

Sachverzeichnis

Symbole

[2Fe-2S]-Ferredoxin 35
 [3Fe-4S]-Cluster 43
 [4Fe-3S]-Cluster 44
 [4Fe-4S]-Ferredoxin 42
 [Fe]-Hydrogenase 177
 [FeFe]-Hydrogenasen 175
 [NiFe]-Hydrogenasen 172

A

Absorptionsbanden 237
 Absorptionskante 293
 A-Cluster 196
 Aconitase 45
 Ahlrichs-Basissatz 274
 AIM-Methode 283
 Aktivierung
 – N₂- 181
 Aktivierungsenthalpie 251
 Aldolase 8
 Aldose 201
 Alkoholdehydrogenase 8
 Anisotropie 316
 Antiferromagnetismus 320
 Anti-Stokes-Streuung 285
 Arbeitsterm 264
 Atmungsschwingung 291
 Atomorbitale (AOs) 283
 Austauschstromdichte 252
 Avogadro-Konstante 264

B

Basissatz 272
 Beugungsexperiment 231
 Bildplattendetektor 226
 Bioliganden
 – Aspartat 95
 – Cysteinat 95
 – Glutamat 95

– Histidin 94
 – Methionin 96
 – Porphyrinat 96
 – Tyrosinat 96
 Biomoleküle 268
 Bohrsches Magneton 320
 Boltzmann-Konstante 264
 Born-Oppenheimer-Näherung 268
 Born-Oppenheimer-Prinzip 237
 Bragg-Beziehung 296
 Bragg'sches Gesetz 226
 Bravais-Gitter 225
 Bremsstrahlung 296
 Butler-Volmer-Gleichung 251, 256

C

C1-Domänen 9
 Cadmium 7
 Carboanhydrasen 4
 Catechol 212
 CCD-Array 238
 CCD-System 226
 C-Cluster 194
 CD-Spektroskopie 245
 Chininsulfat 240
 Chromophoren 289
 Complete active space 280
 Continuous Shape Measures 21
 Continuous-Wave-Spektrometer 309
 Cooper-Paare 321
 Corrole 322
 Cotton-Effekt 246
 Cottrell-Gleichung 255
 Coulomb-Wechselwirkung 303
 Cyclovoltammetrie 250
 Cysteindesulfurase 38
 Cytochrom P450 127
 Cytochrom P450nor 116

Cytochrom-*c*-Oxidase 158
 Cytochrom *c* 125

D

Deformationsschwingung 291
 Desulfoferrodoxine 31
 Desulforedoxin 29
 Diamagnetismus 320
 Diamidophosphat 18
 Dichtefunktionaltheorie 267, 270
 Diffusionshemmung 253
 Diffusionskontrolle 253
 Diodenlaser 289
 Dipolwechselwirkung 305
 Dirac-Gleichung 269
 Dreiecksspannungsmethode 250
 Dunning-Basissatz 274

E

Ein-Elektronen-Systeme 267
 Eisen 301
 Eisen-Porphyrin-Systeme 315
 Electron spin echo envelope modulation (ESEEM) 317
 Elektrochemie 249
 Elektron
 – Bahndrehimpuls 307
 Elektronendichte 230, 271
 Elektronenspinresonanzspektroskopie 307
 Elektronentransfer 262
 Elektron-Kern-Doppelresonanz (electron nuclear double resonance, ENDOR) 316
 Emissionsenergie 302
 Enemark-Feltham-Notation 115
 Enterobactin 212
 EPR-Spektrum 281
 Evolution 42
 EXAFS-Region 295
 Excimer 244
 Exciplex 244
 Extinktionskoeffizient 234, 246

F

Faraday-Konstante 251
 Feldmodulation 308
 Fermiwechselwirkung 311
 Ferredoxin
 – [2Fe-2S]- 35
 – [4Fe-4S]- 42
 Ferrocen 258
 Ferromagnetismus 320
 Fe-SOD 56
 Flavodieisenenzyme 89
 Fluoreszenzlebensdauer 242

Fluoreszenzlöschung 243
 Fluoreszenzrelaxationsrate 242
 Fluoreszenzspektroskopie 239
 Fluorimeter 242
 Flussquantisierung 321
 Fock-Theorie 269
 Förster-Energie-Transfer 244
 Fourier-Transformation 298
 Fourier-transform-EPR-Spektrometer 309
 Franck-Condon-Prinzip 237, 263
 Frataxin 38
 Freie Aktivierungsenthalpie 252
 Fructose 201
 Fructose-1,6-bisphosphat-Aldolase 8

G

Galaktose-Oxidase 155
 Galvani-Potenzialdifferenz 250
 Gammastrahlung 301
 Gauß-Funktion 272
 Generalized gradient approximations (GGAs) 271
 Gesetz von Lambert, Bouguer und Beer 234
 GIAO-Basissatz 281
 Glaskohlenstoffelektrode 259
 Globales Minimum 277
 Glucose 201
 Grimme-Dispersion 272
 Guanylylpyridon 177

