#### Anhang A

# Danksagung

Mein herzlicher Dank gilt meinem Lehrer Herrn Prof. Dr. Manfred Winnewisser für die wissenschaftliche Betreuung dieser Arbeit. Die durch ihn besonders geförderte internationale Arbeitsatmosphäre war für mich eine große Bereicherung.

Frau Dr. Brenda P. Winnewisser möchte ich für die gute Zusammenarbeit in Bezug auf die Diskussion der Ergebnisse der Fits der effektiven Konstanten danken.

Insbesondere möchte ich Dr. Stefan Klee Dipl. Ing. Georg Ch. Mellau und Dr. Michael Lock, für die ausgezeichnete Zusammenarbeit bei den apparativen Entwicklungen und den FT-IR-Messungen danken.

Für die Bereitstellung des Computerprogramms LINC danke ich Dr. Brenda P. Winnewisser und Dr. Koichi M. T. Yamada. Dr. Fred Stroh möchte ich für die Computerprogramme LW51, QBRASS und FITEFF danken. Dr. Karen A. Keppler gilt mein Dank für das Programm WEIGHTS. Herrn Dr. Markus Mengel danke ich für die Einführung in Berechnungen nach dem Monte-Carlo Prinzip. Daraus entstand das Programm MCFermi.

Ich bedanke mich bei Herrn Dipl. Chemiker Ralf Petry für die Hilfe beim Aufbau und der Durchführung der IR-Messungen am Giessener Diodenlaserspektrometer.

Dr. Jürgen Preußer danke ich ganz besonders für die für vielen Hilfestellungen im Zusammenhang mit Hard- und Softwarefragen. Von ihrer praktischen Hilfe konnte ich in besonderem Maße profitieren, die auch wesentlich zum Entstehen dieser Arbeit beitrug. Mein Dank gebührt auch Herrn Dr. Jürgen Witzke für die Hilfe bei der Lösung von Hard- und Softwareproblemen.

Dr. Farzad Mirzaie danke ich für die Hilfe und die Gelegenheit, die Darstellung von Dichlormethylphosphan (CDCl<sub>2</sub>PH<sub>2</sub>), des Pyrolysevorläufers von DCP, zumindest teilweise in seinem Labor (Institut für Organische Chemie, JLU) auszuführen. Dr. Hans Peter Reisenauer danke ich für die Diskussionen zur Darstellung von kleinen Molekülen.

Prof. Jacek Koput möchte ich für die Diskussionen und die theoretischen Berechnungen zu HCP und DCP danken.

Bei Frau Dipl.-Chem. Gabriele Schulze bedanke ich mich für die freundliche Zusammenarbeit und die vielen Diskussionen zur Spektroskopie. Ein besonderer Dank gilt Dr. Kastriot Islami für die kompetente mathematische Beratung, die ich dann in entsprechende Mathematica Programm-Routinen umsetzen konnte. Seine Persönlichkeit trug zu einem angenehmen Arbeitsklima bei.

Weiterhin gilt mein Dank allen Mitarbeitern des Physikalisch-Chemischen-Instituts, sowie Herrn Rühl aus dem Anorganisch-Chemischen-Institut der Justus-Liebig-Universität für die zahlreichen Diskussionen zur Konstruktion eines Hochtemperaturofens.

Herrn Willi Sack, Herrn Harry Heidt, Herrn Gerd Pfeifer und Herrn Sascha Lember aus der feinmechanischen Werkstatt, Herrn Harald Weigand und Herrn Jochen Hamann aus der Elektronikwerkstatt möchte ich für die Fertigungsarbeiten danken, ohne die meine Arbeit nicht 178 Danksagung

möglich gewesen wäre. Herrn Wolfgang Karg, Herrn Eugen Möllmann und Herrn Sascha Lember danke ich auch für das Anfertigen verschiedener Zeichnungen, die in dieser Arbeit enthalten sind. Ein besonderer Dank gilt Frau Ute Lubbadeh für die immer freundliche Hilfe bei der Erledigung von Formalitäten.

