



Abbildung 1. Chemische Struktur hydratisierter Protonen in Wasser. **A** Schematische Darstellung des Eigen-Kations $H_9O_4^+$ (links) und des Zundel-Kations $H_5O_2^+$ (rechts). Die Pfeile markieren die Koordinate r der O-H Bindung und die (O...H+...O) Protontransfer-Koordinate z . Im Eigen-Kation wird das Proton durch eine kovalente O-H Bindung lokalisiert während es im Zundel-Kation zwischen den beiden Wassermolekülen delokalisiert ist. **B** Anharmonisches Schwingungspotential (links) und Doppelminimumpotential des Zundel-Kations entlang der Koordinate z (rechts, rote Linie). Das Doppelminimumpotential wird durch die Einwirkung der Flüssigkeitsumgebung verzerrt (rechts, gepunktete Linie). Die roten und blauen Pfeile markieren Schwingungsübergänge zwischen den Quantenzuständen des Protons, rote Pfeile vom Grund- in den ersten angeregten Zustand und blaue Pfeile vom ersten in den zweiten angeregten Zustand. Eine Modulation der Potentialflächen verändert den Abstand der Quantenzustände und damit die Energie der Schwingungsübergänge was durch zweidimensionale Schwingungsspektroskopie nachgewiesen wird.