H

H₂-Aktivierung 171
 Hämerythrin 84
 Häm-Katalase 126
 Hämocyanin 143
 Hämoglobin 101
 Halbstufenpotenzial 257
 Hanging-Drop-Verfahren 224
 Harnstoff 15
 Hartree-Fock-Theorie 269
 Hartree-Theorie 269
 Helmholtz-Modell 249
 Hiebersche Basenreaktion 194
 Hohenberg-Kohn-Theorem 271
 HP-Proteine 42
 Hydridoliganden 174
 Hydrogenasen 171
 – [Fe]- 177
 – [FeFe]- 175
 – [NiFe]- 172
 – Hmd 177
 Hyperfeinkopplung 311

I

Inner-Filter-Effekt 241
 Intersystem Crossing (ISC) 240
 iR-Kompensation 259
 Isomerieverschiebung 303
 Isopenicillin-N-Synthase 63
 IUPAC-Polyedersymbol 145

J

Jahn-Teller-Verzerrung 310
 Josephson-Kontakt 321

K

Kashas Regel 241
 Katalase
 – Häm- 126
 Katalysezyklus
 – [NiFe]-Hydrogenase 173
 – Aconitase 47
 – Carboanhydrase 6
 – CuZnSOD 150
 – Cytochrom P450 127
 – Cytochrom-*c*-Oxidase 160
 – Galactose-Oxidase 157
 – Methioninsynthase 189
 – Mn/Fe-SOD 57
 – Nitrogenase 183
 – Superoxidreduktase 32
 – Tyrosinase 147
 – Urease 17
 Kern-Zeeman-Effekt 305
 Ketose 201
 Klasse-II-Aldolase 8
 Klystron 309
 Kohn-Sham-Gleichung 271
 Konfigurationswechselwirkungs-Methode 270
 Kontaktwechselwirkung 311
 Kontinuumsmodell
 – polarisierbares 275
 Kopplung
 – vibronische 289
 Korrelationsenergie 270, 279
 Kraftfeldmethode 267
 Kraftkonstante 277
 Kramer-Regel 313
 Kristallisationsroboter 224
 Kristallstrukturanalyse 223
 Kupferkomplexe 298
 Kupferproteine 314
 Kupfer-Zink-Superoxiddismutase 149

L

Lambert-Beer-Bereich 239
 Lambert-Beer-Gesetz 293
 Laplace-Operator 271
 Laporte-Verbot 235
 Leitsalz 258
 Lewis-Orbitale 283
 Licht
 – weißes 238
 Lindskog-Mechanismus 6
 Lipscomb-Mechanismus 6
 Lösungsmittel 274
 Lumineszenz 240

M

MAD-Methode *siehe* Multiwavelength Anomalous Dispersion
 Magnetfeld 313
 Magnetometer 319
 Marcus-Hush-Theorie 264
 Marcus-Theorie 262
 Massentransport 254
 Messung
 – magnetische 319
 Metallbasizität 190
 Metallchaperon 19
 Methanmonooxygenase
 – lösliche 85
 – partikuläre 148
 Methioninsynthase 188
 Methode
 – des molekularen Ersatzes (MR) 229
 Methode des isomorphen Ersatzes 227
 Mikrowellen 308
 Miller-Indizes 226
 Minimalbasissätze 273
 Mn-SOD 56
 MoCu-CO-Dehydrogenase 80
 Mößbauer-Spektroskopie 301
 MoFe-Protein 182
 Molekül
 – Optimierung der Struktur 276
 Molekülmechanik 267
 Molekülorbital 282
 Molybdopterin 75
 Møller-Plesset-Serie 270
 Monochromator 290
 Monsanto-Prozess 197
 Mulliken-Populationsanalyse 282
 Multiwavelength Anomalous Dispersion 229
 Myoglobin 101
 – deoxyMb 102

- MbCO 104
- McClure-Goddard 106
- oxyMb 103
- Pauling 106
- Weiss 106

- N**
- N₂-Aktivierung 181
- Naphthalin-1,2-Dioxygenase 65
- Naphthalinradikal 312
- NBO-Analyse 282
- Nernst-Gleichung 253
- Netzebenenschar 226
- Nitrogenase 181, 182
 - P-Cluster 182
- Nitrophorine 119
- Nitroprussid 113
- NMR-Spektrum 281
- NO-Synthasen 130
- Nullfeldaufspaltung 313
- Nullkurve 257
- Nullpunktenergie 278

- O**
- Optische Rotationsdispersion 245
- Optische Spektroskopie elektronischer Zustände 233
- Oxidative Addition 190
- Oxidodieisenzentren 83

