

Ausgewählte Publikationen

A. REMPI/ZEKE/MATI Spektroskopie an H-brückengebundenen Komplexen

ZEKE spectroscopy of complexes and clusters (review)

K. Müller-Dethlefs, O. Dopfer, and T.G. Wright*, Chem. Rev. 94, 1845-1871 (1994)*

- Übersichtsartikel zu meiner Dissertation, erste ZEKE/MATI Spektren H-gebundener Komplexe
- Bestimmung exakter Ionisationspotentiale und zwischenmolekularer Frequenzen

B. Rovibronische Spektroskopie von Kohlenwasserstoffanionen

Electronic spectra of linear carbon anions

M. Tulej, D.A. Kirkwood, G. Maccaferri, O. Dopfer, J.P. Maier, Chem. Phys. 228, 293-300 (1998)*

- Aufbau eines neuen Experiments zur Spektroskopie anionischer Systeme
- erster spektroskopischer Befund zur Identifizierung diffuser interstellarer Banden

C. IR Photodissoziationsspektroskopie ionischer Cluster

(I) Übersichtsartikel

(a) High resolution spectroscopy of ionic complexes (review)

E.J. Bieske and O. Dopfer*, Chem. Rev. 100, 3963-3998 (2000)*

- Übersicht über hochaufgelöste Studien zu geladenen Komplexen mit Resultaten meiner Habilitation
- Ionen-Liganden Wechselwirkungen und deren Potentiale
- Quellen und spektroskopische Methoden für Ionen-Liganden Komplexe
- Eigenschaften und allgemeine Trends für ionische Protonbrücken und π -Bindungen

(b) Spectroscopic and theoretical studies of $\text{CH}_3^+\text{-Rg}_n$ clusters (Rg=He, Ne, Ar):

From weak intermolecular forces to chemical reaction intermediates (review)

O. Dopfer, Int. Rev. Phys. Chem. 22, 437-495 (2003)*

- Übersichtsartikel zu unseren experimentellen und theoretischen Resultaten zu $\text{CH}_3^+\text{-Rg}_n$
- Solvation reaktiver Carbokationen mit unpolaren Liganden
- Ionen-Liganden Potentialflächen, quantenchemische Berechnung von Potentialflächen
- Struktur und Dynamik p-gebundener Komplexe (p-Bindung vs H-Brücken)
- Modellsysteme für $\text{S}_{\text{N}}2$ Reaktionen (erster spektroskopischer Befund für Doppelminimumpotential)
- Edelgasatome als Sensor für Reaktivität von Molekülorbitalen elementaren Ionen
- Einfluß ungepaarter Elektronen auf zwischenmolekulare Kräfte (Induktionskräfte vs Ladungstransfer)
- Mikrosolvationsprozess, Isomere, Clusterwachstum, Einfluß der Solvation auf Reaktivität
- Multidimensionale Lösung der Rotation-Vibration Schrödingergleichung für nichtrigide Komplexe

(c) IR Spectroscopy of Microsolvated Aromatic Cluster Ions:

Ionization-Induced Switch in Aromatic Molecule-Solvent recognition (review)

O. Dopfer, Z. Phys. Chem. 219, 125-168 (2005)*

- Übersichtsartikel zu unseren experimentellen und theoretischen Resultaten zu biophysikalischen Wechselwirkungen
- Mikrosolvation aromatischer Moleküle in unpolarem und polarem Lösungsmittel
- Protonbrücken, π -Bindungen, Ladung-Dipol Wechselwirkung, Protontransfer
- Struktur und Bindungsmechanismen biologisch relevanter Systeme

(d) IR spectroscopic strategies for the structural characterization of isolated and microsolvated protonated aromatic molecules:

O. Dopfer, J. Phys. Org. Chem. xxx, xxx-xxx (2006)*

- Übersichtsartikel zu IR spektroskopischen Techniken für Ionen und deren Cluster
- protonierte aromatische Moleküle: Struktur, Protonierungsstelle, Reaktivität
- Einfluß von Substituenten (funktionelle Gruppen) auf Reaktivität

(II) Ionen-Liganden Wechselwirkungen von Biophysikalischem Interesse

(a) Microhydration of protonated biomolecular building blocks:

