3.378988	-0.303256	-0.746405
11	6	1.339706	1.457777	-0.001849
12	1	1.778046	1.834139	-0.932263

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
13	1	0.316935	1.821120	0.087322
14	1	1.948843	1.850354	0.817876

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	16.8	4.0	1
2	20.3	3.4	1
3	54.9	0.0	0
4	96.1	2.9	0
5	113.2	0.0	0
6	120.2	0.1	0
7	129.6	0.1	0
8	382.2	2.8	0
9	489.5	0.4	0
10	538.4	15.4	4
11	680.2	18.4	5
12	683.9	16.8	5
13	787.0	1.4	0
14	838.5	94.1	28
15	841.9	87.0	25
16	884.4	0.5	0
17	893.7	7.7	2
18	1084.0	0.0	0
19	1116.8	3.4	1
20	1238.8	74.1	22
21	1387.0	29.8	8
22	1389.6	54.6	16
23	1460.6	1.2	0
24	1463.2	9.0	2
25	1471.3	25.6	7
26	1486.1	23.2	6
27	1777.8	274.3	81
28	2048.7	14.7	4
29	3025.4	0.6	0
30	3032.2	6.6	1
31	3080.8	0.9	0
32	3087.7	15.5	4
33	3141.1	10.6	3
34	3142.1	6.3	1
35	3359.9	334.9	100
36	3497.6	1.7	0

File: bp-AyAon-dg.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -270.601736879  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -270.490434  
 Dipolmomente: X=-3.0100 Y=1.9096 Z=0.0094 Gesamt=3.5647  
 Framework: C1[X(C5H8O)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	2.806269	-0.272461	-0.000207
2	6	3.957311	0.058153	0.001758

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
3	1	1.777645	-0.560761	-0.001893
4	1	4.978260	0.348149	0.003545
5	8	-0.413276	-0.851831	-0.003253
6	6	-1.338514	-0.068912	-0.001326
7	6	-2.772801	-0.547306	0.004088
8	1	-3.278190	-0.216724	-0.906339
9	1	-2.804454	-1.631648	0.064977
10	1	-3.318184	-0.111028	0.843540
11	6	-1.120053	1.427023	-0.002440
12	1	-1.514789	1.858204	0.920690
13	1	-0.061328	1.656926	-0.084290
14	1	-1.666028	1.892544	-0.825444

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	16.4	2.7	0
2	23.2	3.3	1
3	43.4	0.1	0
4	95.4	3.4	1
5	114.8	0.0	0
6	120.4	0.1	0
7	137.7	0.0	0
8	383.3	2.8	0
9	492.3	0.3	0
10	539.3	16.3	5
11	669.7	14.5	4
12	677.7	14.4	4
13	787.0	1.8	0
14	828.7	68.5	21
15	833.4	85.4	26
16	886.4	0.4	0
17	890.3	8.2	2
18	1087.5	0.1	0
19	1121.9	3.1	0
20	1240.0	72.6	22
21	1390.0	32.6	10
22	1391.8	43.7	13
23	1460.9	0.8	0
24	1465.1	4.0	1
25	1471.9	24.8	7
26	1488.8	18.4	5
27	1782.6	235.9	73
28	2058.0	12.9	4
29	3028.1	0.4	0
30	3035.0	6.6	2
31	3080.3	0.4	0
32	3087.6	15.1	4
33	3141.7	10.0	3
34	3142.7	5.4	1
35	3351.4	320.5	100
36	3491.8	1.9	0

File: m-AyAon-dg.log  
 Rechenmethode: **RmPWLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -270.424606519  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -270.312655  
 Dipolmomente: X=3.3264 Y=1.8493 Z=0.0854 Gesamt=3.8069  
 Framework: C1[X(C5H8O)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-2.831535	-0.241790	-0.005027
2	6	-3.996270	0.043750	0.022807
3	1	-1.792098	-0.489493	-0.029426
4	1	-5.028174	0.292091	0.047380
5	8	0.357629	-0.764519	-0.042958
6	6	1.344499	-0.061003	-0.009311
7	6	2.735673	-0.655664	0.030980
8	1	3.204624	-0.423164	0.991820
9	1	2.684903	-1.735158	-0.094459
10	1	3.366630	-0.216223	-0.745860
11	6	1.246547	1.449647	-0.004612
12	1	1.674341	1.846216	-0.930216
13	1	0.207405	1.762343	0.075269
14	1	1.827854	1.869909	0.820135

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	18.0	3.8	1
2	20.2	3.4	0
3	55.5	0.0	0
4	104.9	3.2	0
5	117.1	0.0	0
6	124.4	0.0	0
7	133.1	0.1	0
8	384.9	2.8	0
9	492.4	0.5	0
10	542.3	16.5	4
11	690.5	19.9	5
12	695.1	18.3	5
13	792.6	1.3	0
14	849.3	96.4	27
15	851.6	85.8	24
16	890.2	0.7	0
17	900.2	7.2	2
18	1092.0	0.1	0
19	1125.0	3.1	0
20	1247.6	72.7	21
21	1396.5	30.8	8
22	1399.8	52.8	15
23	1468.7	1.2	0
24	1471.1	8.9	2
25	1479.8	25.1	7
26	1494.6	23.2	6
27	1791.0	277.3	80
28	2059.2	14.8	4
29	3037.1	0.6	0
30	3043.9	6.6	1

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
31	3091.5	0.9	0
32	3098.6	16.1	4
33	3151.1	9.6	2
34	3152.7	7.0	2
35	3368.9	345.6	100
36	3509.6	1.6	0

File: l-AyAon-dg.log  
 Rechenmethode: RBLYP/6-311++G(d,p)  
 E(RB-LYP): -270.468665161  
 E(RB-LYP)+ZPE: -270.360770  
 Dipolmomente: X=3.3951 Y=1.5945 Z=0.0395 Gesamt=3.7511  
 Framework: Cl[X(C5H8O)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-2.936108	-0.200166	-0.002583
2	6	-4.124607	0.028387	0.010117
3	1	-1.879440	-0.396804	-0.013712
4	1	-5.174329	0.225787	0.021264
5	8	0.334631	-0.685467	-0.019920
6	6	1.386824	-0.054720	-0.004153
7	6	2.738601	-0.764479	0.011230
8	1	3.230600	-0.597531	0.983340
9	1	2.602302	-1.840374	-0.143264
10	1	3.408840	-0.352926	-0.758815
11	6	1.409750	1.472231	0.001293
12	1	1.825860	1.836774	-0.951951
13	1	0.396709	1.869450	0.127398
14	1	2.065642	1.851842	0.799683

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	6.2	3.5	1
2	17.6	3.4	1
3	54.8	0.1	0
4	87.3	2.6	0
5	104.9	0.0	0
6	113.1	0.1	0
7	121.9	0.1	0
8	372.3	2.7	0
9	474.4	0.3	0
10	520.2	12.2	3
11	613.5	12.8	3
12	619.4	11.9	3
13	751.5	2.4	0
14	798.9	94.2	28
15	802.3	89.7	27
16	859.3	7.2	2
17	860.6	6.0	1
18	1052.0	0.1	0
19	1080.4	2.7	0
20	1190.2	83.0	25
21	1343.6	47.8	14
22	1346.9	25.1	7

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
23	1425.0	0.8	0
24	1426.7	10.7	3
25	1434.8	26.7	8
26	1448.7	21.5	6
27	1689.4	250.8	76
28	1985.0	14.6	4
29	2950.1	1.0	0
30	2957.1	7.6	2
31	3000.3	1.8	0
32	3006.6	17.5	5
33	3063.3	12.0	3
34	3064.3	7.7	2
35	3292.9	326.1	100
36	3424.9	1.9	0

File: mp-AyAon-dg.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -268.859595472  
 E(MP2): -269.7749343  
 E(MP2)+ZPE: -269.662663  
 Dipolmomente: X=2.9193 Y=2.6956 Z=0.2409 Gesamt=3.9808  
 Framework: C1[X(C5H8O)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-2.691754	-0.335154	-0.001527
2	6	-3.828548	0.096126	0.068709
3	1	-1.684382	-0.693391	-0.060044
4	1	-4.826788	0.462211	0.127882
5	8	0.514482	-1.012258	-0.115986
6	6	1.306093	-0.085690	-0.026708
7	6	2.794306	-0.323632	0.111424
8	1	3.111459	-0.031048	1.118360
9	1	3.022549	-1.377373	-0.049726
10	1	3.348287	0.298524	-0.597996
11	6	0.857791	1.360736	-0.052162
12	1	1.183469	1.816195	-0.993893
13	1	-0.227747	1.427762	0.024386
14	1	1.329972	1.920873	0.760504

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	11.7	2.4	0
2	30.6	3.0	1
3	86.3	0.0	0
4	104.5	3.1	1
5	109.4	0.0	0
6	127.0	0.1	0
7	133.1	0.0	0
8	382.9	1.8	0
9	479.1	0.6	0
10	541.0	16.0	5
11	599.1	11.7	4
12	617.2	8.6	3

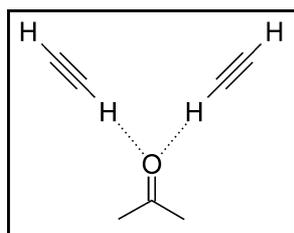
Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
13	808.8	1.0	0
14	837.1	105.3	37
15	846.7	83.3	29
16	893.1	0.6	0
17	914.8	4.5	1
18	1092.6	0.0	0
19	1118.9	1.1	0
20	1262.9	61.9	22
21	1400.0	19.6	7
22	1408.9	60.8	21
23	1482.4	0.7	0
24	1482.5	10.9	3
25	1491.5	16.7	5
26	1504.8	20.8	7
27	1763.8	159.3	57
28	1951.2	6.6	2
29	3073.4	0.7	0
30	3077.8	6.3	2
31	3155.2	1.2	0
32	3160.0	11.3	4
33	3202.9	5.5	1
34	3203.8	4.3	1
35	3402.9	278.9	100
36	3523.4	1.7	0

File: h-AyAon-dg.log  
 Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -268.864761133  
 E(RHF)+ZPE: -268.745809  
 Dipolmomente: X=-3.8027 Y=1.2625 Z=0.0567 Gesamt=4.0071  
 Framework: Cl[X(C5H8O)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	3.021649	-0.147849	-0.001389
2	6	4.195062	0.016126	0.010710
3	1	1.971501	-0.293072	-0.012189
4	1	5.240621	0.160356	0.021429
5	8	-0.302937	-0.488618	-0.026097
6	6	-1.405629	-0.040604	-0.005354
7	6	-2.622338	-0.936788	0.016670
8	1	-3.189345	-0.800643	-0.900520
9	1	-2.319721	-1.970918	0.104515
10	1	-3.273984	-0.669172	0.843352
11	6	-1.657436	1.449545	0.000422
12	1	-2.128576	1.733325	0.937834
13	1	-0.725433	1.985954	-0.111769
14	1	-2.339413	1.720534	-0.800233

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	13.8	3.6	0
2	16.4	6.3	1
3	44.9	0.0	0
4	86.6	1.7	0

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
5	117.4	0.0	0
6	121.6	0.0	0
7	138.4	0.5	0
8	404.3	2.9	0
9	530.4	2.5	0
10	577.2	23.0	6
11	826.6	29.6	7
12	827.8	31.9	8
13	843.4	0.0	0
14	928.8	92.9	24
15	934.5	91.1	24
16	962.9	0.5	0
17	973.3	3.9	1
18	1178.5	1.0	0
19	1224.5	3.0	0
20	1341.7	68.6	18
21	1517.8	9.4	2
22	1529.5	54.1	14
23	1578.3	0.3	0
24	1583.0	12.0	3
25	1587.7	19.9	5
26	1606.0	21.1	5
27	1975.4	372.2	100
28	2194.5	10.8	2
29	3167.3	2.3	0
30	3175.0	11.1	2
31	3223.3	0.8	0
32	3232.0	32.9	8
33	3282.1	16.6	4
34	3284.1	13.1	3
35	3528.4	265.1	71
36	3656.7	3.4	0

Trimer Acetylen/Aceton 2:1 V-Form **8b**

File: b-AyAonAy-tv-c2.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -347.940247660  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -347.800652  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=4.0458 Gesamt=4.0458  
 Framework: C2[C2(OC),X(C6H10)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.000000	1.517095
2	6	0.013368	-1.289220	2.308516
3	6	-0.013368	1.289220	2.308516

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
4	8	0.000000	0.000000	0.299990
5	6	-0.004687	2.659844	-1.643251
6	6	0.000000	3.703531	-2.237040
7	1	-0.008925	1.734704	-1.107239
8	1	0.004166	4.624198	-2.768226
9	6	0.000000	-3.703531	-2.237040
10	6	0.004687	-2.659844	-1.643251
11	1	-0.004166	-4.624198	-2.768226
12	1	0.008925	-1.734704	-1.107239
13	1	-0.754710	-1.273695	3.087082
14	1	-0.135998	-2.144904	1.651812
15	1	0.978754	-1.389834	2.815976
16	1	0.135998	2.144904	1.651812
17	1	0.754710	1.273695	3.087082
18	1	-0.978754	1.389834	2.815976

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A	15.4	0.1	0
2	A	16.9	0.0	0
3	B	26.0	4.0	1
4	B	26.4	5.2	1
5	A	73.1	0.0	0
6	A	81.8	0.8	0
7	B	96.8	3.8	1
8	A	110.2	0.0	0
9	B	115.6	0.1	0
10	A	129.9	0.0	0
11	B	130.1	0.8	0
12	B	141.2	0.0	0
13	A	386.0	3.6	0
14	B	491.6	0.4	0
15	B	543.3	18.6	4
16	A	680.7	0.0	0
17	B	683.4	35.2	9
18	B	685.9	11.0	2
19	A	687.6	18.4	4
20	A	790.0	1.4	0
21	B	830.6	25.3	6
22	A	831.6	0.0	0
23	A	843.1	174.1	46
24	B	843.9	166.1	44
25	A	886.5	0.3	0
26	B	899.9	6.9	1
27	A	1086.4	0.2	0
28	B	1117.8	4.3	1
29	B	1244.7	78.4	20
30	A	1390.5	28.1	7
31	B	1392.7	56.9	15
32	B	1461.8	0.6	0
33	A	1462.6	14.6	3
34	A	1473.0	19.7	5
35	B	1487.5	21.9	5
36	A	1766.9	297.1	78

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
37	B	2048.6	13.1	3
38	A	2050.2	8.3	2
39	B	3027.6	0.1	0
40	A	3034.1	5.7	1
41	A	3083.5	1.7	0
42	B	3090.0	11.9	3
43	B	3143.4	7.8	2
44	A	3144.2	4.0	1
45	B	3360.5	376.2	100
46	A	3365.7	227.5	60
47	B	3497.7	0.1	0
48	A	3498.4	2.7	0

File: bp-AyAonAy-tv-c2.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -347.969459043  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -347.830095  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=3.8795 Gesamt=3.8795  
 Framework: C2[C2(OC),X(C6H10)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.000000	1.475880
2	6	0.001789	-1.286189	2.266566
3	6	-0.001789	1.286189	2.266566
4	8	0.000000	0.000000	0.260913
5	6	-0.001889	2.728361	-1.616855
6	6	0.000000	3.790235	-2.170207
7	1	-0.003624	1.786405	-1.114838
8	1	0.001664	4.728597	-2.666265
9	6	0.000000	-3.790235	-2.170207
10	6	0.001889	-2.728361	-1.616855
11	1	-0.001664	-4.728597	-2.666265
12	1	0.003624	-1.786405	-1.114838
13	1	-0.783494	-1.272677	3.024563
14	1	-0.129014	-2.141437	1.609550
15	1	0.951521	-1.382239	2.798677
16	1	0.129014	2.141437	1.609550
17	1	0.783494	1.272677	3.024563
18	1	-0.951521	1.382239	2.798677

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A	14.8	0.1	0
2	A	22.8	0.0	0
3	B	25.0	5.1	1
4	B	28.0	3.4	0
5	A	71.0	0.0	0
6	A	77.7	0.6	0
7	B	93.1	4.3	1
8	A	99.6	0.0	0
9	B	113.6	0.1	0
10	A	125.7	0.0	0
11	B	125.7	0.9	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
12	B	139.2	0.0	0
13	A	386.6	3.7	0
14	B	493.7	0.3	0
15	B	544.1	18.3	4
16	A	661.2	0.0	0
17	B	667.0	25.1	6
18	B	676.7	9.1	2
19	A	678.5	15.4	4
20	A	790.3	1.7	0
21	A	807.5	0.0	0
22	B	822.0	99.6	26
23	B	823.0	51.5	13
24	A	834.7	164.1	43
25	A	889.3	0.1	0
26	B	899.5	6.9	1
27	A	1089.5	0.2	0
28	B	1122.5	3.8	0
29	B	1246.5	75.5	19
30	A	1393.6	26.7	7
31	B	1395.0	48.2	12
32	B	1462.6	0.4	0
33	A	1464.1	10.6	2
34	A	1474.1	18.2	4
35	B	1488.9	17.5	4
36	A	1770.7	265.7	69
37	B	2058.8	12.3	3
38	A	2060.2	6.6	1
39	B	3029.3	0.0	0
40	A	3036.0	5.9	1
41	A	3082.2	1.3	0
42	B	3089.2	11.5	3
43	B	3144.1	7.0	1
44	A	3144.8	3.3	0
45	B	3358.5	379.8	100
46	A	3363.6	198.0	52
47	B	3494.1	0.0	0
48	A	3494.8	3.4	0

