

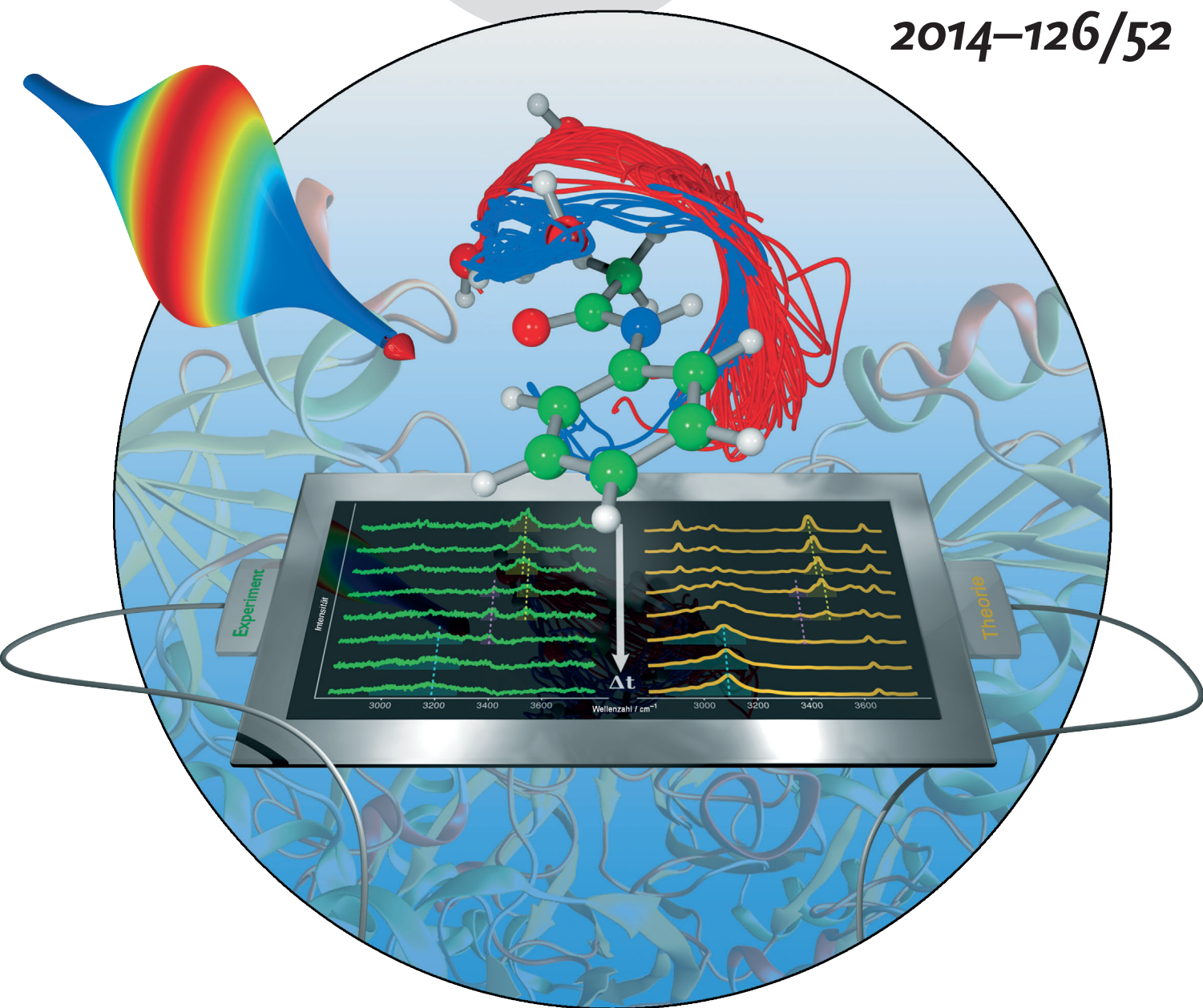
# Angewandte Chemie

GDCh

Eine Zeitschrift der Gesellschaft Deutscher Chemiker

[www.angewandte.de](http://www.angewandte.de)

2014–126/52



## Simulationen der Solvationsdynamik ...

... von Wasser werden durch O. Dopfer, M. Fujii und R. Mitric et al. in der Zuschrift auf S. 14830 ff. behandelt. Dabei wird aufgezeigt, wie zeitaufösende IR-Spektroskopie zur Verifizierung von Dynamiksimulationen genutzt werden kann. Der Ansatz wird auf den Acetanilid-Wasser-Cluster angewendet, bei dem Photoionisierung die Verschiebung eines Wassermoleküls von der CO- zur NH-Gruppe des Amids auslöst, wobei ein schneller (rot) und ein langsamer Reaktionspfad (blau) beschriftet werden.

WILEY-VCH