

**Anhang A**

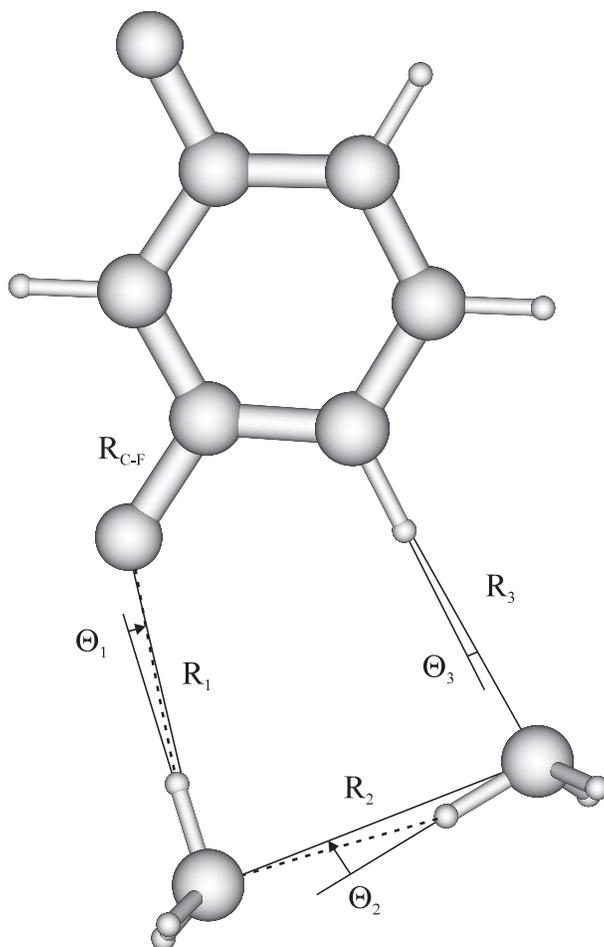
**Abkürzungsverzeichnis**

---

meta-DFB	meta-Difluorbenzol
ortho-DFB	ortho-Difluorbenzol
para-DFB	para-Difluorbenzol
meta-ClFB	meta-Chlorfluorbenzol
BE	Bindungsenergie
BSSE	Basis Set Superposition Error
dET	dissoziativer Elektronen-Transfer
dPT	dissoziativer Protonen-Transfer
IP	Ionisationspotential
REMPI	Resonance Enhanced Multiphoton Ionization
R2PI	Resonante Zwei-Photonen-Ionisation
1C-R2PI	Einfarben Resonante Zwei-Photonen-Ionisation
2C-R2PI	Zweifarben Resonante Zwei-Photonen-Ionisation
vdW	van der Waals
LCAO	Linear Combination of Atomic Orbitals
HF	Hartree-Fock
UHF	Unrestricted Hartree-Fock
MP2	Møller-Plesset Störungstheorie bis zur 2. Ordnung
SCF	Self-Consistent-Field
ZPE	Zero-Point-Energy
CI	Configuration Interaction
PES	Potential Energy Surface
S <sub>N</sub> 2	Bimolekulare Nucleophile Substitution
HOMO	Highest Occupied Molecular Orbital
SOMO	Single Occupied Molecular Orbital
KDP	Kaliumdihydrogenphosphat (KH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> )
BBO	Bariumborat (BaB <sub>2</sub> O <sub>4</sub> )
TOF	Time of Flight
MCP	Micro Channel Plates

# Anhang B

## Berechnete Strukturparameter des neutralen Clusters 6

Abbildung B.1: Strukturparameter des neutralen  $(m\text{-DFB}\cdot\text{NH}_3)_2$ -Komplexes **6**.

<b>6</b>			<b>6</b>		
$R_{C-F}$	(Å)	1.336	$\Theta_1$	(deg)	4.07
$R_1$	(Å)	3.374	$\Theta_2$	(deg)	10.47
$R_2$	(Å)	3.317	$\Theta_3$	(deg)	2.47
$R_3$	(Å)	3.588			

Tabelle B.1: Strukturdaten nach HF/6-31G\*\*.

# Anhang C

## Berechnete Strukturparameter des kationischen Clusters 9

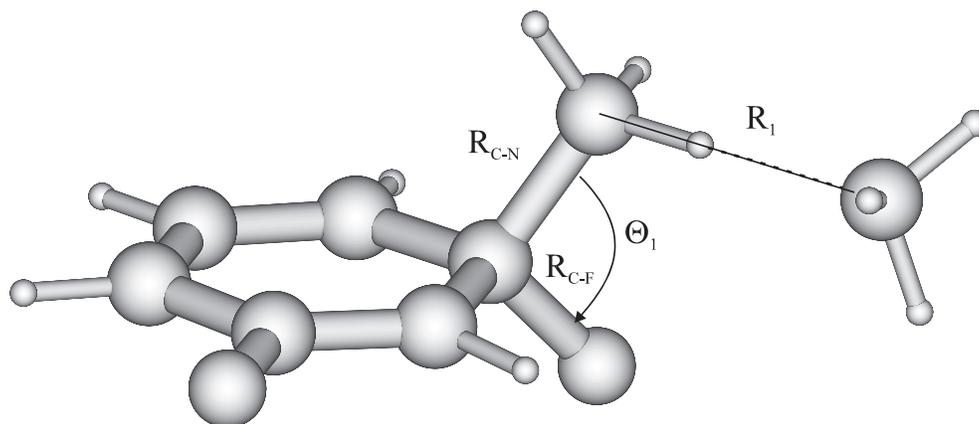


Abbildung C.1: Strukturparameter des neutralen  $(m\text{-DFB}\cdot\text{NH}_3)_2^+$ -Komplexes **9**.