File: m-AyAonAy-tv.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -347.738739604  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -347.598251  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=4.0334 Gesamt=4.0334  
 Framework: C2[C2(OC),X(C6H10)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.000000	1.454827
2	6	0.032824	-1.288095	2.245269
3	6	-0.032824	1.288095	2.245269
4	8	0.000000	0.000000	0.239236
5	6	0.000000	2.690022	-1.599298
6	6	0.005882	3.761442	-2.138293
7	1	-0.005167	1.740140	-1.110562

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
8	1	0.010946	4.707058	-2.621095
9	6	-0.005882	-3.761442	-2.138293
10	6	0.000000	-2.690022	-1.599298
11	1	-0.010946	-4.707058	-2.621095
12	1	0.005167	-1.740140	-1.110562
13	1	-0.733985	-1.282803	3.023714
14	1	-0.104721	-2.145115	1.589310
15	1	0.999447	-1.373784	2.751138
16	1	0.104721	2.145115	1.589310
17	1	0.733985	1.282803	3.023714
18	1	-0.999447	1.373784	2.751138

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A	16.5	0.1	0
2	A	17.9	0.0	0
3	B	27.3	5.6	1
4	B	29.8	3.9	0
5	A	79.0	0.0	0
6	A	87.7	0.7	0
7	B	107.8	4.1	0
8	A	114.1	0.0	0
9	B	118.6	0.0	0
10	A	134.9	0.0	0
11	B	135.3	1.1	0
12	B	144.2	0.0	0
13	A	388.5	3.6	0
14	B	494.4	0.5	0
15	B	547.6	20.1	4
16	A	692.4	0.0	0
17	B	694.9	38.4	9
18	B	698.0	10.6	2
19	A	699.3	21.7	5
20	A	795.4	1.3	0
21	B	841.8	17.2	4
22	A	842.6	0.0	0
23	A	853.8	186.3	45
24	B	855.1	163.8	39
25	A	893.2	0.3	0
26	B	907.6	6.3	1
27	A	1094.1	0.3	0
28	B	1125.9	4.1	0
29	B	1253.8	78.7	19
30	A	1400.4	27.5	6
31	B	1403.1	55.9	13
32	B	1470.1	0.5	0
33	A	1470.8	14.6	3
34	A	1481.2	18.9	4
35	B	1495.7	21.5	5
36	A	1779.3	298.3	72
37	B	2059.3	14.3	3
38	A	2061.0	7.9	1
39	B	3038.4	0.1	0
40	A	3044.9	6.0	1

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
41	A	3093.3	1.9	0
42	B	3100.0	12.3	2
43	B	3153.5	7.1	1
44	A	3154.2	3.8	0
45	B	3371.5	411.8	100
46	A	3376.9	212.7	51
47	B	3510.8	0.1	0
48	A	3511.4	3.0	0

File: l-AyAonAy-tv.log  
 Rechenmethode: **RBLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB-LYP): -347.796982591  
 E(RB-LYP)+ZPE: -347.661761  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=4.0099 Gesamt=4.0099  
 Framework: C2[C2(OC),X(C6H10)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.000000	1.592033
2	6	0.021616	-1.299279	2.389667
3	6	-0.021616	1.299279	2.389667
4	8	0.000000	0.000000	0.362107
5	6	0.000000	2.633269	-1.700265
6	6	0.005035	3.652484	-2.352733
7	1	-0.004333	1.732968	-1.113884
8	1	0.009350	4.548412	-2.934539
9	6	-0.005035	-3.652484	-2.352733
10	6	0.000000	-2.633269	-1.700265
11	1	-0.009350	-4.548412	-2.934539
12	1	0.004333	-1.732968	-1.113884
13	1	-0.739514	-1.284937	3.184344
14	1	-0.136857	-2.160129	1.731366
15	1	0.999350	-1.402439	2.888171
16	1	0.136857	2.160129	1.731366
17	1	0.739514	1.284937	3.184344
18	1	-0.999350	1.402439	2.888171

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A	15.0	0.1	0
2	A	15.9	0.0	0
3	B	25.4	4.0	1
4	B	26.7	4.6	1
5	A	75.7	0.8	0
6	A	81.1	0.1	0
7	B	85.3	3.3	0
8	A	103.2	0.0	0
9	B	112.2	0.1	0
10	B	122.8	0.6	0
11	A	122.9	0.0	0
12	B	134.6	0.0	0
13	A	376.9	3.5	1
14	B	476.5	0.3	0
15	B	525.1	14.7	4
16	A	611.5	0.0	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
17	B	614.7	24.2	7
18	B	620.7	9.6	2
19	A	624.2	10.9	3
20	A	755.5	2.6	0
21	B	790.6	33.7	9
22	A	791.8	0.0	0
23	B	802.8	171.3	50
24	A	804.2	165.5	48
25	A	862.0	0.2	0
26	B	867.4	11.7	3
27	A	1054.8	0.2	0
28	B	1081.6	3.4	1
29	B	1196.8	85.2	25
30	B	1346.9	44.9	13
31	A	1349.9	30.2	8
32	A	1426.0	16.2	4
33	B	1426.6	0.5	0
34	A	1437.2	21.2	6
35	B	1450.6	20.5	6
36	A	1678.8	273.8	80
37	B	1985.3	12.3	3
38	A	1986.8	9.2	2
39	B	2951.7	0.3	0
40	A	2958.4	6.8	1
41	A	3002.1	2.6	0
42	B	3008.3	13.7	4
43	B	3066.2	9.5	2
44	A	3066.9	5.4	1
45	B	3291.2	339.7	100
46	A	3296.3	247.2	72
47	B	3423.6	0.0	0
48	A	3424.3	2.9	0

File: mp-AyAonAy-tv-cl-3.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -345.703224558  
 E(MP2): -346.8941387  
 E(MP2)+ZPE: -346.753762  
 Dipolmomente: X=-0.0952 Y=4.1781 Z=0.8198 Gesamt=4.2588  
 Framework: Cl[X(C7H10O)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-0.014781	1.284573	-0.087492
2	6	1.252872	2.083051	0.118199
3	6	-1.317593	2.032928	0.085008
4	8	0.011716	0.096827	-0.383687
5	6	-2.834174	-1.495795	-0.035630
6	6	-3.974809	-1.881765	0.146179
7	1	-1.838887	-1.132707	-0.186154
8	1	-4.968764	-2.232393	0.298679
9	6	4.017153	-1.847307	0.141194
10	6	2.878673	-1.456092	-0.042914
11	1	5.009492	-2.201781	0.295300

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
12	1	1.884664	-1.089532	-0.194397
13	1	1.184893	2.675062	1.035802
14	1	2.121406	1.425226	0.155161
15	1	1.364740	2.785924	-0.714853
16	1	-2.155007	1.438331	-0.280424
17	1	-1.276068	2.993575	-0.436757
18	1	-1.464236	2.246128	1.149867

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	4.1	0.4	0
2	18.0	0.7	0
3	25.2	3.8	0
4	36.7	3.4	0
5	85.1	0.9	0
6	94.2	0.1	0
7	109.2	0.6	0
8	110.9	1.2	0
9	118.2	1.5	0
10	133.5	0.1	0
11	141.4	1.4	0
12	146.7	0.3	0
13	386.9	2.3	0
14	483.2	0.5	0
15	546.5	18.8	4
16	616.3	1.9	0
17	616.8	22.4	5
18	620.7	12.0	3
19	624.7	14.2	3
20	811.1	0.4	0
21	831.6	20.9	5
22	838.8	185.7	46
23	858.8	6.6	1
24	875.3	140.9	35
25	895.1	0.7	0
26	920.3	4.0	0
27	1094.3	0.1	0
28	1120.4	1.9	0
29	1268.8	66.8	16
30	1402.7	20.6	5
31	1411.9	58.1	14
32	1481.8	15.9	3
33	1482.8	0.6	0
34	1492.5	13.1	3
35	1505.1	21.3	5
36	1759.3	174.0	43
37	1951.5	7.9	1
38	1952.2	3.7	0
39	3073.7	0.0	0
40	3078.0	5.7	1
41	3155.2	1.7	0
42	3159.9	8.6	2
43	3204.7	4.0	0
44	3205.3	2.2	0

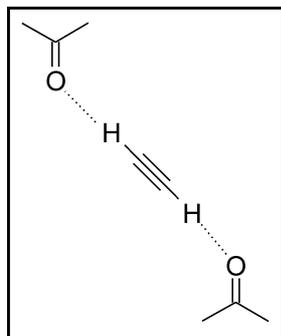
Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
45	3407.7	397.9	100
46	3412.0	143.5	36
47	3524.2	0.4	0
48	3524.8	3.1	0

File: h-AyAonAy-tv.log  
 Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -345.711229934  
 E(RHF)+ZPE. -345.561993  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=4.1370 Gesamt=4.1370  
 Framework: C2[C2(OC),X(C6H10)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.000000	1.600458
2	6	-0.003912	-1.286194	2.391746
3	6	0.003912	1.286194	2.391746
4	8	0.000000	0.000000	0.407393
5	6	0.000000	2.633381	-1.733149
6	6	0.004313	3.645291	-2.349120
7	1	-0.003714	1.730780	-1.177898
8	1	0.008080	4.544649	-2.901843
9	6	-0.004313	-3.645291	-2.349120
10	6	0.000000	-2.633381	-1.733149
11	1	-0.008080	-4.544649	-2.901843
12	1	0.003714	-1.730780	-1.177898
13	1	-0.787859	-1.266375	3.142743
14	1	-0.142050	-2.133367	1.734653
15	1	0.943832	-1.385866	2.914541
16	1	0.142050	2.133367	1.734653
17	1	0.787859	1.266375	3.142743
18	1	-0.943832	1.385866	2.914541

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A	10.5	0.0	0
2	A	14.7	0.1	0
3	B	26.3	3.9	0
4	B	27.1	6.5	1
5	A	61.9	0.0	0
6	A	75.1	0.5	0
7	B	85.4	2.8	0
8	A	107.2	0.0	0
9	B	116.6	0.1	0
10	B	122.4	0.8	0
11	A	124.6	0.0	0
12	B	142.2	0.5	0
13	A	406.7	3.3	0
14	B	531.4	2.3	0
15	B	581.1	27.2	6
16	B	828.3	15.6	4
17	A	828.4	31.8	8
18	A	829.5	0.1	0
19	B	830.6	57.9	14

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
20	A	844.3	0.0	0
21	B	920.4	39.6	10
22	A	921.7	0.1	0
23	A	929.1	173.8	44
24	B	932.5	177.3	45
25	A	964.1	0.5	0
26	B	978.2	3.6	0
27	A	1179.8	1.7	0
28	B	1225.3	3.7	0
29	B	1346.5	74.2	19
30	A	1520.4	11.7	3
31	B	1532.2	49.7	12
32	B	1579.0	0.2	0
33	A	1581.8	16.5	4
34	A	1589.3	14.9	3
35	B	1606.1	20.0	5
36	A	1963.8	389.9	100
37	B	2194.9	8.3	2
38	A	2196.5	4.9	1
39	B	3168.8	1.3	0
40	A	3176.2	10.1	2
41	A	3225.7	1.7	0
42	B	3234.0	27.7	7
43	B	3285.0	14.4	3
44	A	3286.5	11.3	2
45	B	3528.5	289.3	74
46	A	3532.3	169.8	43
47	B	3656.7	0.4	0
48	A	3657.6	3.9	0

Trimer Acetylen/Aceton 1:2 Z-Form **8c**

File: b-AonAyAon-tz-c2.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -463.801728765  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -463.606109  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.3898 Gesamt=0.3898  
 Framework: C2[X(C8H14O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	8	-0.679252	3.835527	-0.059398
2	6	0.177737	4.692440	0.012389
3	6	1.653312	4.348863	0.019002
4	6	-0.181089	6.162028	0.099449

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
5	1	1.794238	3.271512	0.092275
6	1	-1.251472	6.296436	-0.049877
7	1	2.114304	4.710351	-0.906561
8	1	2.164409	4.851094	0.845768
9	1	0.377987	6.743584	-0.639600
10	1	0.098217	6.547647	1.085873
11	1	-0.480658	1.599602	-0.105272
12	6	-0.177737	0.574325	-0.105410
13	6	0.177737	-0.574325	-0.105410
14	1	0.480658	-1.599602	-0.105272
15	8	0.679252	-3.835527	-0.059398
16	6	-0.177737	-4.692440	0.012389
17	6	-1.653312	-4.348863	0.019002
18	6	0.181089	-6.162028	0.099449
19	1	-1.794238	-3.271512	0.092275
20	1	1.251472	-6.296436	-0.049877
21	1	-2.114304	-4.710351	-0.906561
22	1	-2.164409	-4.851094	0.845768
23	1	-0.377987	-6.743584	-0.639600
24	1	-0.098217	-6.547647	1.085873

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A	8.3	9.8	1
2	A	15.9	0.0	0
3	B	17.7	3.5	0
4	B	18.3	3.1	0
5	A	21.2	0.1	0
6	A	54.4	4.5	0
7	B	58.8	2.0	0
8	B	60.6	0.2	0
9	A	60.8	0.2	0
10	A	66.0	0.0	0
11	B	115.2	7.4	1
12	B	120.3	0.3	0
13	A	122.7	0.1	0
14	B	164.8	0.0	0
15	A	168.4	0.0	0
16	B	383.2	5.7	1
17	A	383.3	0.0	0
18	A	490.4	0.7	0
19	B	490.4	0.3	0
20	B	539.4	32.3	6
21	A	539.4	0.0	0
22	B	754.0	0.1	0
23	A	757.1	0.0	0
24	B	786.1	3.3	0
25	A	786.1	0.0	0
26	A	862.3	92.5	17
27	B	864.7	133.4	24
28	B	886.3	0.4	0
29	A	886.9	2.3	0
30	A	895.3	0.4	0
31	B	895.3	15.4	2

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
32	A	1084.4	0.0	0
33	B	1084.4	0.1	0
34	B	1116.6	0.3	0
35	A	1116.7	6.4	1
36	B	1238.4	156.7	29
37	A	1238.5	0.3	0
38	B	1388.2	59.9	11
39	A	1388.2	0.6	0
40	B	1390.9	104.9	19
41	A	1390.9	1.0	0
42	B	1461.0	2.1	0
43	A	1461.1	0.4	0
44	B	1464.4	19.6	3
45	A	1464.4	0.0	0
46	B	1471.5	43.0	8
47	A	1471.5	0.3	0
48	B	1486.9	0.3	0
49	A	1487.0	43.9	8
50	B	1777.2	523.0	97
51	A	1778.2	1.5	0
52	A	2037.0	0.0	0
53	B	3025.1	0.9	0
54	A	3025.1	0.1	0
55	B	3031.7	15.9	2
56	A	3031.7	0.1	0
57	B	3080.4	2.7	0
58	A	3080.4	0.1	0
59	B	3087.0	0.5	0
60	A	3087.0	31.9	5
61	A	3140.7	0.0	0
62	B	3140.8	19.4	3
63	B	3142.4	10.1	1
64	A	3142.4	0.0	0
65	B	3333.1	535.6	100
66	A	3447.7	0.1	0

File: bp-AonAyAon-tz-c2.log  
 Rechenmethode: **B3LYP/cc-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -463.839226567  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -463.643616  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.3085 Gesamt=0.3085  
 Framework: C2[X(C8H14O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	8	0.759459	3.824934	-0.050315
2	6	-0.121443	4.655029	0.009213
3	6	-1.582773	4.270899	0.059316
4	6	0.194122	6.134311	0.036099
5	1	-1.693207	3.190392	0.083078
6	1	1.266180	6.288267	-0.050937
7	1	-2.060885	4.711179	0.936957
8	1	-2.101219	4.671485	-0.814985
9	1	-0.165285	6.575798	0.968542

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
10	1	-0.322467	6.649585	-0.776441
11	1	0.526244	1.581631	-0.081339
12	6	0.194122	0.567182	-0.081687
13	6	-0.194122	-0.567182	-0.081687
14	1	-0.526244	-1.581631	-0.081339
15	8	-0.759459	-3.824934	-0.050315
16	6	0.121443	-4.655029	0.009213
17	6	1.582773	-4.270899	0.059316
18	6	-0.194122	-6.134311	0.036099
19	1	1.693207	-3.190392	0.083078
20	1	-1.266180	-6.288267	-0.050937
21	1	2.060885	-4.711179	0.936957
22	1	2.101219	-4.671485	-0.814985
23	1	0.165285	-6.575798	0.968542
24	1	0.322467	-6.649585	-0.776441

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A	6.7	8.7	1
2	B	19.0	5.4	1
3	A	20.6	0.2	0
4	B	22.9	0.2	0
5	A	24.3	0.1	0
6	A	35.6	0.0	0
7	B	35.7	0.1	0
8	A	54.3	3.9	0
9	B	62.8	2.6	0
10	A	66.6	0.0	0
11	B	112.5	8.1	1
12	B	129.6	0.0	0
13	A	133.4	0.0	0
14	B	158.0	0.0	0
15	A	166.1	0.0	0
16	B	384.5	5.9	1
17	A	384.6	0.0	0
18	A	492.7	0.6	0
19	B	492.7	0.1	0
20	B	540.0	33.4	6
21	A	540.0	0.0	0
22	B	725.8	0.0	0
23	A	750.0	0.0	0
24	B	786.3	3.5	0
25	A	786.4	0.0	0
26	A	851.7	69.4	13
27	B	858.1	124.1	23
28	B	888.3	0.7	0
29	A	888.7	0.7	0
30	B	892.9	16.0	3
31	A	892.9	0.0	0
32	A	1087.9	0.0	0
33	B	1087.9	0.2	0
34	B	1122.1	0.1	0
35	A	1122.2	5.8	1
36	B	1240.4	153.9	29