Dem Hochschulrechenzentrum der Justus-Liebig-Universität danke ich für die Bereitstellung der notwendigen Hard- und Software. Die Sach- und Personalmittel für diese Arbeit wurden von der Deutschen Forschungsgemeinschaft, dem Fonds der chemischen Industrie und der Justus-Liebig-Universität bereitgestellt. Die finanzielle Unterstützung ermöglichte auch die Teilnahme an mehreren internationalen Konferenzen.

Ich danke Frau Stephanie Karg, Frau Gabriele Schulze und Herrn Dr. Stefan Klee für das zeitraubende Korrekturlesen dieser Arbeit.

Ganz besonders danke ich meinen Eltern für ihre hilfreiche und großzügige Unterstützung, die sie mir in allen Belangen während meiner Ausbildung gewährten.

## Anhang B

#### Lebenslauf

Name: Michael Jung

Studium: Studium der Anglistik von 1983 bis 1986

an der Philipps Universität in Marburg

Beginn des Chemiestudiums (Diplom) im Sommersemester 1986

an der Justus-Liebig-Universität in Giessen

Diplom-Zeugnis Oktober 1993,

Schwerpunkt Fourier-Transform Infrarot-Spektroskopie, Beginn der Doktorarbeit 1994 bei Prof. Dr. Winnewisser

wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für physikalische Chemie

Stipendium: DAAD Sprach-Stipendium (Kulturaustauschprogramm)

in der V.R. China an der Nan Da Universität in Nanjing (Sep-Dez 1997)

Praktika: Werkstudent Bayer AG Leverkusen 1989 und 1990

Praktikum bei NHSP (Joint Venture der Robert

Bosch GmbH in Nanjing) Sep-Nov 1997

Sprachkenntnisse: Englisch (fließend), Spanisch, Französisch;

