

## Stichwortverzeichnis

### Symbole

$\sigma$ - $\pi$  Trennung 42  
 $\delta$ -Funktion 225, 286  
 $\Psi$ -Funktion, elektronische 13, 40  
 $\sigma$ -Orbital 41  
 $\pi$ -Orbital 41  
 1-Chlornaphthalin 140  
 2-Butanol 156, 159  
 3-Methylcyclohexanon 162  
 9-Aminoacridin 178

**a**

Absorption 1

- spektrum 2, 5, 100, 102, 103, 245

Absorptionskoeffizient 1, 101

- integraler 99

Absorptionsquerschnitt 2, 101

accepting mode 212, 225

adiabatisch 272, 318

Aggregat 141, 148

Aktivierungsenergie 253, 255, 229, 291

Aktivierungsenthalpie

- freie 253, 255, 268

Akzeptor

- Energie- 233, 234, 246
- Elektronen- 250, 256, 278, 299

Anharmonizität 37, 218

Anregung

- durch Licht 81
- schwingungsinduzierte 123
- thermische 130, 288
- szustand 181

*Ante*-Komplex 251, 256, 257, 271, 275, 278, 294

Anthracen 98, 147, 216

Arrheniustheorie 254, 271

Aufenthaltswahrscheinlichkeit 18

Aufspaltung

- Energie- 28, 203

- Exciton- 141, 148

Ausreduzieren 74

Austauschenergie 53

Austauschintegral 49, 51, 53, 237

Auswahlregeln 47, 90, 116, 145

Azobenzol 3, 64, 88, 106, 127

Azobenzolophan 147, 149

### b

Band

- Energie- 11, 208
- Exciton- 144

Bande

- Absorptions- 2, 3, 6, 89, 96, 102, 127
- – Integration über die Breite 88, 102, 312
- – Struktur 96, 99
- CD- 4, 148
- Charge transfer (CT) 266
- Emissions- 4, 6
- Exciton- 142, 144, 149
- heiße 130
- Schwingungs- 94, 99
- verbotene 127

Bandenform 96

Bandenverbreiterung

- homogene 186
- inhomogene 186

Basis

- funktion 27, 44, 45, 48, 56
- satz 43
- – unvollständiger 26, 30
- – vollständiger 22, 41

Begegnungskomplex 251

Benzol 57, 70, 128, 130

Besetzungsdichte 82, 86, 178, 308

Besetzungsinversion 190

Besselfunktion 323

Biacetyl 231

Bildkraft 165

- Born-Oppenheimer Näherung 34, 35, 94,  
123, 210, 212  
– „crude“ 35, 94, 212  
Butadien 29, 47, 57, 65, 93
- c**  
Charakterentafel 65  
Charge-shift reaction 288, 297  
Chiralität 3, 107  
– Exciton- 158  
Chlorbenzol 140  
Chromatium 301  
Chromophor 108, 150, 164  
Circulardichroismus 3, 107, 164  
Condon-Näherung 202, 209, 279  
Coulombintegral 52, 236  
cross reaction 272  
Cytochrom 301
- d**  
Darstellung 65  
– direktes Produkt 69  
– irreduzible 65, 67  
– mehrdimensionale 70  
– reduzible 74  
Davidov-Aufspaltung 141  
De Broglie-Formel 12  
Deaktivierung 4, 171, 177  
– durch Strahlung 181  
– strahlungslose 195  
Debye-Hückel-Theorie 252  
Deuterium-Effekt 224  
Dexter Energieübertragung 246  
Dimer 141  
– „card-packed“ 146  
– „head-to-tail“ 146  
Diphenyl 141  
Dipol-Dipol-Wechselwirkung 141, 144, 236,  
242, 248  
Dipollänge 102  
Dipolmoment  
– magnetisches 33, 90, 133  
– Übergangs-  
– – elektrisches 87, 88, 90, 99, 102  
– – magnetisches 90, 141  
Dipolnäherung 87  
Dirac-Gleichung 33  
Dispersionstheorie  
– klassische 103  
Dissoziationsenergie 37  
DNS 141  
Donor  
– Elektronen 250  
Drehimpuls 11, 18, 31, 90  
Drehsinn 107  
Dyade 302
- e**  
Ehrenfest'sches Theorem 309  
Eigenfunktion 19, 20, 23, 30, 43  
– gestörte in 1. Ordnung 124  
– Schwingungs- 36  
– Spin- 30  
– Symmetrie der 61, 92  
Eigenschwingung 175  
Eigenvektor 23, 27, 173  
Eigenwert 20  
Eigenzustand 113, 173, 202  
Ein-Determinanten-Methode 54  
Ein-Elektronen-  
– Atomorbital 41, 49  
– System 20  
– Übertragung 254  
– Verfahren 45  
Einschaltvorgang 308  
Einstein-Koeffizienten 177, 184, 243  
Elektronen  
– affinität 47  
– dichte 21, 28  
– loch 252  
– korrelation 55  
– spin 30  
– übertragung 123, 177, 195, 250, 275  
– – klassisches Modell 253  
– – quantenmechanisches Modell 275  
– – lichtinduzierte 250  
– vertauschung 30, 33, 50, 131  
– verteilung 13, 18, 24, 28, 42, 59, 123, 181  
– wechselwirkung 22, 41, 47, 52, 55, 58  
– zustand 6, 19, 40, 81, 119, 187, 202  
Elektronenspinresonanz 204  
Elliptizität  
– molare 3, 116  
El-Sayed-Regel 232  
Emission  
– Fluoreszenz  
– – stimulierte 176, 182  
– – spontane 176, 184  
– Phosphoreszenz 148, 176, 218, 231  
Enantiomer 107  
Energieaufspaltung 28, 29, 203  
– diagramm 7, 57, 144, 146, 176, 196, 254  
– dichte, spektrale 100, 183  
– dissipation 176  
– lücke (energy gap) 202, 205, 223, 282  
– resonanz 202  
– – annähernde 205, 225