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
37	A	1240.5	0.0	0
38	B	1389.6	70.1	13
39	A	1389.6	0.1	0
40	B	1394.1	80.1	15
41	A	1394.1	0.0	0
42	B	1461.2	2.4	0
43	A	1461.3	0.1	0
44	B	1466.4	1.5	0
45	A	1466.5	0.0	0
46	B	1471.9	50.9	9
47	A	1471.9	0.2	0
48	B	1488.8	0.1	0
49	A	1488.9	35.8	6
50	B	1782.7	460.9	87
51	A	1783.6	0.9	0
52	A	2047.1	0.0	0
53	B	3027.9	0.6	0
54	A	3027.9	0.0	0
55	B	3034.6	17.0	3
56	A	3034.6	0.0	0
57	B	3079.7	0.4	0
58	A	3079.7	0.1	0
59	B	3086.8	0.1	0
60	A	3086.8	32.1	6
61	A	3141.1	0.0	0
62	B	3141.2	18.8	3
63	B	3143.8	8.4	1
64	A	3143.8	0.0	0
65	B	3328.8	526.5	100
66	A	3444.2	0.1	0

File: m-AonAyAon-tz-c2.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -463.539407979  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -463.342681  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.4792 Gesamt=0.4792  
 Framework: C2[X(C8H14O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	8	0.769929	3.780413	-0.072433
2	6	-0.110571	4.609269	0.014599
3	6	-1.573503	4.220764	0.048019
4	6	0.204244	6.088158	0.095037
5	1	-1.680879	3.139466	0.103434
6	1	1.268430	6.253144	-0.060034
7	1	-2.076389	4.690817	0.897160
8	1	-2.067440	4.587260	-0.856949
9	1	-0.082769	6.469577	1.079622
10	1	-0.374536	6.647626	-0.644400
11	1	0.552322	1.574553	-0.126241
12	6	0.204244	0.564733	-0.126510
13	6	-0.204244	-0.564733	-0.126510
14	1	-0.552322	-1.574553	-0.126241

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
15	8	-0.769929	-3.780413	-0.072433
16	6	0.110571	-4.609269	0.014599
17	6	1.573503	-4.220764	0.048019
18	6	-0.204244	-6.088158	0.095037
19	1	1.680879	-3.139466	0.103434
20	1	-1.268430	-6.253144	-0.060034
21	1	2.076389	-4.690817	0.897160
22	1	2.067440	-4.587260	-0.856949
23	1	0.082769	-6.469577	1.079622
24	1	0.374536	-6.647626	-0.644400

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A	9.7	9.5	1
2	B	17.1	4.6	0
3	A	17.5	0.1	0
4	B	19.5	2.0	0
5	A	23.8	0.1	0
6	A	54.3	3.1	0
7	B	56.5	0.1	0
8	A	58.2	1.9	0
9	B	65.8	3.0	0
10	A	72.1	0.0	0
11	B	124.4	2.3	0
12	B	125.5	5.4	0
13	A	127.3	0.1	0
14	B	167.9	0.0	0
15	A	175.1	0.0	0
16	B	386.0	5.7	1
17	A	386.1	0.0	0
18	A	493.6	0.9	0
19	B	493.6	0.3	0
20	B	543.2	34.8	6
21	A	543.2	0.0	0
22	B	766.2	0.1	0
23	A	770.1	0.0	0
24	B	791.7	2.9	0
25	A	791.8	0.0	0
26	A	871.4	90.5	16
27	B	874.3	143.9	26
28	B	892.5	0.4	0
29	A	893.2	3.3	0
30	B	901.6	14.2	2
31	A	901.6	0.3	0
32	A	1092.4	0.0	0
33	B	1092.4	0.2	0
34	B	1125.1	0.2	0
35	A	1125.1	5.9	1
36	B	1247.1	155.9	28
37	A	1247.2	0.1	0
38	B	1397.6	64.7	11
39	A	1397.7	0.7	0
40	B	1401.4	98.2	17
41	A	1401.4	0.4	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
42	B	1469.1	2.7	0
43	A	1469.2	0.3	0
44	B	1472.8	15.1	2
45	A	1472.8	0.0	0
46	B	1479.7	45.4	8
47	A	1479.7	0.4	0
48	B	1495.5	0.2	0
49	A	1495.6	43.8	8
50	B	1790.2	524.4	96
51	A	1791.1	2.3	0
52	A	2047.4	0.0	0
53	B	3036.8	0.9	0
54	A	3036.8	0.1	0
55	B	3043.5	17.0	3
56	A	3043.5	0.1	0
57	B	3090.8	2.2	0
58	A	3090.8	0.1	0
59	B	3097.7	0.4	0
60	A	3097.7	33.3	6
61	A	3151.5	0.0	0
62	B	3151.5	19.3	3
63	B	3152.6	8.7	1
64	A	3152.6	0.0	0
65	B	3343.2	545.7	100
66	A	3459.0	0.1	0

File: l-AonAyAon-tz-c2.log  
 Rechenmethode: **RBLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB-LYP): -463.611207386  
 E(RB-LYP)+ZPE: -463.421374  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.2755 Gesamt=0.2755  
 Framework: C2[X(C8H14O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	8	-0.658600	3.900523	-0.043219
2	6	0.160450	4.812113	0.010297
3	6	1.664472	4.545958	-0.002937
4	6	-0.278914	6.272776	0.092785
5	1	1.865377	3.474225	0.100718
6	1	-1.361895	6.350875	-0.052762
7	1	2.089944	4.901511	-0.955668
8	1	2.170280	5.104933	0.799078
9	1	0.248877	6.885840	-0.653749
10	1	-0.015469	6.679744	1.082618
11	1	-0.431962	1.623571	-0.082080
12	6	-0.160450	0.584224	-0.082212
13	6	0.160450	-0.584224	-0.082212
14	1	0.431962	-1.623571	-0.082080
15	8	0.658600	-3.900523	-0.043219
16	6	-0.160450	-4.812113	0.010297
17	6	-1.664472	-4.545958	-0.002937
18	6	0.278914	-6.272776	0.092785

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
19	1	-1.865377	-3.474225	0.100718
20	1	1.361895	-6.350875	-0.052762
21	1	-2.089944	-4.901511	-0.955668
22	1	-2.170280	-5.104933	0.799078
23	1	-0.248877	-6.885840	-0.653749
24	1	0.015469	-6.679744	1.082618

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A	8.6	8.8	1
2	B	9.6	6.3	1
3	A	15.7	0.5	0
4	A	17.3	0.1	0
5	B	17.7	0.1	0
6	A	52.3	4.3	0
7	B	53.3	1.5	0
8	A	57.4	0.1	0
9	B	70.7	0.0	0
10	A	70.8	0.0	0
11	B	103.7	7.0	1
12	B	115.4	0.0	0
13	A	117.6	0.0	0
14	B	156.6	0.0	0
15	A	157.6	0.0	0
16	B	373.8	5.4	1
17	A	373.9	0.0	0
18	A	475.3	0.3	0
19	B	475.3	0.3	0
20	A	521.1	0.0	0
21	B	521.1	25.4	4
22	B	687.4	0.0	0
23	A	691.8	0.0	0
24	B	750.8	5.7	1
25	A	750.9	0.0	0
26	A	826.5	91.5	17
27	B	827.8	122.0	22
28	B	860.2	22.1	4
29	A	860.2	1.0	0
30	B	860.8	4.7	0
31	A	861.1	0.6	0
32	A	1052.7	0.0	0
33	B	1052.7	0.1	0
34	B	1080.3	0.3	0
35	A	1080.3	4.9	0
36	B	1189.5	171.1	31
37	A	1189.5	0.5	0
38	B	1344.0	89.8	16
39	A	1344.0	1.7	0
40	B	1347.7	53.3	9
41	A	1347.7	0.0	0
42	B	1425.6	2.1	0
43	A	1425.7	0.3	0
44	B	1427.5	25.6	4
45	A	1427.5	0.0	0

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
46	B	1435.9	42.2	7
47	A	1435.9	0.2	0
48	B	1450.3	0.1	0
49	A	1450.4	41.2	7
50	B	1689.1	484.8	90
51	A	1690.3	0.7	0
52	A	1974.5	0.0	0
53	B	2949.8	1.7	0
54	A	2949.8	0.3	0
55	B	2956.7	18.3	3
56	A	2956.7	0.0	0
57	B	2999.9	4.4	0
58	A	3000.0	0.0	0
59	B	3006.2	0.6	0
60	A	3006.2	35.8	6
61	A	3062.6	0.0	0
62	B	3062.6	22.1	4
63	B	3065.3	14.4	2
64	A	3065.3	0.0	0
65	B	3267.0	535.4	100
66	A	3375.8	0.1	0

File: mp-AonAyAon-tz-c2.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -460.877876719  
 E(MP2): -462.4362263  
 E(MP2)+ZPE: -462.238355  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.7872 Gesamt=0.7872  
 Framework: C2[X(C8H14O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	8	-0.949176	3.773936	-0.105289
2	6	0.027380	4.498170	0.017550
3	6	1.354674	3.980752	0.531256
4	6	-0.027380	5.970292	-0.331442
5	1	1.353302	2.891366	0.573071
6	1	-1.057857	6.274564	-0.516147
7	1	2.173892	4.334115	-0.102113
8	1	1.523655	4.382351	1.536638
9	1	0.571806	6.146215	-1.231587
10	1	0.408789	6.570863	0.472499
11	1	-0.651415	1.548181	-0.166712
12	6	-0.248527	0.556777	-0.171254
13	6	0.248527	-0.556777	-0.171254
14	1	0.651415	-1.548181	-0.166712
15	8	0.949176	-3.773936	-0.105289
16	6	-0.027380	-4.498170	0.017550
17	6	-1.354674	-3.980752	0.531256
18	6	0.027380	-5.970292	-0.331442
19	1	-1.353302	-2.891366	0.573071
20	1	1.057857	-6.274564	-0.516147
21	1	-2.173892	-4.334115	-0.102113
22	1	-1.523655	-4.382351	1.536638

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
23	1	-0.571806	-6.146215	-1.231587
24	1	-0.408789	-6.570863	0.472499

Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	A	8.4	7.7	1
2	B	11.3	5.7	1
3	A	13.3	0.3	0
4	B	16.9	0.2	0
5	A	27.0	0.9	0
6	A	51.5	2.7	0
7	A	75.2	0.3	0
8	B	82.8	4.4	0
9	B	94.5	0.1	0
10	A	94.9	0.0	0
11	B	120.2	0.8	0
12	A	124.5	0.2	0
13	B	127.6	5.7	1
14	B	159.8	0.1	0
15	A	169.6	0.0	0
16	B	383.3	3.7	0
17	A	383.4	0.1	0
18	B	480.4	0.3	0
19	A	480.5	1.2	0
20	A	540.4	2.2	0
21	B	540.4	29.2	6
22	A	660.1	0.1	0
23	B	684.3	0.5	0
24	A	808.2	0.0	0
25	B	808.3	2.5	0
26	B	853.2	134.1	30
27	A	875.2	79.9	17
28	B	893.4	0.0	0
29	A	894.1	3.5	0
30	B	915.5	7.5	1
31	A	915.5	2.3	0
32	A	1092.3	0.0	0
33	B	1092.4	0.2	0
34	B	1118.6	0.0	0
35	A	1118.8	2.3	0
36	B	1261.9	116.0	26
37	A	1262.2	13.3	2
38	B	1399.8	43.4	9
39	A	1399.9	0.1	0
40	B	1408.8	91.6	20
41	A	1408.8	23.9	5
42	B	1482.2	2.1	0
43	A	1482.3	0.2	0
44	B	1482.7	21.8	4
45	A	1482.9	0.6	0
46	B	1491.6	29.2	6
47	A	1491.7	0.2	0
48	B	1505.3	7.1	1

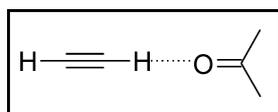
Mode	Symmetrie	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
49	A	1505.5	33.2	7
50	B	1762.9	311.2	69
51	A	1763.2	2.7	0
52	A	1941.2	0.0	0
53	B	3072.9	0.7	0
54	A	3072.9	0.6	0
55	B	3077.3	15.0	3
56	A	3077.3	0.2	0
57	B	3154.7	2.8	0
58	A	3154.7	0.0	0
59	B	3159.4	4.3	0
60	A	3159.5	18.7	4
61	A	3202.7	1.5	0
62	B	3202.7	12.0	2
63	A	3204.4	0.2	0
64	B	3204.4	3.9	0
65	B	3383.5	445.9	100
66	A	3480.9	0.4	0

File: h-AonAyAon-tz.log  
 Rechenmethode: **RHF/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -460.885688777  
 E(RHF)+ZPE: -460.677202  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=0.0140 Gesamt=0.0140  
 Framework: Cl[X(C8H14O2)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	-0.562960	-0.186580	-0.009049
2	6	0.562957	0.186575	-0.009052
3	1	-1.570849	-0.514102	-0.009053
4	1	1.570846	0.514096	-0.009063
5	8	-3.900339	-0.789819	-0.000700
6	6	-4.850276	-0.072655	0.001633
7	6	-6.257208	-0.625466	0.014574
8	6	-4.711175	1.432463	-0.008220
9	8	3.900336	0.789816	-0.000717
10	6	4.850276	0.072656	0.001621
11	6	6.257206	0.625472	0.014581
12	6	4.711181	-1.432463	-0.008245
13	1	-5.270110	1.867366	0.815371
14	1	-3.669683	1.713043	0.065213
15	1	-5.129613	1.829324	-0.929447
16	1	-6.232465	-1.703592	-0.062138
17	1	-6.834095	-0.208656	-0.805979
18	1	-6.752535	-0.337716	0.938205
19	1	6.232459	1.703599	-0.062117
20	1	6.834101	0.208676	-0.805974
21	1	6.752527	0.337712	0.938212
22	1	5.270103	-1.867369	0.815352
23	1	3.669689	-1.713048	0.065167
24	1	5.129637	-1.829316	-0.929468

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	5.0	6.2	0
2	7.8	7.3	1
3	8.4	4.6	0
4	13.1	0.0	0
5	14.8	0.0	0
6	38.4	0.1	0
7	38.5	0.0	0
8	52.6	6.3	0
9	53.1	2.3	0
10	55.5	0.0	0
11	103.2	5.2	0
12	133.5	0.0	0
13	136.3	0.7	0
14	162.8	0.0	0
15	169.1	0.0	0
16	404.3	5.4	0
17	404.3	0.0	0
18	530.5	4.5	0
19	530.5	0.2	0
20	578.5	49.0	6
21	578.6	0.0	0
22	842.9	0.0	0
23	842.9	0.0	0
24	879.9	0.0	0
25	882.5	0.0	0
26	942.4	114.9	16
27	942.9	136.1	19
28	962.9	0.3	0
29	963.2	1.6	0
30	972.7	0.1	0
31	972.7	7.8	1
32	1178.5	0.0	0
33	1178.5	1.9	0
34	1224.6	0.1	0
35	1224.7	5.7	0
36	1341.5	144.1	20
37	1341.5	0.0	0
38	1517.9	21.8	3
39	1517.9	0.0	0
40	1529.5	0.5	0
41	1529.5	103.1	14
42	1578.4	0.7	0
43	1578.5	0.1	0
44	1583.5	20.1	2
45	1583.5	0.0	0
46	1587.8	38.8	5
47	1587.8	0.0	0
48	1606.3	0.1	0
49	1606.4	41.2	5
50	1975.2	703.3	99
51	1976.5	0.0	0
52	2184.7	0.0	0
53	3166.7	4.2	0
54	3166.7	0.2	0

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
55	3174.5	25.6	3
56	3174.5	0.0	0
57	3222.3	1.3	0
58	3222.3	0.0	0
59	3231.1	0.0	0
60	3231.2	68.2	9
61	3282.2	0.0	0
62	3282.2	32.0	4
63	3284.1	25.1	3
64	3284.1	0.0	0
65	3507.4	392.3	55
66	3629.6	0.0	0

Dimer Acetylen/Aceton 1:1 linear **8d**

File: b-AyAon-dl-c2.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -270.579475742  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -270.468245  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=3.9517 Gesamt=3.9517  
 Framework: C2[C2(HCCHOC),X(C2H6)]  
 Imaginäre Freq.: **-18.7 cm<sup>-1</sup>**

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.000000	1.418962
2	6	0.000000	1.290587	2.212229
3	1	-0.130187	2.141872	1.545626
4	1	-0.790170	1.281298	2.968857
5	1	0.951048	1.390851	2.746210
6	6	0.000000	-1.290587	2.212229
7	1	0.790170	-1.281298	2.968857
8	1	-0.951048	-1.390851	2.746210
9	1	0.130187	-2.141872	1.545626
10	8	0.000000	0.000000	0.205447
11	1	0.000000	0.000000	-1.990811
12	6	0.000000	0.000000	-3.058966
13	6	0.000000	0.000000	-4.259733
14	1	0.000000	0.000000	-5.322479

File: bp-AyAon-dl.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -270.601257146  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -270.490399  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=3.7580 Gesamt=3.7580  
 Framework: C2[C2(HCCHOC),X(C2H6)]  
 Imaginäre Freq.: **-23.7 cm<sup>-1</sup>**