Grundkenntnisse in Chinesisch, Schwedisch

Sonstiges: Gründung der Firma BJ Diagnostik GmbH im August 1998

mit dem Schwerpunkt: Medizinische DNA-Analysen

an sehr kleinen Probenmengen

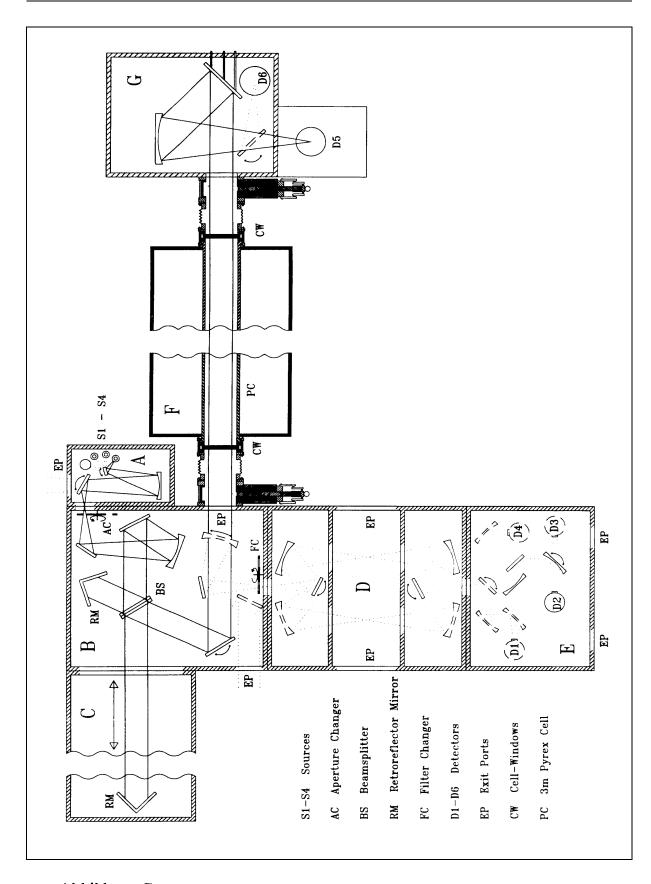
### Anhang C

# Zusammenstellung der gemessenen und berechneten FT-IR-Spektren.

Die aufgezeichneten FT-IR-Spektren sind wie folgt geordnet. Das FT-IR-Spektrum einer Messung am BRUKER IFS 120 HR Interferometer (Justus-Liebig-Universiät Gießen) besteht aus einem Interferogramm, einem Phasenspektrum und einem Einkanalspektrum (single beam spectrum). Diese drei Spektren sind immer in der Datei eines Einkanalspektrums gespeichert. Die wichtigsten Meßdaten zu den einzelnen Spektren sind in den jeweiligen Kapiteln in Tabellenform beschrieben. Die Zahl der addierten Blöcke entspricht der Zahl der addierten Einkanalspektren. Bei fünf Blöcken mit 10 Scans pro Block erhält man insgesamt 50 Scans. Dabei entsteht eine neue Datei (Summenspektrum, Summe aus mehreren Teilmessungen). Aus einem Summenspektrum wird ein Transmissionsspektrum gebildet, indem man es durch das Hintergrundspektrum dividiert. Die generierten Dateinamen beginnen mit einem T, sind diese Spektren anschließend noch zerofilled, beginnen die Dateinamen mit ZT. Eine Datei, die mit ZT beginnt bezeichnet ein Transmissionsspektrum. Alle angegebenen Transmissionsspektren sind kalibriert. Die Kalibrationsdaten zu den einzelnen Transmissionsspektren sind ebenfalls in den jeweiligen Kapiteln tabellenartig erfaßt. Aus diesen kalibrierten Spektren wurden die Linienlisten erstellt. Diese Listen sind ebenfalls in der selben Datei wie das Transmissionsspektrum gespeichert und können mit OPUS (Bruker) abgerufen werden; mit diesem Programm wird auch das Giessener FT-IR-Spektrometer bedient, welches in Abbildung C.1 schematisch dargestellt ist.

**Tabelle C.1** Aufstellung der gemessenen Interferogramme und Phasenspektren und den daraus berechneten Einkanal-, Summen- und Transmissionsspektren.

Transmissionsspektren	Summenspektren	Einkanalspektren	Hintergrundspektren
HCP			
ZTGCHPDS.1	okhcpds.1	_	ghcpdb.1
ZTGHCPES.1	okhcpes.1	ghcpe.2,9,10	ghcpeb.1
ZTGHCPCS.1	ghcpcs.1	ghcpcs.1-2	ghcpcb.1
ZTGHCPGX.1	${ m ghcpgs.1}$	ghcpg.1-7	ghcpfbx.1
ZTGHCPFX.1	ghcpfs.1	ghcpf.3-12	ghcpfbx.1
ZTGHCPK.1	ghcpks.1	ghcpk.1-2	ghcphb.1
ZTGHCPHX.1	ghcphs.1	ghcph.1-5	ghcphbx.1
ZTGHCPIX.1	ghcpis.1	ghcp.1-6	ghcpibx.1
DCP			
ZTDCPKS.1	dcpks.1	dcph.1-4	dcpkbx.1
ZTDCPL.1	=	dcpl.1	dcpkbx.1
ZTDCPM.1	=	dcpm.1	dcpkbx.1
ZTDCPAS.1	dcpas.1	dcpa.1-8	dcpabx.1
ZTDCPBS.1	dcpbs.1	dcpb.1-8	dcpabx.1
ZTDCPGS.1	dcpgs.1	dcpg.1-15	dcpgbx.1
ZTDCPFS.1	dcpfs.1	$\mathrm{dcpf.1-2}$	dcpfbx.1
ZTDCPDS.1	$\mathrm{dcp}\mathrm{ds.1}$	dcpd.1-12	dcpdbx.1
ZTDCPJS.1	dcpjs.1	$\mathrm{dcpj.1-2}$	dcpjb.1
HBS			
ZTGHBSFS.1	ghbsfs.1	ghbsfs.1-18	ghbsfb.1
ZTGHBSCS.1	ghbscs.1	ghbsc.1-7	${ m ghbsbb.1}$
HBCl <sub>2</sub>			
TGHBOB.3	-	ghbob.3	ghbobb.1
TGHBOB.4	=	ghbob.4	ghbobb.1
HCP (Emission)			
THCPE.1	hcpes.1	ehcp.1-12	ehcpb.1



 ${\bf Abbildung~C.1~Schematischer~Aufbau~des~FT-IR-Spektrometers~IFS~120~HR~von~Bruker.}$