- P**
- Paramagnetismus 320
- Partikuläre Methanmonooxygenase 148
- Pascal-Konstante 320
- Patterson-Methode 228
- P-Cluster 182
- Phenylalaninhydroxylase 66
- Phosphoreszenz 240
- Photodioden-Array 238
- Photometer 239
- Pockels-Zellen 247
- Polysaccharidmonooxygenase 151
- Pople-Basissatz 273
- Populationsanalyse 282
- Pourbaix-Diagramm 207
- Pre-Edge-Region 294
- Protein
 - Strukturanalyse 223
- ProteinDataBase (PDB) 223
- Proteine
 - 1Fe-SORs 31
 - 2Fe-SORs 31
 - CA 4
 - CcO 158
 - CuZnSOD 149
 - Dfx 31
 - Dx 29
 - eNOS 130
 - GO 155
 - Hb 101
 - Hr 84
 - HypB 19
 - iNOS 130
 - IscC 38
 - IscU 38
 - IspG 48
 - IspH 48
 - ISU 38
 - Mb 101
 - MoCuCODH 80
 - MoFe 182
 - NFS1 38
 - nNOS 130
 - NOS 130
 - PAH 66
 - pMMO 148
 - Rd 26
 - RNR 88
 - sMMO 85
 - SORs 31
 - sTf 210
 - SufS 38
 - UreE 19
- Pseudokontaktwechselwirkung 312
- Pseudopotenzial 274
- Pulsvoltammetrie 259
 - differenzielle 260
 - normale 260

- Q**
- QM/MM-Verfahren 267
- Quadrupolaufspaltung 304, 306

- R**
- Radikal-SAM-Enzyme 49
- Raman-Effekt 285
- Raman-Schwingung 278
- Raman-Setup 289
- Raman-Verschiebung 286
- Rayleigh-Strahlung 290
- Rayleigh-Streuung 285, 289
- Reaktion
 - homodesmotische 279
 - isodesmische 279
- Rebound-Mechanismus 87
- Redoxchemie 249
- Referenzelektrode 258

Reflex 226
 Reinheit
 – elektrochemische 257
 Reorganisationsenergie 30, 263
 Resonanz-Raman-Spektroskopie 285, 287
 Ribonukleotidreduktase 88
 Rieske-Dioxygenasen 65
 Rieske-Protein 305
 Röntgenabsorptionsspektroskopie 293
 Röntgenbeugung 224
 Röntgenstrahlung 225, 293
 Röntgenstrukturanalyse 227
 Rotverschiebung 234
 Rubredoxin 26
 Rückstreuung 297
 Runge-Gross-Theorem 280
 Rydberg-Orbitale 283

S

Schrödinger-Gleichung 268
 Schweratome 228
 Schwingung
 – Raman-aktiv 287
 Selbstorganisation 42
 Siderophore 212
 Single-Point-Rechnung 276
 Singulett-Singulett-Energietransfer nach Förster 245
 Slater-Determinante 269
 Slater-type orbitals (STOs) 272
 Solvationsmodell
 – kontinuierliches 275
 Solvatochromie 274
 Spin-Bahn-Kopplung 307, 310
 Spin-only-Formel 320
 Spinpolarisation 312
 Spinverbot 235
 Spitzenpotenzial 256
 Split-Valence-Basissatz 281
 Square Wave Voltammetrie 261
 Standardabsorptionskoeffizientenfunktion 296
 Stern-Volmer-Gleichung 244
 Stokes-Linien 285
 Stokes-Verschiebung 240
 Stoßquenching 241
 Strom
 – faradayscher 259
 Stromdichte 253
 Stromstärke 256
 Sulfitoxidase 75

Superconducting quantum interference device (SQUID) 319
 Superhyperfeinkopplung 311
 Superoxid 25
 Superoxiddismutase 55
 – CuZn- 149
 Superoxidreduktasen 25, 31
 Supraleitendes Quanteninterferenzmodul 321
 Synchrotron 295
 Synchrotronstrahlung 225, 229

T

Tetrahydrobiopterin 67
 Tetramethylguanidinochinolin 288
 Thermochemie 278
 Transferrin 210
 Tyrosinase 146

U

Übergangsmetallkomplexe 235
 Umwandlung
 – interne 239
 Urease 15
 – Hemmung 18
 UV/Vis-Spektroskopie 233, 280

V

Vitamin-B₁₂ 187
 Voltammogramm 260

W

Wassergasgleichgewicht 193
 Wood-Ljungdahl-Route 193

X

XANES-Region 294
 XAS-Spektren 295
 XAS-Spektroskopie 298
 Xylose 201
 Xylose-Isomerase 201
 Xylulose 201

Z

Zeeman-Effekt 307
 Zeitkorrelierte Einzelphotonenzählung 242
 Zinkenzyme 3
 Zinkfingerdomänen 9
 Zirkulardichroismus 245
 Zustand
 – entatischer 265