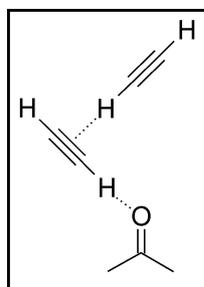
Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.000000	1.420088
2	6	0.000000	1.288150	2.212076
3	1	-0.067582	2.139424	1.540297
4	1	-0.832467	1.303731	2.918519
5	1	0.916373	1.360598	2.802620
6	6	0.000000	-1.288150	2.212076
7	1	0.832467	-1.303731	2.918519
8	1	-0.916373	-1.360598	2.802620
9	1	0.067582	-2.139424	1.540297
10	8	0.000000	0.000000	0.209042
11	1	0.000000	0.000000	-1.996960
12	6	0.000000	0.000000	-3.063193
13	6	0.000000	0.000000	-4.260470
14	1	0.000000	0.000000	-5.321711

File: m-AyAon-dl.log  
 Rechenmethode: **RmpWLLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -270.424368689  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -270.312534  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=3.9909 Gesamt=3.9909  
 Framework: C2[C2(HCCHOC),X(C2H6)]  
 Imaginäre Freq.: **-18.0 cm<sup>-1</sup>**

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.000000	1.407977
2	6	0.000000	1.289596	2.200609
3	1	-0.126482	2.139920	1.533799
4	1	-0.792451	1.280878	2.953317
5	1	0.948504	1.387401	2.737297
6	6	0.000000	-1.289596	2.200609
7	1	0.792451	-1.280878	2.953317
8	1	-0.948504	-1.387401	2.737297
9	1	0.126482	-2.139920	1.533799
10	8	0.000000	0.000000	0.196236
11	1	0.000000	0.000000	-1.967477
12	6	0.000000	0.000000	-3.034583
13	6	0.000000	0.000000	-4.233908
14	1	0.000000	0.000000	-5.295468

File: mp-AyAon-dl.log  
 Rechenmethode: **RMP2(FC)/6-311++G(d,p)**  
 E(RHF): -268.860390224  
 E(MP2): -269.7743091  
 E(MP2)+ZPE: -269.662532  
 Dipolmomente: X=0.0000 Y=0.0000 Z=4.3695 Gesamt=4.3695  
 Framework: C2[C2(HCCHOC),X(C2H6)]  
 Imaginäre Freq.: **-5.9 cm<sup>-1</sup>, -20.3 cm<sup>-1</sup>**

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000	0.000000	1.431842
2	6	0.000000	1.286309	2.229711
3	1	-0.143829	2.139592	1.566726
4	1	-0.784780	1.261684	2.991915
5	1	0.957798	1.385730	2.751848
6	6	0.000000	-1.286309	2.229711
7	1	0.784780	-1.261684	2.991915
8	1	-0.957798	-1.385730	2.751848
9	1	0.143829	-2.139592	1.566726
10	8	0.000000	0.000000	0.211117
11	1	0.000000	0.000000	-2.012466
12	6	0.000000	0.000000	-3.081427
13	6	0.000000	0.000000	-4.298828
14	1	0.000000	0.000000	-5.363505

Acetylen-Dimer kopfverknüpft an Aceton **8e**

File: b-AyAonAy-pre1.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP): -347.938325942  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -347.799218  
 Dipolmomente: X=-4.1725 Y=-0.3575 Z=0.0217 Gesamt=4.1878  
 Framework: C1[X(C7H10)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.179282	1.673396	-0.006376
2	6	2.126305	2.412409	-0.004110
3	1	0.331238	1.020597	-0.008391
4	1	2.962519	3.068999	-0.002124
5	1	3.464365	-0.120867	0.000358
6	6	4.276371	-0.811679	0.002996
7	6	5.193053	-1.586207	0.005993
8	1	6.003907	-2.273402	0.008626
9	8	-1.402007	-0.269012	-0.009304
10	6	-2.613203	-0.355181	-0.000966
11	6	-3.499561	0.872864	0.016660
12	6	-3.308262	-1.700423	-0.007655
13	1	-4.252498	0.796605	0.806634
14	1	-4.040644	0.944531	-0.932961
15	1	-2.900452	1.771427	0.157301
16	1	-4.077905	-1.736709	-0.784278
17	1	-3.815910	-1.852480	0.950981
18	1	-2.582484	-2.497676	-0.160970

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	8.9	1.2	0
2	14.6	0.9	0
3	20.2	5.7	1
4	21.8	2.5	0
5	57.4	0.2	0
6	66.7	0.0	0
7	73.0	0.0	0
8	76.0	0.2	0
9	102.9	3.4	0
10	118.0	0.0	0
11	131.8	0.1	0
12	134.9	0.6	0
13	383.1	3.2	0
14	490.6	0.5	0
15	537.2	14.7	3
16	665.2	8.4	2
17	672.8	8.1	2
18	685.5	14.2	3
19	697.3	22.8	5
20	787.7	1.4	0
21	796.2	79.0	20
22	800.6	80.4	21
23	845.2	98.7	25
24	846.6	94.4	24
25	885.1	0.6	0
26	894.7	7.9	2
27	1084.6	0.1	0
28	1116.8	3.5	0
29	1238.9	71.8	18
30	1387.9	27.8	7
31	1390.5	57.6	15
32	1460.8	1.3	0
33	1463.2	11.1	2
34	1471.4	25.4	6
35	1486.8	23.0	6
36	1777.5	298.7	78
37	2046.8	19.5	5
38	2055.9	3.3	0
39	3025.9	0.6	0
40	3032.4	6.2	1
41	3081.6	1.4	0
42	3088.1	15.0	3
43	3141.0	10.2	2
44	3142.5	7.1	1
45	3354.8	381.1	99
46	3396.7	184.1	48
47	3494.1	2.1	0
48	3508.7	0.9	0

File: bp-AyAonAy-pre1.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -347.967263525  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -347.828346  
 Dipolmomente: X=-3.8950 Y=-0.1031 Z=0.8681 Gesamt=3.9919  
 Framework: C1[X(C7H10O)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.143354	1.617259	-0.272054
2	6	2.068136	2.374715	-0.192596
3	1	0.314802	0.945412	-0.341565
4	1	2.885637	3.048535	-0.122948
5	1	3.422879	-0.124611	-0.001894
6	6	4.226427	-0.813574	0.112636
7	6	5.132039	-1.585288	0.241358
8	1	5.934299	-2.270801	0.354967
9	8	-1.417262	-0.358676	-0.386397
10	6	-2.575519	-0.347740	-0.029024
11	6	-3.201624	0.868458	0.614131
12	6	-3.463437	-1.557990	-0.206567
13	1	-3.504484	0.631167	1.636723
14	1	-4.106664	1.160729	0.077807
15	1	-2.497064	1.695449	0.628125
16	1	-4.293205	-1.315833	-0.874740
17	1	-3.903437	-1.852564	0.748450
18	1	-2.890931	-2.383111	-0.621054

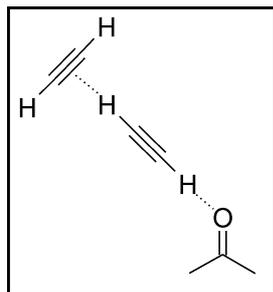
Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	6.9	1.9	0
2	17.7	2.0	0
3	20.0	2.6	0
4	25.8	2.0	0
5	36.3	0.4	0
6	57.8	0.3	0
7	65.8	0.1	0
8	75.0	0.2	0
9	102.1	4.1	1
10	115.8	0.0	0
11	132.2	0.6	0
12	139.1	0.2	0
13	384.4	3.1	0
14	493.5	0.3	0
15	538.9	15.3	4
16	656.2	6.0	1
17	664.6	7.1	1
18	673.7	12.2	3
19	685.9	19.5	5
20	785.8	63.4	16
21	787.8	2.2	0
22	795.1	68.7	17
23	831.4	83.5	21
24	836.2	88.7	23
25	888.0	0.5	0
26	892.6	8.0	2

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
27	1088.2	0.1	0
28	1122.3	3.2	0
29	1241.3	69.1	18
30	1390.3	32.4	8
31	1393.4	45.3	11
32	1460.9	1.1	0
33	1465.5	3.2	0
34	1471.6	27.4	7
35	1488.9	18.7	4
36	1782.6	259.8	68
37	2055.2	20.5	5
38	2065.6	3.2	0
39	3028.7	0.4	0
40	3035.5	6.1	1
41	3080.9	0.3	0
42	3088.1	14.4	3
43	3141.8	9.9	2
44	3143.1	6.4	1
45	3343.6	381.9	100
46	3389.9	182.7	47
47	3488.2	2.1	0
48	3503.7	0.9	0

File: m-AyAonAy-pre1.log  
 Rechenmethode: **RmPW1LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -347.736359387  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -347.596400  
 Dipolmomente: X=-4.2150 Y=-0.3058 Z=0.0236 Gesamt=4.2262  
 Framework: C1[X(C7H10O)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	6	1.179328	1.648483	-0.008139
2	6	2.123102	2.389325	-0.006620
3	1	0.334171	0.993472	-0.009515
4	1	2.956871	3.047181	-0.005322
5	1	3.415338	-0.102197	0.000687
6	6	4.219316	-0.800823	0.004197
7	6	5.126866	-1.583820	0.008186
8	1	5.929617	-2.278653	0.011692
9	8	-1.374893	-0.281744	-0.009956
10	6	-2.585452	-0.350320	-0.000818
11	6	-3.452885	0.889797	0.019993
12	6	-3.299460	-1.684245	-0.009853
13	1	-4.200960	0.824740	0.814116
14	1	-3.997788	0.967858	-0.925642
15	1	-2.840003	1.778461	0.156402
16	1	-4.063694	-1.709058	-0.790791
17	1	-3.814542	-1.827382	0.944898
18	1	-2.584755	-2.490863	-0.158548

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	9.2	1.4	0
2	15.0	2.0	0
3	20.5	3.9	0
4	21.6	3.2	0
5	64.6	0.2	0
6	69.9	0.0	0
7	76.8	0.1	0
8	82.0	0.2	0
9	110.5	3.5	0
10	121.4	0.0	0
11	135.0	0.1	0
12	139.0	0.8	0
13	385.4	3.3	0
14	493.2	0.6	0
15	540.7	15.5	3
16	676.3	9.7	2
17	684.8	9.3	2
18	696.1	15.2	3
19	708.5	24.7	6
20	793.3	1.1	0
21	804.9	77.9	19
22	810.1	79.0	19
23	855.4	98.0	24
24	856.5	93.6	23
25	891.6	0.8	0
26	901.6	7.5	1
27	1092.3	0.1	0
28	1124.9	3.3	0
29	1247.6	69.9	17
30	1397.6	24.4	6
31	1400.4	60.0	14
32	1469.0	1.2	0
33	1471.4	10.4	2
34	1479.6	26.1	6
35	1494.9	23.1	5
36	1790.8	306.4	76
37	2057.7	20.7	5
38	2066.8	3.8	0
39	3037.6	0.6	0
40	3044.2	6.1	1
41	3092.2	1.2	0
42	3099.0	15.3	3
43	3151.1	9.9	2
44	3153.3	7.2	1
45	3365.3	401.0	100
46	3407.8	194.1	48
47	3506.4	2.3	0
48	3521.4	1.0	0

Acetylen-Dimer stielverknüpft an Aceton **8f**

File: b-AyAonAy-pre2.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RB+HF-LYP) -347.937343565  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE -347.798416  
 Dipolmomente: X=-3.0882 Y=1.8576 Z=0.1383 Gesamt=3.6065  
 Framework: C1[X(C7H10O)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	8	-2.251200	-0.718438	-0.033917
2	6	-3.243897	-0.021191	0.011548
3	6	-4.631663	-0.614105	-0.120403
4	1	-5.092473	-0.263549	-1.050078
5	1	-4.575277	-1.701575	-0.133189
6	1	-5.275495	-0.280811	0.699037
7	6	-3.157205	1.479293	0.201832
8	1	-3.593008	1.750834	1.169217
9	1	-2.118988	1.806538	0.169657
10	1	-3.737667	2.000004	-0.565642
11	6	1.006970	-0.389883	-0.056995
12	6	2.193040	-0.199542	-0.074819
13	1	-0.049501	-0.554679	-0.041117
14	1	3.244858	-0.035750	-0.090405
15	6	6.187099	0.626506	-0.273654
16	6	6.127141	-0.412250	0.323295
17	1	6.243622	1.546991	-0.803037
18	1	6.074615	-1.333471	0.852077

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	5.4	0.8	0
2	13.2	0.4	0
3	16.0	2.0	0
4	22.8	3.0	0
5	31.4	1.7	0
6	40.6	0.5	0
7	56.4	0.1	0
8	60.0	0.2	0
9	98.8	3.6	0
10	123.8	0.0	0
11	136.2	0.0	0
12	142.8	0.4	0
13	383.4	2.9	0
14	490.5	0.4	0
15	538.5	15.3	3
16	652.1	0.0	0

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
17	662.8	0.2	0
18	707.4	5.3	1
19	716.4	4.8	1
20	773.9	94.6	23
21	779.1	128.0	31
22	787.0	1.3	0
23	843.4	96.2	23
24	846.7	86.2	20
25	885.7	0.6	0
26	894.1	7.8	1
27	1084.6	0.0	0
28	1117.0	3.4	0
29	1238.8	74.3	18
30	1388.0	27.0	6
31	1390.4	57.4	13
32	1460.6	1.5	0
33	1464.1	8.2	1
34	1471.3	25.7	6
35	1487.0	23.0	5
36	1778.6	276.5	67
37	2045.3	5.8	1
38	2061.1	0.4	0
39	3025.8	0.7	0
40	3032.4	6.7	1
41	3081.1	1.0	0
42	3087.8	15.8	3
43	3141.2	10.4	2
44	3142.2	6.4	1
45	3357.5	411.2	100
46	3416.9	96.3	23
47	3481.8	1.1	0
48	3520.0	0.1	0

File: bp-AyAonAy-pre2.log  
 Rechenmethode: **RB3LYP/CC-pVTZ**  
 E(RB+HF-LYP): -347.966389468  
 E(RB+HF-LYP)+ZPE: -347.827594  
 Dipolmomente: X=-2.5412 Y=2.1130 Z=0.3519 Gesamt=3.3236  
 Framework: C1[X(C7H100)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	8	-2.321113	-0.881323	-0.105740
2	6	-3.174062	-0.028822	0.015143
3	6	-4.642087	-0.387939	0.066840
4	1	-5.175945	0.093948	-0.755327
5	1	-4.764737	-1.465514	0.001475
6	1	-5.089988	-0.019670	0.992390
7	6	-2.828451	1.439118	0.122361
8	1	-3.184187	1.837529	1.075331
9	1	-1.754433	1.583856	0.045779
10	1	-3.333980	2.004870	-0.663206
11	6	0.934185	-0.465980	-0.183810
12	6	2.097999	-0.181798	-0.191165

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
13	1	-0.104970	-0.712438	-0.176023
14	1	3.132097	0.064904	-0.196156
15	6	6.135986	0.649715	-0.106677
16	6	5.937783	-0.447373	0.327442
17	1	6.315959	1.622770	-0.491631
18	1	5.760963	-1.421202	0.712473

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	8.0	1.1	0
2	8.9	0.4	0
3	16.6	0.8	0
4	23.5	0.9	0
5	26.7	1.1	0
6	33.3	1.6	0
7	41.8	0.8	0
8	62.1	0.4	0
9	99.0	4.4	1
10	121.7	0.1	0
11	136.7	0.0	0
12	141.0	0.1	0
13	384.3	2.8	0
14	492.8	0.3	0
15	540.0	16.5	4
16	656.3	0.1	0
17	663.0	0.3	0
18	682.8	4.2	1
19	708.2	4.5	1
20	769.1	85.1	21
21	773.3	120.5	30
22	787.0	1.7	0
23	832.1	74.6	19
24	839.5	83.8	21
25	888.9	0.2	0
26	893.2	8.1	2
27	1087.9	0.1	0
28	1122.3	3.0	0
29	1241.3	74.2	18
30	1390.6	30.2	7
31	1393.4	45.3	11
32	1461.1	1.1	0
33	1466.1	0.9	0
34	1471.7	26.9	6
35	1488.3	18.3	4
36	1783.1	234.1	59
37	2054.5	4.8	1
38	2069.9	0.9	0
39	3028.1	0.3	0
40	3034.9	7.2	1
41	3080.0	0.0	0
42	3087.3	15.4	3
43	3141.7	9.7	2
44	3143.0	5.2	1
45	3347.5	391.8	100

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
46	3411.6	93.7	23
47	3474.8	1.6	0
48	3515.3	0.1	0

File: m-AyAonAy-pre2.log  
 Rechenmethode: **RmPWLLYP/6-311++G(d,p)**  
 E(RmPW+HF-LYP): -347.735357468  
 E(RmPW+HF-LYP)+ZPE: -347.595557  
 Dipolmomente: X=-2.7124 Y=2.2596 Z=0.3714 Gesamt=3.5498  
 Framework: C1[X(C7H10O)]

Center Number	Atomic Number	Coordinates (Å)		
		X	Y	Z
1	8	-2.285367	-0.857429	-0.109804
2	6	-3.150122	-0.016610	0.013396
3	6	-4.616782	-0.389969	0.029269
4	1	-5.105667	0.013593	-0.862551
5	1	-4.727438	-1.472198	0.043242
6	1	-5.118718	0.050669	0.894504
7	6	-2.817947	1.453342	0.159261
8	1	-3.091783	1.789534	1.163936
9	1	-1.754213	1.620286	0.002614
10	1	-3.399200	2.052298	-0.546391
11	6	0.940895	-0.521127	-0.167091
12	6	2.113510	-0.265907	-0.168677
13	1	-0.105110	-0.740133	-0.164274
14	1	3.154208	-0.046254	-0.168709
15	6	6.023293	0.668111	-0.193639
16	6	5.920966	-0.377536	0.382123
17	1	6.118089	1.594870	-0.703941
18	1	5.829883	-1.305051	0.892150

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
1	13.3	1.1	0
2	15.6	2.0	0
3	18.5	0.3	0
4	23.6	2.1	0
5	34.4	1.8	0
6	48.8	0.5	0
7	57.5	0.1	0
8	65.3	0.3	0
9	110.2	4.0	0
10	120.9	0.0	0
11	142.0	0.2	0
12	149.7	0.3	0
13	385.2	2.8	0
14	493.3	0.6	0
15	542.8	17.0	4
16	664.2	0.0	0
17	675.4	0.2	0
18	719.1	5.1	1
19	730.5	5.0	1
20	780.9	95.2	22
21	786.5	130.2	30

---

Mode	Frequenz	abs. Int.	rel. Int.
22	792.1	1.3	0
23	854.8	98.7	23
24	857.8	89.2	21
25	892.6	0.8	0
26	902.2	7.3	1
27	1092.0	0.1	0
28	1124.9	3.2	0
29	1247.6	74.8	17
30	1397.9	26.6	6
31	1400.9	55.9	13
32	1469.1	1.4	0
33	1472.0	9.2	2
34	1479.6	23.4	5
35	1494.7	22.6	5
36	1790.9	269.8	63
37	2055.6	4.7	1
38	2072.3	0.4	0
39	3037.2	0.5	0
40	3044.0	6.7	1
41	3091.3	1.3	0
42	3098.3	16.2	3
43	3151.3	9.0	2
44	3152.7	6.9	1
45	3363.1	421.8	100
46	3428.8	100.1	23
47	3491.4	3.0	0
48	3532.5	0.1	0

---

## 10.2 Skripte

Die folgenden Skripte wurden von mir in der Programmiersprache PERL (Practical Extraction and Report Language)<sup>[195]</sup> geschrieben und dienen als Hilfsmittel für die grafische Darstellung.