<b>9</b>		
$R_{C-F}$	(Å)	1.52
$R_{C-N}$	(Å)	1.36
$R_1$	(Å)	2.85
$\Theta_1$	(deg)	101.34
$\Theta_{C-N-N}$	(deg)	110.94

Tabelle C.1: Strukturdaten nach UHF/6-31G\*\*.

# Anhang D

## Detaillierte Darstellung des Versuchsaufbaus

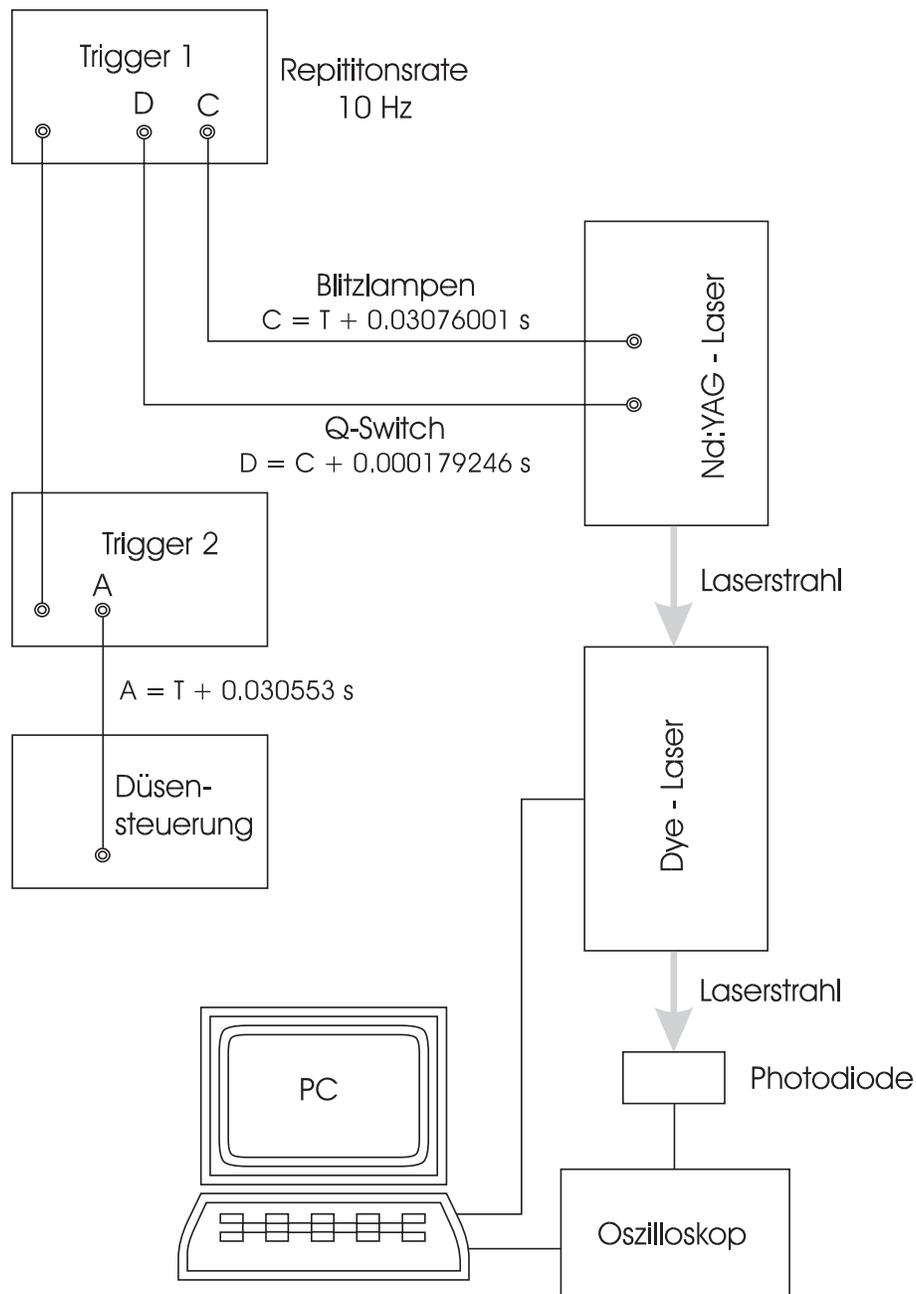


Abbildung D.1: Schematische Darstellung der Komponenten, die den zeitlichen Ablauf des Experiments festlegen. Der Molekularstrahl und der Laserpuls werden mittels der Trigger 1 und 2 zeitlich korreliert. Der Laserpuls triggert über eine Photodiode das, die Meßdaten erfassende, Speicheroszilloskop. Die genaue Meßmodifikationen des Oszilloskops werden an einem *personal computer* eingegeben. Dieser PC fragt die im Oszilloskop gespeicherten Daten ab und veranlaßt den Farbstofflaser die nächste Laserwellenlänge anzufahren.