IR spectra of protonated Imidazol-water_n complexes

H.-S. Anrei, N. Solcà and O. Dopfer, ChemPhysChem* **7**, 107-110 (2006)

(b) Prototype microsolvation of aromatic hydrocarbon cations by polar ligands:

IR spectra of benzene⁺-L_n clusters (L=H₂O, CH₃OH)

N. Solcà and O. Dopfer, J. Phys. Chem. A* **107**, 4046-4055 (2003)

- erste spektroskopische Studie zur Benzol⁺-Wasser Wechselwirkung, Wassernetzwerke
- Prototyp für Wechselwirkung: aromatisches Kohlenwasserstoffkation-polarer Ligand
- erste spektroskopische Studie zur Hydratisierung protonierterter Biomoleküle

(III) Spektroskopie elementarer Carbokationen

IR spectra of C₃H₃⁺-N₂ dimers: identification of proton-bound c-C₃H₃⁺-N₂ and H₂CCCH⁺-N₂ isomers

O. Dopfer, D. Roth, J.P. Maier, J. Am. Chem. Soc.* **124**, 494-502 (2002)

- C₃H₃⁺ Isomere (Relevanz für Kohlenwasserstoffplasmen, Verbrennung, Rußbildung, Astrochemie)
- erstmaliger eindeutiger spektroskopischer Nachweis von c-C₃H₃⁺ in der Gasphase

(IV) Protonierung aromatischer Moleküle

(a) Protonated Benzene: IR Spectrum and Structure of C₆H₇⁺

N. Solcà and O. Dopfer, Angew. Chem. Int. Ed.* **41**, 3628-3631 (2002), **VIP Artikel**

(b) Protonation of gas-phase aromatic molecules:

IR spectrum of the fluoronium isomer of protonated fluorobenzene

N. Solcà and O. Dopfer, J. Am. Chem. Soc.* **125**, 1421-1430 (2003)

(c) Separate spectroscopic detection of carbenium and fluoronium isomers of protonated fluorobenzene

N. Solcà and O. Dopfer, Angew. Chem. Int. Ed.* **42**, 1537-1540 (2003), **VIP Artikel**

(d) Spectroscopic identification of oxonium and carbenium ions of protonated phenol in the gas phase:

IR spectra of weakly bound C₆H₇O⁺-L dimers (L=Ne, Ar, N₂)

N. Solcà and O. Dopfer, J. Am. Chem. Soc.* **126**, 2732-2741 (2004)

- erste spektroskopische Studien zur Gasphasen-Protonierung aromatischer Moleküle
- erste spektroskopische und eindeutige Strukturbestimmung von isoliertem protonierten Benzol
- Konkurrenz zwischen Ring- und Substituentenprotonierung, Substituenteneinfluß auf Reaktivität

(V) Protonenleiter

(a) IR spectrum and structure of protonated ethanol dimer:

implications for the mobility of excess protons in solution

N. Solcà and O. Dopfer, J. Am. Chem. Soc.* **126**, 9520-9521 (2004)

(b) Hydrogen-bonded Networks in Ethanol Proton Wires:

IR Spectra of (EtOH)_qH⁺-L_n clusters (L=Ar/N₂, q≤4, n≤5)

N. Solcà and O. Dopfer, J. Phys. Chem. A* **109**, 6174-6186 (2005)

- erstes Spektrum zu protoniertem Ethanoldimer und größeren Clustern
- kleinste Einheit (Prototyp) eines alkoholischen Protonenleiters
- Einfluß der Solvatation auf Eigenschaften eines Protonenleiternetzwerks

(VI) Pikosekunden zeitaufgelöste Spektroskopie

Real-time Observation of Ionization-Induced Hydrophobic ↔ Hydrophilic Switching

S. Ishiuchi, M. Sakai, Y. Tsuchida, A. Takeda, Y. Kawashima, M. Fujii, O. Dopfer*, K. Müller-Dethlefs*, Angew. Chem.* **117**, 6305-6307 (2005), *Angew. Chem. Int. Ed.* **44**, 6149-6151 (2005)

- erstes Dreifarben Pikosekunden Experiment
- erste direkte Beobachtung einer intermolekularen Isomerisierungsreaktion in einem Cluster Ion
- Konkurrenz zwischen intermolekularen ππ und H-Bindungen