Formatierungsbedingte Zeilenumbrüche sind durch `ý` gekennzeichnet,

### Grundlinienverschiebung: norm.pl

```
#!/usr/bin/perl

#####
#
# norm.pl : File das XY-Datenfiles an einer bestimmten Position auf
#          gleiche Höhe bringt (bezogen auf das erste File).
#
#####

use File::Basename;

if ( $#ARGV < 1 ) {
    print "Syntax: norm.pl XPOS FILE/PATTERN [FILE/PATTERN ...]\n";
    exit;
}

$xpos = shift @ARGV;
$ypos = 0;

if ( ($xpos !~ /^[-0-9\.]+$/o) || ($xpos < 1) || ($xpos > 4000) ) {
    print "Syntax: norm.pl XPOS FILE/PATTERN [FILE/PATTERN ...]\n";
    print "Bad X-value. Aborting.\n";
    exit;
}

@files = ();

foreach $arg ( @ARGV ) {
    push @files, glob( $arg );
}

if ( $#files < 0 ) {
    print "No files found. Aborting.\n";
    exit;
} else {
    $n = $#files + 1;
    print "Normalizing $n Files.\n";
}

$ref = shift @files;

if ( ! -e $ref ) {
    print "Cannot open reference file. Aborting.\n";
}
```

```
    exit;
}

open( REFFILE, "$ref" );

foreach ( <REFFILE> ) {
    if ( /^\\s*([-0-9\\.]+)[\\s,;]+([-0-9\\.]+)\\s*$ /o ) {
        if ( (! $ypos) && ($1 <= $xpos) ) {
            $ypos = $2;
            $xpos = $1;
            if ( $ypos < 0 ) {
                $ypos = 0;
                unshift @files, ( $ref );
            }
            print "Normalizing at <$xpos, $ypos>.\n";
        }
    }
}

close( REFFILE );

foreach $file ( @files ) {
    %data = ();
    @dlist = ();

    if ( ! open(DATFILE, "<$file") ) {
        print "Error opening $file. Skipping.\n";
    } else {
        foreach ( <DATFILE> ) {
            if ( /^\\s*([-0-9\\.]+)[\\s,;]+([-0-9\\.]+)\\s*$ /o ) {
                $data{$1} = $2;
                push @dlist, ( $1 );
            }
        }
        close( DATFILE );
        $diff = $data{$xpos} - $ypos;
        print "File: $file   Diff: $diff\n";
        if ( ! open(DATFILE, ">$file") ) {
            print "Error writing to $file. Skipping.\n";
        } else {
            foreach $x ( @dlist ) {
                $y = $data{$x} - $diff;
                printf DATFILE "%10.5f;%20.10f\n", $x, $y;
            }
            close( DATFILE );
        }
    }
}

print "Done.\n";
exit;
```

## Erzeugung von X-multiple-Y Datenfiles: mkxy.pl

```
#!/usr/bin/perl

#####
#
# mkxy.pl : Erzeugt ein X/Multi-Y CSV aus einer Liste von Files
#
#####

use File::Basename;

@files = ();

if ( $#ARGV < 1 ) {
    print "Syntax: mkxy.pl OUTPUT INPUT [INPUT2 ...]\n";
    exit;
}

$out = shift;

foreach $arg ( @ARGV ) {
    push @files, glob( $arg );
}

if ( $#files < 0 ) {
    print "No files found. Aborting.\n";
    exit;
}

$count = 0;
%data = ();
@memo = ();
$stipline = "WZ";

open( NEWFILE, ">$out" )
    || die( "Unable to open $out for output.\n" );

foreach $file ( @files ) {

    if ( !open( CSV, "<$file" ) ) {
        warn "Unable to open $file for input.\n";
        next;
    }

    print " Processing $file...\n";

    $name = basename( $file, ( '.txt', '.csv', '.prn' ) );

    $stipline .= "; $name";

    foreach ( <CSV> ) {
        chomp;
        if ( /^s*([0-9\.]+)[\s,;]+([-0-9\.]+)/o ) {
            $key = int( 1000 * $1 );
            if ( ! defined( $data{ $key } ) ) {
                $data{ $key } = "$1";
                push @memo, ( $key );
            }
        }
    }
}

```

```

        $data{$key} .= "; $2";
    }
}

close( CSV );
}

print NEWFILE "$stoplefte\n";

foreach $index ( @memo ) {
    print NEWFILE $data{$index}."\n";
}

close( NEWFILE );
print "Done.\n";

```

### Generierung von 3D-Spektren als POV-Ray Objekte: povit3d.pl

```

#!/usr/bin/perl

#####
#
#  povit3d.pl : Create 3D POV-Ray object from spectral data
#              (X, Y1, Y2, ...)
#
#####

# ===== Include necessary packages =====
use File::Basename;

# ===== Set program defaults =====
InitGlobs();

# ===== Evaluate input =====

# ===== Print help =====
if ( $#ARGV < 0 ||
    ( ($#ARGV == 0) && ($ARGV[0] =~ m#(help|/h|-h|--help)#o) ) ) {
    PrintHelp();
    exit;
}

# ===== Evaluate Parameters =====
ScanArgs(\@ARGV);

# ===== Start processing =====

# ===== Print process parameters =====
PrintParam();

# ===== File conversion =====

# ===== Open file I/Os =====
$file = $setup{"file"};
$pov = $setup{"pov"};

open( DATAFILE, "<$file" )

```

```

    || die( "Unable to open $file for input.\n" );

if ( $setup{"append"} ) {
    if ( !open( POVFILE, ">>$pov" ) ) {
        close( DATAFILE );
        die "Unable to open $pov for appending.\n";
    }
} else {
    if ( !open( POVFILE, ">$pov" ) ) {
        close( DATAFILE );
        die "Unable to open $pov for output.\n";
    }
}

# ==== Read datafile, filter X-values ====
foreach ( <DATAFILE> ) {
    if ( /^s*([-0-9\.]+)[\s,;]+(.*$)/o &&
        ( $1 <= $setup{"maxx"} ) && ( $1 >= $setup{"minx"} ) ) {

        # == increase data counter ==
        $datct++;

        # == set X-data for current counter ==
        $xdata[$datct] = $1;

        # == create field of Y-data ==
        @help = split( /\[s,;]+/, $2 );

        # == count number of y-values, check consistency ==
        $help = $#help;
        if ( $zvcnt < 0 ) {
            $zvcnt = $help;
        } elsif ( $zvcnt != $help ) {
            print "Z-Count mismatch: $zvcnt vs. $help at count $datct.
ý Aborting.\n";
            close( DATAFILE );
            close( POVFILE );
            exit;
        }

        # == set Y-data-field for current counter ==
        $ydata[$datct] = [];
        push @{$ydata[$datct]}, @help;

        # == Scan for Y-min/max-values ==
        foreach $help ( @help ) {
            if ( $help > $fmaxy ) {
                $fmaxy = $help;
            }
            if ( $help < $fminy ) {
                $fminy = $help;
            }
        }
    }
}

# ==== On auto-Y set Y-min/max-values ====
if ( ! $setup{"maxy"} ) {
    # == Increase max-Y by 1 percent ==
    $setup{"maxy"} = $fmaxy * 1.01;
}

```

```

# == Set Y-min only if below zero and forcey0 unset ====
if ( (! $setup{"forcey0"}) && ($fminy < 0) ) {
    $setup{"miny"} = $fminy;
}
print "    Auto-Y: [$setup{miny}:$setup{maxy}]\n";
print "$line\n";
} elseif ( (! $setup{"forcey0"}) && ($fminy < 0) ) {
    $setup{"miny"} = $fminy;
}

# ==== Pre-calc Z values ====
for ( $zc=0 ; $zc <= $zvcnt ; $zc++ ) {
    push @zdata, real_z( $zc );
}

# ==== Calc X, Y and Z delta values ====
$deltax = $setup{"maxx"} - $setup{"minx"};
$deltay = $setup{"maxy"} - $setup{"miny"};
$deltaz = $setup{"zstep"} * $zvcnt;

# ==== Flag translation ====
$xtr = ( $mode{$setup{"mode"}} & 1 );
$ztr = ( $mode{$setup{"mode"}} & 2 );
$pln = ( $mode{$setup{"mode"}} & 4 );
$wal = ( $mode{$setup{"mode"}} & 8 );

# ===== Convert data =====
for ( $xc=0 ; $xc <= $datct ; $xc++ ) {

    # ==== Calculate real X value ====
    $xv = real_x( $xdata[$xc] );
    $xdata[$xc] = $xv;

    for ( $zc=0 ; $zc <= $zvcnt ; $zc++ ) {

        # ==== Calculate real Y values ====
        $yv = real_y( $ydata[$xc]->[$zc] );
        $ydata[$xc]->[$zc] = $yv;

    }
}

$miny = real_y( $setup{"miny"} ) - 5;

# ===== Create POV-file =====

# ===== Create spectrum object =====
print POVFILE "\#declare SP_$setup{name} = union \{\n";

for ( $xc=0 ; $xc <= $datct ; $xc++ ) {

    $xv = $xdata[$xc];

    for ( $zc=0 ; $zc <= $zvcnt ; $zc++ ) {

        $yv = $ydata[$xc]->[$zc];
        $zv = $zdata[$zc];

        print POVFILE "    sphere \{ ";
        printf( POVFILE "<%.5f,%.5f,%.5f>, SPPrad ", $xv, $yv, $zv );
        print POVFILE "\}\n";
    }
}

```

```

# ==== Create X traces ====
if ( $xc && $xtr ) {

    $lx = $xdata[$xc-1];
    $ly = $ydata[$xc-1]->[$zxc];

    print POVFILE " cylinder \{ ";
    printf( POVFILE "<%.5f,%.5f,%.5f>, ", $xv, $yv, $zv);
    printf( POVFILE "<%.5f,%.5f,%.5f>, SPTrad ", $lx, $ly, $zv);
    print POVFILE "\\}\n";
}

# ==== Create Z traces ====
if ( $zc && $ztr ) {

    $lz = $zdata[$zc-1];
    $ly = $ydata[$xc]->[$zxc-1];

    print POVFILE " cylinder \{ ";
    printf( POVFILE "<%.5f,%.5f,%.5f>, ", $xv, $yv, $zv);
    printf( POVFILE "<%.5f,%.5f,%.5f>, SPTrad ", $xv, $ly, $lz);
    print POVFILE "\\}\n";
}

# ==== Pre-create plane ====
if ( $zc && $xc && $pln ) {
    $lx = $xdata[$xc-1];
    $lz = $zdata[$zc-1];
    $lya = $ydata[$xc]->[$zxc-1];
    $lyb = $ydata[$xc-1]->[$zxc];
    $lyc = $ydata[$xc-1]->[$zxc-1];

    $plane .= " triangle \{ ";
    $plane .= sprintf( "<%.5f,%.5f,%.5f>, ", $xv, $yv, $zv);
    $plane .= sprintf( "<%.5f,%.5f,%.5f>, ", $xv, $lya, $lz);
    $plane .= sprintf( "<%.5f,%.5f,%.5f> \\}\n", $lx, $lyc, $lz);
    $plane .= " triangle \{ ";
    $plane .= sprintf( "<%.5f,%.5f,%.5f>, ", $xv, $yv, $zv);
    $plane .= sprintf( "<%.5f,%.5f,%.5f>, ", $lx, $lyb, $zv);
    $plane .= sprintf( "<%.5f,%.5f,%.5f> \\}\n", $lx, $lyc, $lz);
}

# ==== Pre-create wall ====
if ( $xc && $wal ) {
    $lx = $xdata[$xc-1];
    $ly = $ydata[$xc-1]->[$zxc];

    $wall .= " triangle \{ ";
    $wall .= sprintf( "<%.5f,%.5f,%.5f>, ", $xv, $yv, $zv);
    $wall .= sprintf( "<%.5f,%.5f,%.5f>, ", $xv, $miny, $zv);
    $wall .= sprintf( "<%.5f,%.5f,%.5f> \\}\n", $lx, $miny, $zv);
    $wall .= " triangle \{ ";
    $wall .= sprintf( "<%.5f,%.5f,%.5f>, ", $xv, $yv, $zv);
    $wall .= sprintf( "<%.5f,%.5f,%.5f>, ", $lx, $miny, $zv);
    $wall .= sprintf( "<%.5f,%.5f,%.5f> \\}\n", $lx, $ly, $zv);
}
}

print POVFILE "\\}\n";

```

```

# ==== Write plane to own object ====
if ( $pln ) {
    print POVFILE "\n// Start Plane\n\n#declare PL_$setup{name} = union \{\n";
    print POVFILE "$plane";
    print POVFILE "\}\n";
}

if ( $wal ) {
    print POVFILE "\n// Start Wall\n\n#declare WL_$setup{name} = union \{\n";
    print POVFILE "$wall";
    print POVFILE "\}\n";
}

# ==== write coordinate system and tics ====
if ( $setup{"coord"} ) {

    $yzero = real_y(0);

    print POVFILE "\n\n#declare CO_$setup{name} = union \{\n";

    # == X front ==
    printf( POVFILE "    cylinder \{ <40,%.5f,-SPCrad>, <0,%.5f,-SPCrad>,
ý SPCrad \}\n",
        $yzero, $yzero );
    # == Y left ==
    print POVFILE "    cylinder \{ <0,30,-SPCrad>, <0,0,-SPCrad>, SPCrad \}\n";
    # == Z left ==
    printf( POVFILE "    cylinder \{ <0,%.5f,%.5f+SPCrad>, <0,%.5f,-SPCrad>,
ý SPCrad \}\n",
        $yzero, $deltaz, $yzero );
    # == Z right ==
    printf( POVFILE "    cylinder \{ <40,%.5f,%.5f+SPCrad>, <40,%.5f,-SPCrad>,
ý SPCrad \}\n",
        $yzero, $deltaz, $yzero );
    # == X back ==
    printf( POVFILE "    cylinder \{ <40,%.5f,%.5f+SPCrad>,
ý <0,%.5f,%.5f+SPCrad>, SPCrad \}\n",
        $yzero, $deltaz, $yzero, $deltaz);

    # == Complete frame ==
    if ( $setup{"frame"} ) {
        # = 2 x-framelines =
        # X front top
        print POVFILE "    cylinder \{ <40,30,-SPCrad>, <0,30,-SPCrad>,
ý SPCrad \}\n";
        # x back top
        printf( POVFILE "    cylinder \{ <40,30,%.5f+SPCrad>, <0,30,%.5f+SPCrad>,
ý SPCrad \}\n",
            $deltaz, $deltaz);
        # = 3 y-framelines =
        # Y front right
        print POVFILE "    cylinder \{ <40,30,-SPCrad>, <40,0,-SPCrad>,
ý SPCrad \}\n";
        # Y back left
        printf( POVFILE "    cylinder \{ <0,30,%.5f+SPCrad>, <0,0,%.5f+SPCrad>,
ý SPCrad \}\n",
            $deltaz, $deltaz);
        # Y back right
        printf( POVFILE "    cylinder \{ <40,30,%.5f+SPCrad>, <40,0,%.5f+SPCrad>,

```

```

ý SPCrad \}\n",
    $deltaz, $deltaz);
    # = 2 z-framelines =
    # Z left top
    printf( POVFILE " cylinder \{ <0,30,%.5f+SPCrad>, <0,30,-SPCrad>,
ý SPCrad \}\n",
    $deltaz );
    # Z right top
    printf( POVFILE " cylinder \{ <40,30,%.5f+SPCrad>, <40,30,-SPCrad>,
ý SPCrad \}\n",
    $deltaz );
}

# == X tics ==
if ( $setup{"xtics"} ) {
    if ( $deltax >= 2000 ) {
        $sticks = create_xticks(200,1000);
    } elseif ( $deltax >= 400 ) {
        $sticks = create_xticks(50,200);
    } elseif ( $deltax >= 80 ) {
        $sticks = create_xticks(10,40);
    } elseif ( $deltax >= 20 ) {
        $sticks = create_xticks(2,10);
    } else {
        $sticks = create_xticks(1,5);
    }
    print POVFILE "$sticks";
}

# == Y tics ==
if ( $setup{"ytics"} ) {
    if ( $deltay >= 4 ) {
        $sticks = create_yticks(0.2,1);
    } elseif ( $deltay >= 1 ) {
        $sticks = create_yticks(0.1,0.5);
    } elseif ( $deltay >= 0.5 ) {
        $sticks = create_yticks(0.02,0.1);
    } elseif ( $deltay >= 0.1 ) {
        $sticks = create_yticks(0.01,0.05);
    } else {
        $sticks = create_yticks(0.002,0.01);
    }
    print POVFILE "$sticks";
}

# == Z tics ==
if ( $setup{"ztics"} ) {
    if ( $zvcnt > 10 ) {
        $sticks = create_zticks(2,10);
    } else {
        $sticks = create_zticks(1,5);
    }
    print POVFILE "$sticks";
}

print POVFILE "\}\n";
}

# ===== Close file I/Os =====
close( DATAFILE );
close( POVFILE );

```

```
# ===== Create POV-Ray envelope file =====
create_envelope();

# ===== Exit program =====
print "Done.\n";
exit;

#####

# ===== Functions =====

# ===== Initialise global variables =====
sub InitGlobs {
    my @flags = ('coord', 'append', 'xtics', 'ytics', 'ztics', 'frame',
                'forcey0', 'uv');

    # ==== Process options ====
    %setup = (
        'maxy'   => 0,
        'miny'   => 0,
        'maxx'   => 4000,
        'minx'   => 500,
        'mode'   => 'dots',
        'zstep'  => 1,
        'out'    => '',
        'file'   => 'spec.csv',
        'xpov'   => '',
    );

    # ==== Include flags in process options ====
    foreach ( @flags ) {
        $setup{$_} = 0;
    }

    # ==== Plot-mode translations ====
    %mode = (
        'dots'   => 0,
        'xtrace' => 1,
        'ztrace' => 2,
        'grid'   => 3,
        'plane'  => 4,
        'xplane' => 5,
        'zplane' => 6,
        'gplane' => 7,
        'wall'   => 8,
        'xwall'  => 9,
        'zwall'  => 10,
        'gwall'  => 11,
        'pwall'  => 12,
        'xpwall' => 13,
        'zpwall' => 14,
        'gpwall' => 15,
    );

    # ==== Variables for argument scanning ====
    $flags = join "|", @flags;
    $mode = join "|", keys(%mode);

    # ==== Data fields ====
    @xdata = ();
```

```

@ydata = ();
@zdata = ();

# ==== Data counters ====
$datct = -1;
$zvcnt = -1;

# ==== Help variables ====
$line = "-x78;
$plane = "";
$wall = "";
$fmaxy = 0;
$fminy = 0;

# ==== End of function ====
return 1;
}

# ===== Print help information =====
sub PrintHelp {
    print "Syntax: povit3d.pl [OPTIONEN] FILE\n";
    print "$line\n";
    print "Optionen:\n";
    print "    Size: maxx=VALUE      maxy=VALUE|auto\n";
    print "          minx=VALUE      zstep=VALUE\n";
    print "    Output: name=OBJECTNAME out=OUTPUTFILE\n";
    print "          pov=POVFILE\n";
    print "    Mode:
ý mode=dots|xtrace|ztrace|[x|z|g]plane|grid|[x|z|g|p|xp|zp|gp]wall\n";
    print "    Add-on: coord frame xtics ytics ztics\n";
    print "    Misc: append forcey0 uv\n";
    print "$line\n";
    return 1;
}

# ===== Print conversion parameters =====
sub PrintParam {
    print "$line\nData to POV conversion:\n";
    print "    Input  : $setup{file}\n";
    print "    Output : $setup{pov}";
    if ( $setup{"appnd"} ) {
        print " (append)\n";
    } else {
        print "\n";
    }
    if ( $setup{"xpov"} ) {
        print "      + $setup{xpov}\n";
    }
    print "    Params :\n";
    print "      X = [$setup{maxx}:$setup{minx}]\n";
    if ( $setup{"maxy"} ) {
        print "      Y = [$setup{miny}:$setup{maxy}]\n";
    } else {
        print "      Y = AUTO\n";
    }
    print "      Z = $setup{zstep} per step\n";
    print "      M = $setup{mode}";
    if ( $setup{"coord"} ) {
        if ( $setup{"frame"} ) {
            print " w\\ coordinate frame ";
        } else {

```

```

        print " w\\ coordinate system ";
    }
    print "+xtics " if ( $setup{"xtics"} );
    print "+ytics " if ( $setup{"ytics"} );
    print "+ztics " if ( $setup{"ztics"} );
}
print "\n$line\n";
return 1;
}

# ===== Evaluate user input =====
sub ScanArgs {
    my ($aref) = @_ ;
    my ($base, $path, $suff, $prof);
    my @opts = ();

    # ==== Read Povit3D profile from home directory====
    if ( (-e "$ENV{HOME}/.povit3drc") &&
        open( PROFILE, "$ENV{HOME}/.povit3drc" ) ) {
        foreach $line ( <PROFILE> ) {
            chomp $line;
            if ( $line !~ /^#?\s*$/o ) {
                push @opts, ( $line );
            }
        }
        close(PROFILE);
    }
    push @opts, ("\t");

    # ==== Last argument is filename ====
    $setup{"file"} = pop @$aref;

    # ==== Other arguments are options, append to profile-opts ====
    push @opts, @$aref;

    # ==== Loop other arguments, check syntax and values ====
    foreach ( @opts ) {
        if ( /^\\t$/o ) {
            $prof = 1;
        } elsif ( /^(maxx|maxy|minx|miny|zstep)=[-0-9\\.]+$/o ) {
            $setup{$1} = $2;
        } elsif ( /^(miny|maxy)=auto$/o ) {
            $setup{"maxy"} = 0;
        } elsif ( /^(out|name)=[^=]+$/o ) {
            $setup{$1} = $2;
        } elsif ( /^mode=(mode)$/o ) {
            $setup{"mode"} = $1;
        } elsif ( /^($flags)$/o ) {
            $setup{$1} = 1;
        } elsif ( /^atics$/o ) {
            $setup{"xtics"} = 1;
            $setup{"ytics"} = 1;
            $setup{"ztics"} = 1;
        } elsif ( /^pov=[^=]+$/o ) {
            $setup{"xpov"} = $1;
        } elsif ( /^(help|\\h|-h|--help)$/o ) {
            PrintHelp();
            print "\nExiting.\n";
            exit;
        } else {
            if ( $prof ) {

```

```

        print "Unknown option $_.\n";
    } else {
        print "Unknown option $_ in profile.\n";
    }
    exit;
}
}

# ==== Evaluate output file name and POV-Ray object name ====
if ( $setup{"out"} ) {
    # == User selected output name ==
    $setup{"pov"} = $setup{"out"};
    $setup{"name"} = basename( $setup{"pov"}, ('.inc', '.inh', '.pov') );
} else {
    # == Generate output name from input name ==
    ($base, $path, $suff) = fileparse( $setup{"file"},
                                     ('.csv', '.prn', '.txt') );

    if ( ! defined $setup{"name"} ) {
        $setup{"name"} = $base;
    }
    if ( length( $path ) < 3 ) {
        $setup{"pov"} = "$base.inc";
    } else {
        $setup{"pov"} = "$path$base.inc";
    }
}

# ==== Substitute -*+ and whitespace in object name ====
$setup{"name"} =~ tr/\-\\s\*\+/_/;

# ==== Swap X-max/min-values if necessary. ====
if ( $setup{"maxx"} < $setup{"minx"} ) {
    $base = $setup{"maxx"};
    $setup{"maxx"} = $setup{"minx"};
    $setup{"minx"} = $base;
}

# ==== Consider forcey0 ====
$setup{"miny"} = 0 if ( $setup{"forcey0"} );

# ==== On pre-set Y values: swap min/max if necessary ====
if ( $setup{"maxy"} ) {
    if ( $setup{"maxy"} < $setup{"miny"} ) {
        $base = $setup{"maxy"};
        $setup{"maxy"} = $setup{"miny"};
        $setup{"miny"} = $base;
    }
}

# ==== activate coordinate system, if any tics/frame is set ====
if ( ! $setup{"coord"} &&
      ( $setup{"xtics"} || $setup{"ytics"}
        || $setup{"ztics"}
        || $setup{"frame"} ) ) {
    $setup{"coord"} = 1;
}

# ==== end of function ====
return 1;
}

```

```

# ===== Calculate POV-Ray X-value =====
sub real_x {
  my $x = shift;
  my $h;

  if ( $setup{"uv"} ) {
    $h = $x - $setup{"minx"};
  } else {
    $h = $setup{"maxx"} - $x;
  }
  $h *= 40;
  $h /= $deltax;
  return $h;
}

# ===== Calculate POV-Ray Y-value =====
sub real_y {
  my $y = shift;
  my $h;

  $h = $y - $setup{"miny"};
  $h *= 30;
  $h /= $deltay;
  return $h;
}

# ===== Calculate POV-Ray Z-value =====
sub real_z {
  my $z = shift;

  $z *= $setup{"zstep"};
  return $z;
}

# ===== Create ticks on the X-axis =====
sub create_xticks {
  my ($kstep, $gstep) = @_;
  my $ret = "// Start X-Tics\n";
  my ($pos, $x, $y);

  $pos = int( $setup{"maxx"} / $kstep ) * $kstep;
  $y = real_y(0);

  while ( $pos >= $setup{"minx"} ) {
    $x = real_x( $pos );
    if ( $pos % $gstep ) { # small tick
      $ret .= sprintf( "  cylinder \{ <%.5f,%.5f,-SPCrad>, ", $x, $y );
      $ret .= sprintf( "<%.5f,%.5f,-SPCrad>, SPCrad \}\n", $x, ($y-0.5) );
    } else { # large tick
      $ret .= sprintf( "  cylinder \{ <%.5f,%.5f,-SPCrad>, ", $x, $y );
      $ret .= sprintf( "<%.5f,%.5f,-SPCrad>, SPCrad \}\n", $x, ($y-1) );
    }
    $pos -= $kstep;
  }
  return $ret;
}

# ===== Create ticks on the Y-axis =====
sub create_yticks {
  my ($kstep, $gstep) = @_;
  my $ret = "// Start Y-Tics\n";

```

```

my ($pos,$y,$max,$min);

$max = $setup{"maxy"}*1000;
$min = $setup{"miny"}*1000;
$kstep *= 1000;
$gstep *= 1000;

$pos = int( $max / $kstep ) * $kstep;

while ( $pos >= $min ) {
    $y = real_y( $pos/1000 );
    if ( $pos % $gstep ) { # small tick
        $ret .= sprintf( " cylinder \{ <-0.5,%.5f,-SPCrad>, ", $y );
        $ret .= sprintf( "<0,%.5f,-SPCrad>, SPCrad \}\n", $y );
    } else { # large tick
        $ret .= sprintf( " cylinder \{ <-1,%.5f,-SPCrad>, ", $y );
        $ret .= sprintf( "<0,%.5f,-SPCrad>, SPCrad \}\n", $y );
    }
    $pos -= $kstep;
}
return $ret;
}

# ===== Create ticks on the Z-axis =====
sub create_zticks {
    my ($kstep, $gstep) = @_;
    my $ret = "// Start Z-Tics\n";
    my ($pos,$y,$z);

    $y = real_y(0);

    for ( $pos=0 ; $pos <= $zvcent ; $pos++ ) {
        $z = $pos * $setup{"zstep"};
        if ( $pos % $gstep ) { # small tick
            $ret .= sprintf( " cylinder \{ <40,%.5f,%.5f>, ", $y, $z );
            $ret .= sprintf( "<40.5,%.5f,%.5f>, SPCrad \}\n", $y, $z );
        } else { # large tick
            $ret .= sprintf( " cylinder \{ <40,%.5f,%.5f>, ", $y, $z );
            $ret .= sprintf( "<41,%.5f,%.5f>, SPCrad \}\n", $y, $z );
        }
    }
    return $ret;
}

# ===== Create enveloping POV-Ray file =====
sub create_envelope {
    my ($base,$xl,$xr);

    return 0 if ( ! $setup{"xpov"} );
    $base = basename( $setup{"xpov"}, ('.pov','.inc') );

    if ( ! open(ENVELOPE, ">$base.pov") ) {
        print "Error writing POV-Ray envelope (.pov)\n";
        return 0;
    }

    if ( $setup{"uv"} ) {
        $xl = sprintf("%04d",$setup{"minx"});
        $xr = sprintf("%04d",$setup{"maxx"});
    } else {
        $xl = sprintf("%04d",$setup{"maxx"});
        $xr = sprintf("%04d",$setup{"minx"});
    }
}

```

```

}

print ENVELOPE << "EOENVL1";
#declare CamPos = <0.0, 0.0, -40.0>;
#declare YOffset = 0.0;
#declare YScale = <1,1,1>;

#declare SPPrad = 0.03;
#declare SPTrad = 0.03;
#declare SPCrad = 0.10;

#declare DispMode = 0;
#declare ShowText = 0;
#declare LeanLeft = 1;

#declare SpecColor = color rgb <0,0,0>;
#declare CoorColor = color rgb <0,0,0>;
#declare TextColor = color rgb <0,0,0>;

camera {
  orthographic
  location CamPos
  look_at <0.0, 0.0, 0.0>
}

light_source {
  0*x
  color rgb <1,1,1>
  translate CamPos
  shadowless
}

background { color rgb 1.0 }

#include "$setup{pov}"

#declare All = union {
  object {
    SP_$setup{name}
    translate YOffset*y
    scale YScale
    texture {
      pigment { color SpecColor }
      finish { ambient 0.9 }
    }
  }
}
EOENVL1

if ( $mode{$setup{"mode"}} & 4 ) {
  if ( $mode{$setup{"mode"}} & 8 ) {
    print ENVELOPE "#if ( DispMode )\n";
  }
  print ENVELOPE << "EOENVL2a";
  object {
    PL_$setup{name}
    translate YOffset*y
    scale YScale
    texture {
      pigment {
        gradient y

```

```

        color_map {
            [0.00 rgb <0,0,1>]
            [0.30 rgb <0,1,1>]
            [0.50 rgb <0,1,0>]
            [0.70 rgb <1,1,0>]
            [1.00 rgb <1,0,1>]
        }
        scale <1,30,1>
    }
    finish { ambient 0.9 }
}
EOENVL2a
}

if ( $mode{$$setup{"mode"}} & 8 ) {
    if ( $mode{$$setup{"mode"}} & 4 ) {
        print ENVELOPE "#else\n";
    }
    print ENVELOPE << "EOENVL2b";
    object {
        WL_$setup{name}
        translate YOffset*y
        scale YScale
        texture {
            pigment { color rgb <1,1,1> }
            finish { ambient 1.0 }
        }
    }
}
EOENVL2b
    if ( $mode{$$setup{"mode"}} & 4 ) {
        print ENVELOPE "#end\n";
    }
}

if ( $setup{"coord"} ) {
    print ENVELOPE << "EOENVL3";
    object {
        CO_$setup{name}
        texture {
            pigment { color CoorColor }
            finish { ambient 0.5 }
        }
    }
}
#if ( ShowText )
text {
    ttf "cour.ttf", "$xl", 0.01, 0
    texture {
        pigment { color TextColor }
        finish { ambient 0.5 }
    }
    scale <1.5,1.5,1>
    translate -2.0*y
    translate -1.7*x
}
text {
    ttf "cour.ttf", "$xr", 0.01, 0
    texture {
        pigment { color TextColor }
        finish { ambient 0.5 }
    }
    scale <1.5,1.5,1>
}

```

```
        translate -2.0*y
        translate 38.3*x
    }
#end
EOENVL3
}

print ENVELOPE << "EOENVL4";
translate -15*y
translate -20*x
}

object {
    All

#if ( LeanLeft )
    matrix < 1.0, 0.0, 0.0,
            0.0, 1.0, 0.0,
            -0.3, 0.3, 1.0,
            2.0,-2.5, 0.0 >
#else
    matrix < 1.0, 0.0, 0.0,
            0.0, 1.0, 0.0,
            0.3, 0.3, 1.0,
            -2.0,-2.5, 0.0 >
#endif
}
EOENVL4
    close(ENVELOPE);

    if ( ! open(ENVELOPE, ">$base.ini") ) {
        print "Error writing POV-Ray envelope (.ini)\n";
        return 0;
    }
    print ENVELOPE << "EOENVL5";
Input_File_Name=$base.pov
Output_File_Name=$base

;Library_Path=C:\\WinNT\\Fonts
;Library_Path=C:\\Windows\\Fonts

Width=800
Height=600

Antialias=On
Sampling_Method=1
Antialias_Threshold=0.1
Antialias_Depth=3
Jitter=true

Display=off
EOENVL5

    close(ENVELOPE);

    return 1;
}
```



## 11 Literatur

- [1] M. Gantenberg, M. Halupka, W. Sander, *Chem.-Eur. J.* **2000**, *6*, 1865.
- [2] R. Boese, M. T. Kirchner, W. E. Billups, L. R. Norman, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2003**, *42*, 1961.
- [3] R. Ludwig, *Angew. Chem.-Int. Edit.* **2001**, *40*, 1809.
- [4] J. D. Watson, F. H. C. Crick, *Nature* **1953**, *171*, 737.
- [5] A. Werner, *Liebigs Ann.* **1902**, *322*, 261.
- [6] S. N. Vinogradov, R. H. Linnell, *Hydrogen bonding*, Van Nostrand, New York, **1971**.
- [7] R. Rammelsberg, B. Hessling, H. Chorongiewski, K. Gerwert, *Appl. Spectrosc.* **1997**, *51*, 558.
- [8] E. Whittle, D. A. Dows, G. C. Pimentel, *J. Chem. Phys.* **1954**, *22*, 1943.
- [9] I. Norman, G. Porter, *Nature* **1954**, *174*, 508.
- [10] L. Andrews, M. Moskovits, *Chemistry and physics of matrix-isolated species*, Elsevier, Amsterdam, **1989**.
- [11] M. J. Almond, A. J. Downs, *Spectroscopy of Matrix Isolated Species*, J. Wiley & Sons, Chichester, **1989**.
- [12] A. J. Barnes, W. J. Orville-Thomas, A. Mueller, R. Gaufres, *Matrix Isolation Spectroscopy*, D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, **1981**.
- [13] M. Gantenberg, Diplomarbeit an der Ruhr-Universität Bochum, **1999**.
- [14] G. A. Jeffrey, *An Introduction to Hydrogen Bonding*, Oxford University Press, New York, Oxford, **1997**.
- [15] J. D. Bernal, H. D. Megaw, *Proc. Roy. Soc. (London)* **1935**, *A151*, 384.
- [16] M. L. Huggins, *J. Org. Chem.* **1936**, *1*, 407.
- [17] M. L. Huggins, *J. Phys. Chem.* **1936**, *40*, 723.
- [18] A. Werner, *Liebigs Ann.* **1902**, *322*, 135.
- [19] P. Herbine, T. R. Dyke, *J. Chem. Phys.* **1985**, *83*, 3768.
- [20] L. Pauling, *The nature of the chemical bond*, Cornell University Press, Ithaca, **1939**.

- [21] L. Pauling, R. B. Corey, H. R. Branson, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.* **1951**, *37*, 205.
- [22] W. C. Hamilton, J. A. Ibers, *Hydrogen Bonding in Solids, Methods of Molecular Structure Determination (Frontiers in Chemistry)*, Benjamin, New York, **1968**.
- [23] G. C. Pimentel, A. L. McClellan, *The Hydrogen Bond*, **1960**.
- [24] G. A. Jeffrey, W. Saenger, *Hydrogen Bonding in Biological Structures*, Springer-Verlag, Berlin, **1994**.
- [25] J. J. Dannenberg, L. Haskamp, A. Masunov, *J. Phys. Chem. A* **1999**, *103*, 7083.
- [26] W. Caminati, S. Melandri, P. Moreschini, P. G. Favero, *Angew. Chem.-Int. Edit.* **1999**, *38*, 2924.
- [27] P. Hobza, V. Spirko, Z. Havlas, K. Buchhold, B. Reimann, H. D. Barth, B. Brutschy, *Chem. Phys. Lett.* **1999**, *299*, 180.
- [28] P. Hobza, V. Spirko, H. L. Selzle, E. W. Schlag, *J. Phys. Chem. A* **1998**, *102*, 2501.
- [29] E. Cubero, M. Orozco, P. Hobza, F. J. Luque, *J. Phys. Chem. A* **1999**, *103*, 6394.
- [30] M. Amoretti, C. Amsler, G. Bonomi, A. Bouchta, P. Bowe, C. Carraro, C. L. Cesar, M. Charlton, M. J. T. Collier, M. Doser, V. Filippini, K. S. Fine, A. Fontana, M. C. Fujiwara, R. Funakoshi, P. Genova, J. S. Hangst, R. S. Hayano, M. H. Holzscheiter, L. V. Jorgensen, V. Lagomarsino, R. Landua, D. Lindelof, E. L. Rizzini, M. Macri, N. Madsen, G. Manuzio, M. Marchesotti, P. Montagna, H. Pruys, C. Regenfus, P. Riedler, J. Rochet, A. Rotondi, G. Rouleau, G. Testera, A. Variola, T. L. Watson, D. P. van der Werf, *Nature* **2002**, *419*, 456.
- [31] R. F. W. Bader, *Atoms in Molecules. A Quantum Theory*, Oxford University Press, Oxford, **1990**.
- [32] R. F. W. Bader, *Chem. Rev.* **1991**, *91*, 893.
- [33] R. F. W. Bader, *J. Phys. Chem. A* **1998**, *102*, 7314.
- [34] A. J. Barnes, H. E. Hallam, *Matrix isolation spectroscopy*, Elsevier, Amsterdam, **1977**.
- [35] R. J. H. Clark, R. E. Hester (Eds.), *Advances in Spectroscopy, Vol. 17: Spectroscopy of Matrix Isolated Species, Vol. 17*, Wiley, Chichester, UK, **1989**.
- [36] H. Schnoekel, S. Schunck, *Chem. Unserer Zeit* **1987**, *21*, 73.

- [37] W. Sander, G. Bucher, S. Wierlacher, *Chem. Rev.* **1993**, *93*, 1583.
- [38] W. W. Sander, *J. Org. Chem.* **1989**, *54*, 333.
- [39] M. Winkler, W. Sander, *Angew. Chem.-Int. Edit.* **2000**, *39*, 2014.
- [40] I. D. Reva, S. G. Stepanian, *J. Mol. Struct.* **1995**, *349*, 337.
- [41] M. J. Nowak, H. Rostkowska, L. Lapinski, J. S. Kwiatkowski, J. Leszczynski, *Spectrochim. Acta, Part A* **1994**, *50A*, 1081.
- [42] I. D. Reva, A. M. Plokhotnichenko, E. D. Radchenko, G. G. Sheina, Y. P. Blagoi, *Spectrochim. Acta, Part A* **1994**, *50A*, 1107.
- [43] M. J. Nowak, H. Rostkowska, L. Lapinski, J. S. Kwiatkowski, J. Leszczynski, *J. Phys. Chem.* **1994**, *98*, 2813.
- [44] J. Nieminen, M. Rasanen, J. Murto, *J. Phys. Chem.* **1992**, *96*, 5303.
- [45] G. Maes, M. Graindourze, J. Smets, *J. Mol. Struct.* **1991**, *248*, 89.
- [46] M. J. Nowak, L. Lapinski, J. Fulara, *Spectrochim. Acta, Part A* **1989**, *45A*, 229.
- [47] A. J. Barnes, M. A. Stuckey, L. L. Gall, *Spectrochim. Acta, Part A* **1984**, *40A*, 419.
- [48] R. L. Redington, T. E. Redington, *J. Mol. Struct.* **1978**, *48*, 165.
- [49] D. M. Burland, F. Carmona, J. Pacansky, *Chem. Phys. Lett.* **1978**, *56*, 221.
- [50] R. L. Redington, *J. Mol. Spectrosc.* **1977**, *65*, 171.
- [51] Y. Grenie, J. C. Cornut, J. C. Lassegues, *J. Chem. Phys.* **1971**, *55*, 5844.
- [52] R. L. Redington, K. C. Lin, *J. Chem. Phys.* **1971**, *54*, 4111.
- [53] C. V. Berney, R. L. Redington, K. C. Lin, *J. Chem. Phys.* **1970**, *53*, 1713.
- [54] A. J. Barnes, L. Le Gall, J. Lauransan, *J. Mol. Struct.* **1979**, *56*, 15.
- [55] A. J. Barnes, L. Le Gall, C. Madec, J. Lauransan, *J. Mol. Struct.* **1977**, *38*, 109.
- [56] M. Halupka, W. Sander, *Spectrochim. Acta, Part A* **1998**, *54*, 495.
- [57] M. Halupka, Dissertation an der Ruhr-Universität Bochum, Bochum, **2000**.
- [58] B. Meyer, *Low Temperature Spectroscopy*, American Elsevier Publishing Company, New York, **1971**.
- [59] D. W. Kohn, H. Clauberg, P. Chen, *Rev. Sci. Instrum.* **1992**, *63*, 4003.

- [60] G. Maier, T. Preiss, H. P. Reisenauer, *Chem. Ber.* **1994**, *127*, 779.
- [61] G. Maier, H. P. Reisenauer, H. Pacl, *Angew. Chem.-Int. Edit. Engl.* **1994**, *33*, 1248.
- [62] J. M. Hayes, *Chem. Rev.* **1987**, *87*, 745.
- [63] C. Kötting, Dissertation an der Ruhr-Universität Bochum, Bochum, **1999**.
- [64] S. Kudoh, M. Takayanagi, M. Nakata, *Chem. Phys. Lett.* **1998**, *296*, 329.
- [65] R. Campargue, *J. Phys. Chem.* **1984**, *88*, 4466.
- [66] G. H. M. ter Horst, Dissertation an der Reichsuniversität Groningen, Groningen, **1982**.
- [67] E. Knoezinger, P. Beichert, J. Hermeling, O. Schrems, *J. Phys. Chem.* **1993**, *97*, 1324.
- [68] T. Nishiya, N. Hirota, H. Shinohara, N. Nishi, *J. Phys. Chem.* **1985**, *89*, 2260.
- [69] P. Felder, H. H. Guenthard, *J. Mol. Spectrosc.* **1982**, *95*, 68.
- [70] C. Kötting, Diplomarbeit an der Ruhr-Universität Bochum, **1995**.
- [71] R. Taylor, O. Kennard, W. Versichel, *Acta Crystallogr., Sect. B* **1984**, *B40*, 280.
- [72] H. Ohtaki, A. Funaki, B. M. Rode, G. J. Reibnegger, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **1983**, *56*, 2116.
- [73] H. Geisenfelder, H. Zimmermann, *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.* **1963**, *67*, 480.
- [74] R. Ludwig, F. Weinhold, T. C. Farrar, *J. Chem. Phys.* **1995**, *102*, 5118.
- [75] Z. Berkovitch-Yellin, L. Leiserowitz, *J. Am. Chem. Soc.* **1982**, *104*, 4052.
- [76] G. A. Kumar, M. A. McAllister, Substituent effects on the strength, geometry, and NMR chemical shifts of low-barrier hydrogen bonds. Ab initio and DFT investigations, **1998**.
- [77] G. A. Kumar, M. A. McAllister, *J. Org. Chem.* **1998**, *63*, 6968.
- [78] F. Buyl, J. Smets, G. Maes, L. Adamowicz, *J. Phys. Chem.* **1995**, *99*, 14967.
- [79] M. L. H. Jeng, B. S. Ault, *J. Phys. Chem.* **1991**, *95*, 2687.
- [80] M. L. H. Jeng, B. S. Ault, *J. Mol. Struct.* **1991**, *246*, 33.
- [81] M. L. H. Jeng, B. S. Ault, *J. Phys. Chem.* **1990**, *94*, 1323.
- [82] M. L. H. Jeng, B. S. Ault, *J. Phys. Chem.* **1990**, *94*, 4851.
- [83] L. Schriver, *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* **1989**, *85*, 607.

- [84] M. L. H. Jeng, A. M. DeLaat, B. S. Ault, *J. Phys. Chem.* **1989**, *93*, 3997.
- [85] M. L. H. Jeng, B. S. Ault, *J. Phys. Chem.* **1989**, *93*, 5426.
- [86] Y. Hannachi, L. Schriver, A. Schriver, J. P. Perchard, *Chem. Phys.* **1989**, *135*, 285.
- [87] R. B. Bohn, L. Andrews, *J. Phys. Chem.* **1989**, *93*, 5684.
- [88] A. Engdahl, B. Nelander, *Chem. Phys. Lett.* **1985**, *113*, 49.
- [89] A. Engdahl, B. Nelander, *J. Phys. Chem.* **1985**, *89*, 2860.
- [90] A. M. DeLaat, B. S. Ault, *J. Am. Chem. Soc.* **1987**, *109*, 4232.
- [91] L. Andrews, G. L. Johnson, *Journal of Physical Chemistry* **1984**, *88*, 5887.
- [92] A. Engdahl, B. Nelander, *Chem. Phys. Lett.* **1983**, *100*, 129.
- [93] L. Andrews, G. L. Johnson, B. J. Kelsall, *J. Phys. Chem.* **1982**, *86*, 3374.
- [94] W. Hagen, A. G. G. M. Tielens, *J. Chem. Phys.* **1981**, *75*, 4198.
- [95] B. Nelander, *J. Chem. Phys.* **1980**, *72*, 77.
- [96] A. Behrens, W. A. P. Luck, *J. Mol. Struct.* **1980**, *60*, 337.
- [97] M. J. Nowak, K. Szczepaniak, J. W. Baran, *J. Mol. Struct.* **1978**, *47*, 307.
- [98] G. P. Ayers, A. D. E. Pullin, *Spectrochim. Acta, Part A* **1976**, *32A*, 1641.
- [99] G. P. Ayers, A. D. E. Pullin, *Spectrochim. Acta, Part A* **1976**, *32A*, 1695.
- [100] F. Jensen, *Introduction to Computational Chemistry*, John Wiley & Sons, Chichester, **1998**.
- [101] C. Møller, M. S. Plesset, *Phys. Rev.* **1934**, *46*, 618.
- [102] K. Raghavachari, J. A. Pople, *Int. J. Quant. Chem.* **1981**, *20*, 1067.
- [103] R. Krishnan, H. B. Schlegel, J. A. Pople, *J. Chem. Phys.* **1980**, *72*, 4654.
- [104] J. A. Pople, R. Seeger, R. Krishnan, *Int. J. Quant. Chem. Symp.* **1977**, *11*, 149.
- [105] J. A. Pople, R. Krishnan, H. B. Schlegel, J. S. Binkley, *Int. J. Quant. Chem.* **1978**, *14*, 545.
- [106] G. E. Scuseria, H. F. Schaefer, III, *J. Chem. Phys.* **1989**, *90*, 3700.
- [107] G. E. Scuseria, C. L. Janssen, H. F. Schaefer, III, *J. Chem. Phys.* **1988**, *89*, 7382.
- [108] G. D. Purvis, III, R. J. Bartlett, *J. Chem. Phys.* **1982**, *76*, 1910.

- [109] R. J. Bartlett, G. D. Purvis, *Int. J. Quant. Chem.* **1978**, *14*, 561.
- [110] A. D. Becke, *J. Chem. Phys.* **1993**, *98*, 5648.
- [111] A. D. Becke, *J. Chem. Phys.* **1993**, *98*, 1372.
- [112] C. Lee, W. Yang, R. G. Parr, *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **1988**, *37*, 785.
- [113] C. Adamo, V. Barone, in *Recent Advances in Density Functional Methods Part II, Vol. I* (Ed.: D. P. Chong), World Scientific, Singapore - New Jersey - London - Hong Kong, **1997**, pp. 115.
- [114] D. Hadži (Ed.), *Theoretical Treatments of Hydrogen Bonding*, Wiley-VCH, Weinheim, **1997**, p. 318.
- [115] B. Paizs, S. Suhai, *J. Comp. Chem.* **1998**, *19*, 575.
- [116] T. van Mourik, R. J. Gdanitz, *J. Chem. Phys.* **2002**, *116*, 9620.
- [117] C. Adamo, V. Barone, *J. Chem. Phys.* **1998**, *108*, 664.
- [118] R. Krishnan, J. S. Binkley, R. Seeger, J. A. Pople, *J. Chem. Phys.* **1980**, *72*, 650.
- [119] D. E. Woon, T. H. Dunning, *J. Chem. Phys.* **1993**, *98*, 1358.
- [120] T. H. Dunning, Jr., *J. Chem. Phys.* **1989**, *90*, 1007.
- [121] C. van Wüllen, *Persönliche Mitteilung*, **1999**.
- [122] S. Bratoz, D. Hadzi, N. Sheppard, *Spectrochimica Acta* **1956**, *8*, 249.
- [123] J. H. van Lenthe, J. G. C. M. van Duijneveldt-Van de Rijdt, F. B. van Duijneveldt, *Adv. Chem. Phys.* **1987**, *69*, 521.
- [124] G. Chalasinski, M. Gutowski, *Chem. Rev.* **1988**, *88*, 943.
- [125] S. F. Boys, F. Bernardi, *Mol. Phys.* **1970**, *19*, 553.
- [126] I. Mayer, *Int. J. Quantum Chem.* **1998**, *70*, 41.
- [127] P. Salvador, M. M. Szczesniak, *J. Chem. Phys.* **2003**, *118*, 537.
- [128] H. F. Bettinger, *Persönliche Mitteilung*, **2003**.
- [129] I. Mayer, P. Valiron, *J. Chem. Phys.* **1998**, *109*, 3360.
- [130] K. Schäfer, E. Lax, *Landolt-Börnstein, Vol. II.2.a*, Springer Verlag, Berlin - Göttingen - Heidelberg, **1960**.

- [131] N. P. Machara, B. S. Ault, *Inorg. Chem.* **1985**, *24*, 4251.
- [132] G. Maier, C. Lautz, *Eur. J. Org. Chem.* **1998**, 769.
- [133] K. Sundararajan, K. Sankaran, K. S. Viswanathan, A. D. Kulkarni, S. R. Gadre, *J. Phys. Chem. A* **2002**, *106*, 1504.
- [134] N. I. Bagdanskis, M. O. Bulanin, *Opt. Spektrosk.* **1972**, *32*, 525.
- [135] N. I. Bagdanskis, M. O. Bulanin, Y. V. Fadeev, *Opt. Spektrosk.* **1970**, *29*, 687.
- [136] I. L. Alberts, T. W. Rowlands, N. C. Handy, *J. Chem. Phys.* **1988**, *88*, 3811.
- [137] R. Meyer, T.-K. Ha, H. Frei, H. H. Guenthard, *Chem. Phys.* **1975**, *9*, 393.
- [138] Y. Maréchal, *J. Chem. Phys.* **1987**, *87*, 6344.
- [139] D. W. Ochsner, D. W. Ball, Z. H. Kafafi (Eds.), *A Bibliography of Matrix Isolation Spectroscopy: 1985-1997*, National Technical Information Service, Washington, DC, **1998**, p. 229.
- [140] D. W. Ball, Z. H. Kafafi, L. Fredin, R. H. Hauge, J. L. Margrave (Eds.), *A Bibliography of Matrix Isolation Spectroscopy: 1954-1985*, Rice University Press, Houston, Texas, **1988**.
- [141] H. G. O. Becker, R. Gluch, W. Berger, R. Mayer, G. Domschke, K. Müller, E. Fanghänel, D. Pavel, F. Jürgen, H. Schmidt, M. Fischer, K. Schollberg, F. Gentz, K. Schwetlick, K. Gewalt, E. Seiler, G. Zeppenfeld, *Organikum*, Edition Deutscher Verlag der Wissenschaften ed., Johann Ambrosius Barth, Leipzig, Berlin, Heidelberg, **1993**.
- [142] B. S. Ault, *J. Mol. Struct.* **1990**, *222*, 1.
- [143] M. Hawkins, M. J. Almond, A. J. Downs, *J. Phys. Chem.* **1985**, *89*, 3326.
- [144] A. Engdahl, B. Nelander, *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2* **1985**, 1747.
- [145] R. E. Miller, P. F. Vohralik, R. O. Watts, *J. Chem. Phys.* **1984**, *80*, 5453.
- [146] D. G. Prichard, R. N. Nandi, J. S. Muentner, *J. Chem. Phys.* **1988**, *89*, 115.
- [147] R. D. Pendley, G. E. Ewing, *J. Chem. Phys.* **1983**, *78*, 3531.
- [148] G. W. Bryant, D. F. Eggers, R. O. Watts, *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* **1988**, *84*, 1443.

- [149] G. T. Fraser, R. D. Suenram, F. J. Lovas, A. S. Pine, J. T. Hougen, W. J. Lafferty, J. S. Muentner, *J. Chem. Phys.* **1988**, *89*, 6028.
- [150] G. W. Bryant, D. F. Eggers, R. O. Watts, *Chem. Phys. Lett.* **1988**, *151*, 309.
- [151] D. Prichard, J. S. Muentner, B. J. Howard, *Chem. Phys. Lett.* **1987**, *135*, 9.
- [152] D. J. Frurip, L. A. Curtiss, M. Blander, *J. Phys. Chem.* **1978**, *82*, 2555.
- [153] J. M. Hermida-Ramon, M. A. Rios, *J. Phys. Chem. A* **1998**, *102*, 2594.
- [154] L. Turi, *Chem. Phys. Lett.* **1997**, *275*, 35.
- [155] S. A. McDonald, G. L. Johnson, B. W. Keelan, L. Andrews, *J. Am. Chem. Soc.* **1980**, *102*, 2892.
- [156] M. Hartmann, L. Radom, *J. Phys. Chem. A* **2000**, *104*, 968.
- [157] L. Schriver, A. Schriver, J. P. Perchard, *J. Mol. Struct.* **1990**, *222*, 141.
- [158] X. K. K. Zhang, E. G. Lewars, R. E. March, J. M. Parnis, *J. Phys. Chem.* **1993**, *97*, 4320.
- [159] A. Engdahl, *Chem. Phys.* **1993**, *178*, 305.
- [160] R. Boese, Vortrag auf dem Symposium des SFB 452 in Varel **2002**.
- [161] E. S. Kline, Z. H. Kafafi, R. H. Hauge, J. L. Margrave, *J. Am. Chem. Soc.* **1985**, *107*, 7559.
- [162] S. W. Han, K. Kim, *J. Phys. Chem.* **1996**, *100*, 17124.
- [163] H. Torii, M. Tasumi, *Int. J. Quantum Chem.* **1998**, *70*, 241.
- [164] N. Østergård, P. L. Christiansen, O. Faurskov Nielsen, *J. Mol. Struct. (Theochem)* **1991**, *81*, 423.
- [165] P. W. Schultz, G. E. Leroi, A. I. Popov, *J. Am. Chem. Soc.* **1995**, *117*, 10735.
- [166] A. Engdahl, B. Nelander, P. O. Astrand, *J. Chem. Phys.* **1993**, *99*, 4894.
- [167] A. Mortensen, O. F. Nielsen, *Spectrochim. Acta, Part A* **1995**, *51*, 1345.
- [168] A. Mortensen, O. F. Nielsen, J. Yarwood, V. Shelley, *J. Phys. Chem.* **1994**, *98*, 5221.
- [169] G. Maier, J. Endres, *Eur. J. Org. Chem.* **2000**, 1061.
- [170] T. Ishida, F. Hirata, H. Sato, S. Kato, *J. Phys. Chem. B* **1998**, *102*, 2045.

- [171] M. Räsänen, *J. Mol. Struct.* **1983**, *102*, 235.
- [172] M. Räsänen, *J. Mol. Struct.* **1983**, *101*, 275.
- [173] R. Knudsen, O. Sala, Y. Hase, *J. Mol. Struct.* **1994**, *321*, 187.
- [174] J. Lundell, M. Krajewska, M. Räsänen, *J. Phys. Chem. A* **1998**, *102*, 6643.
- [175] J. Lundell, M. Krajewska, M. Räsänen, *J. Mol. Struct.* **1998**, *448*, 221.
- [176] D. R. Stull, *Ind. Eng. Chem.* **1947**, *39*, 517.
- [177] S. T. King, *Spectrochim. Acta, Part A* **1972**, *28*, 165.
- [178] W. Kutzelnigg, R. Meeke, *Spectrochim. Acta* **1962**, *18*, 549.
- [179] M. Räsänen, J. Murto, A. Kivinen, *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.* **1978**, *82*, 63.
- [180] G. Fogarasi, P. Pulay, F. Torok, J. E. Boggs, *J. Mol. Struct.* **1979**, *57*, 259.
- [181] S. G. Stepanian, I. D. Reva, E. D. Radchenko, G. G. Sheina, *Vib. Spectrosc.* **1996**, *11*, 123.
- [182] E. Turner, *Annalen der Chemie* **1832**, *1*, 22.
- [183] J. L. Derissen, P. H. Smit, *Acta Crystallogr., Sect. B* **1974**, *B30*, Pt. 9, 2240.
- [184] C. W. Bock, R. L. Redington, *J. Chem. Phys.* **1986**, *85*, 5391.
- [185] E. M. S. Macoas, R. Fausto, M. Pettersson, L. Khriachtchev, M. Rasanen, *J. Phys. Chem. A* **2000**, *104*, 6956.
- [186] J. Higgins, X. F. Zhou, R. F. Liu, T. T. S. Huang, *J. Phys. Chem. A* **1997**, *101*, 2702.
- [187] J. Chocholousova, J. Vacek, F. Huisken, O. Werhahn, P. Hobza, *J. Phys. Chem. A* **2002**, *106*, 11540.
- [188] P. Hobza, J. Sponer, *J. Am. Chem. Soc.* **2002**, *124*, 11802.
- [189] J. Chocholousova, J. Vacek, P. Hobza, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2002**, *4*, 2119.
- [190] M. D. Taylor, J. Bruton, *J. Am. Chem. Soc.* **1952**, *74*, 4151.
- [191] C. Cason, T. Froehlich, N. Kopp, R. Parker, *POV-Ray 3.5*, <http://www.povray.org>.
- [192] M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, V. G. Zakrzewski, J. A. Montgomery, Jr., R. E. Stratmann, J. C. Burant, S. Dapprich, J. M. Millam, A. D. Daniels, K. N. Kudin, M. C. Strain, O. Farkas, J.

- Tomasi, V. Barone, M. Cossi, R. Cammi, B. Mennucci, C. Pomelli, C. Adamo, S. Clifford, J. Ochterski, G. A. Petersson, P. Y. Ayala, Q. Cui, K. Morokuma, D. K. Malick, A. D. Rabuck, K. Raghavachari, J. B. Foresman, J. Cioslowski, J. V. Ortiz, B. B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R. Gomperts, R. L. Martin, D. J. Fox, T. Keith, M. A. Al-Laham, C. Y. Peng, A. Nanayakkara, C. Gonzalez, M. Challacombe, P. M. W. Gill, B. Johnson, W. Chen, M. W. Wong, J. L. Andres, M. Head-Gordon, E. S. Replogle, J. A. Pople, *Gaussian 98, Revision A.3*, Pittsburgh PA, **1998**.
- [193] R. D. Amos, A. Bernhardsson, A. Berning, P. Celani, D. L. Cooper, M. J. O. Deegan, A. J. Dobbyn, F. Eckert, C. Hampel, G. Hetzer, P. J. Knowles, T. Korona, R. Lindh, A. W. Lloyd, S. J. McNicholas, F. R. Manby, W. Meyer, M. E. Mura, A. Nicklass, P. Palmieri, R. Pitzer, G. Rauhut, M. Schütz, U. Schumann, H. Stoll, A. J. Stone, R. Tarroni, T. Thorsteinsson, H.-J. Werner, *Molpro, 2002.6*, Birmingham, UK.
- [194] P. A. Thiessen, *PovChem*, <http://www.ChemicalGraphics.com>.
- [195] L. Wall, *PERL 5*, <http://www.perl.org/>.

## **Danksagung**

Die Danksagung ist bekanntlich einer der am häufigsten gelesenen Teile einer Arbeit. Ich habe mich daher bemüht, bei jedem etwas zu finden wofür ich ihr oder ihm danken kann. Sollte ich trotzdem jemanden vergessen haben, so geschah das mit hoher Wahrscheinlichkeit unabsichtlich.

Zunächst einmal möchte ich mich bei Klaus Block und Matthias Böhm bedanken, die sich die Mühe gemacht haben diese Arbeit zu lesen, und die mit ihren konstruktiven Vorschlägen zur endgültigen Version beigetragen haben. Auch Holger Bettinger möchte ich für seinen kritischen Blick auf die quantenchemischen Teile dieser Arbeit danken.

Mein Dank für das tolle Arbeitsklima am Lehrstuhl geht an: Andreas Balster, Holger Bettinger, Klaus Block, Matthias Böhm, Holger Bornemann, Bayram Cakir, Michael Exner, Klaus Gomann, Jan Grossmann, Dirk Grothe, Martin Halupka, Rolf Hübert, Martin Jäger, Willi Kappert, Ralf Kirsch, Michael Kiselewsky, Christoph Kolano, Carsten Kötting, Oliver Krause, Arvid Kuhn, Stephan Rehm, alle Arndt Richter, Olaf Schade, Anja Strehl, Marc Studentkowski, Kerstin Schroeder, Christina Tönshoff, Hans Henning Wenk, Michael Winkler, und Roman Wrobel.

Ferner bedanke ich mich bei Sugumar Venkataramani, Muthu Karuthadurai, Dr. Lisa George, Kurshida Khayer, Dr. Changyuan Lu und „Prof.“ Dr. Hongxing Wang für die Einblicke in fremde Kulturkreise.

Die folgenden Personen waren eigentlich schon fast weg als ich an den Lehrstuhl kam, aber einigen von ihnen kann ich wohl auch dafür dankbar sein: Carsten Junker, Volker Hülsewede, Magdalena Luther, Christian Röser und Holger Wandel.

Ich danke Dr. Martin Jäger für seine tief greifenden, wenn auch subjektiven Einblicke in die deutsche Hochschullandschaft und Dr. Götz Bucher für seine (indirekte) Bestätigung dieser Einblicke. Herrn Dr. Holger Bettinger danke ich für den Beweis, dass Habilitanden auch anders sein können und dass während einer Habilitation nicht automatisch jegliches soziales Verhalten verloren geht.

Ich bedanke mich bei Olaf Schneider, der lange Zeit mit mir die Freuden und Ärgernisse bei der Wartung der Rechner teilte – auch wenn „Ordnung“ wohl ein Fremdwort für ihn war.

Frau Joppich, Herrn Haenschke, Herrn Dr. Scheidt und Herrn Raskopf danke ich für die Hilfe bei vielen technischen Problemen. Herrn Raskopf möchte ich darüber hinaus für die Anfertigung der modifizierten Pulsedpositionseinrichtung und seine offene Art im Umgang mit anderen Leuten danken.

Frau Steger danke ich für ihr Bemühen, mir die Wirren der Uni-Bürokratie näher zu bringen. Ferner danke ich ihr für einige Tassen Kaffee, viele Copy-Karten und noch mehr Filtertüten.

Frau Schröder danke ich für ihre anhaltende gute Laune, Geschichten über „Mein Mann“ und diverse Glasgeräte, die sonst im Glaslager verstaubt wären.

Des Weiteren möchte ich mich bei Klaus Gomann bedanken, der mir zwar auch Zugang zum Glaslager verschaffte, sich aber viel lieber auch mal auf ein Gespräch über die Fotografie einließ. Vor allem danke ich ihm aber für die günstige Überlassung seines alten Fotolabors, mit dem ich viel Spaß hatte und sicherlich noch haben werde.

Den Mitarbeitern der Werkstätten danke ich für die vielen geleisteten Arbeiten, insbesondere der Konstruktion der Aufhängung der modifizierten Pulsdeposition.

Martin Halupka möchte ich nicht nur noch einmal für seine tolle Betreuung während meiner Diplomarbeit danken, sondern auch für seine fortwährende Hilfe am Anfang meiner Doktorarbeit.

Michael Kiselewsky danke ich für de ganzen Spaß, den wir zusammen mit unserem gemeinsamen Hobby - der Fotografie - hatten, für die Danksagung in seiner Doktorarbeit und viele tiefgründige Gespräche über Probleme, die wir eh nicht lösen können.

Dann möchte ich mich noch bei Holger Bornemann, Christoph Kolano, Andrey und Daniel Olschewsky, Oliver Krause und Michael Winkler für viele fröhliche Abende außerhalb der Universität bedanken.

Das Stichwort „außerhalb“ bringt mich zu meinen nicht-chemischen Freunden, mit denen ich teilweise schon zur Schulzeit viel Spaß hatte und die mich auch während des Studiums immer wieder daran erinnern haben, dass es auch noch ein Leben außerhalb der Universität gibt. Allen voran Anke, Ingo, Sascha und natürlich die kleine Rebekka.

Natürlich danke ich auch meiner Familie, die mir all die Jahre Rückhalt und Unterstützung gegeben hat, ohne auch nur den geringsten Zweifel daran zu äußern, dass der von mir eingeschlagene Weg auch der richtige für mich ist.

Als letztes möchte ich mich bei Christina Tönshoff bedanken. Wir haben unser Chemie-Studium gemeinsam begonnen und es sieht so aus, als würden wir es auch mit vergleichsweise geringem zeitlichem Unterschied beenden. Dazwischen haben wir viele Vorlesungen besucht und uns zusammen durch einige Praktika gekämpft. Und auch wenn wir einander nicht immer eine große Hilfe waren, so bin ich doch froh, dass sie all die Jahre da war.



# Lebenslauf

Name	Marcus Gantenberg
Geburtsdatum	16. Juni 1973
Geburtsort	Essen
Eltern	Elisabeth Gantenberg-Koers und Reinhold van Elst
Staatsangehörigkeit	deutsch
Familienstand	ledig

## Schulbildung

08/1979 - 06/1983	Laurentius-Grundschule in Essen-Steele
08/1983 - 05/1992	Carl-Humann Gymnasium in Essen-Steele
23.05.1992	Abitur

## Wehrdienst

07/1992 - 09/1992	Luftwaffenausbildungsregiment 1, Goslar
09/1992 - 06/1993	Lufttransportgeschwader 63, Rendsburg

## Studium

10/1993 - 06/1999	Studium an der Ruhr-Universität Bochum
12/1998 - 06/1999	Diplomarbeit „Wasserstoffverbrückte Aggregation in kryogenen Matrices“ im Arbeitskreis von Prof. Dr. W. Sander
09/1999	Beginn der Doktorarbeit im Arbeitskreis von Prof. Dr. W. Sander

*Would you like me to give you a formula for success? It's quite simple, really.  
Double your rate of failure. You're thinking of failure as the enemy of success.  
But it isn't at all. You can be discouraged by failure - or you can learn from it.  
So go ahead and make mistakes. Make all you can.  
Because, remember that's where you'll find success.*

(Thomas J. Watson)

*A 'No' uttered from deepest conviction is better and greater than  
A 'Yes' merely uttered to please, or what is worse, to avoid trouble.*

(Mahatma Gandhi)