- speicherung 252
  - Energieleiter-Modell 196
  - Energieübertragung 177, 195, 232
    - Austausch- (Dexter-) 237, 246, 248
    - Dipol-Dipol- (Förster-) 237, 248
    - Singulett-Singulett 236, 237
    - Triplett-Triplett- 246
    - soperator 240
  - Englman-Jortner/Lin-Modell 225
  - Entartung 21, 58, 72, 202
    - der Triplettzustände 132
    - symmetriebedingte 72
  - Entwicklung zeitliche 181, 199, 307
  - Eosin 141
  - erlaubt 21, 90
    - elektrisch dipol- 87, 151, 162
    - magnetisch dipol- 90, 152, 161
    - spin- 246, 280
    - symmetrie- 92
  - Erwartungswert 16, 19
  - Euler'sche Formel 15
  - Exciton 141
    - aufspaltung 141, 144, 147
    - CD 159
  - Extinktion 1
  - Extinktionskoeffizient 1, 99, 101, 106, 116, 120
  - Eyring-Theorie 254, 271
- f**
- Fadenpendel 174
  - Faltung 286, 290
  - Fermi's Golden Rule 215, 225, 274, 325
  - Fluktuation, thermische 257, 267
  - Fluoreszenz 5, 176, 187
    - lebensdauer 178, 186
    - lösung 233, 238, 250
    - quantenausbeute 178, 187, 190
    - standard 190
  - Formaldehyd 75
  - Förster Energieübertragung 237
  - Fourier-Transformation 201
  - Franck-Condon Faktoren (FC) 96, 123, 212, 220, 275, 291
  - Franck-Condon Prinzip 93, 230, 303
  - Freie Energie Beziehung
    - lineare 269
    - quadratische 269
- g**
- Gauß-Funktion 290
  - Gauß-Typ Orbital (GTO) 56
  - g-Faktor 108
  - Grenzstruktur 53
  - Gruppenorbitale, symmetrieadaptierte 76
  - Gruppenschwingung 39
  - Gruppentheorie 61
- h**
- Halbwertsbreite 199
  - Hamilton-Operator 17, 18, 24, 119, 307
    - Schwingungs- 35
    - Symmetrie 75
    - Ein-Elektronen- 42, 45
    - Viel-Elektronen 51
    - zeitabhängiger 81
    - Stör- 84, 123
  - Hartree-Fock-Verfahren 49
  - Hartree-Verfahren 48
  - Heisenberg'sche Unschärferelation 12, 36, 186, 198
  - Hexahelicen 107, 116
  - Hückel Methode 45
    - Extended 47
- i**
- Impuls 31
  - Infrarotspektroskopie 6, 13, 39
  - Innere Sphäre 252, 253, 270, 277
  - Intensität, 1
    - Strahlungs- 1, 89, 101
    - Banden- 2, 99, 178
    - – „geborgte“ oder „gestohlene“ 126, 138
  - Internal Conversion (IC) 176, 195, 197, 294, 301
  - Intersystem Crossing (ISC) 177, 195, 231
  - Invertiertes Gebiet 269, 299, 300
  - Ionisierungspotenzial 47, 50, 60
  - Irreversibilität 176, 197, 260
- j**
- Jablonski-Termschema 176, 195, 231
  - Jodbenzol 40
- k**
- Kasha-Regel 197
  - Kohärenz 103, 183, 238, 249
  - kollektiv
    - Lösungsmittelkoordinante 256, 258
    - Lösungsmittelschwingung 288, 321
  - Komplex
    - aktivierter 255
    - Precursor- 251, 255
    - Successor- 251, 257, 324
  - Konfiguration
    - Elektronen- 50, 61, 69
    - Gleichgewichts- 34, 38, 41, 94, 181, 227

- Kern- 34, 41, 159, 167, 251, 273, 278, 315
  - Lösungsmittel- 258, 278, 321
  - Konfigurationswechselwirkung (CI) 55, 58
  - Kontinuum 199, 215, 277, 325
  - Kontinuumsvorstellung 253
  - Koopmans Theorem 59
  - Kopplung 28
    - zweier Elektronenzustände 202, 210, 218
    - senergie 6, 28, 200, 210, 212, 232, 275
    - soperator 128, 209, 215, 240, 277
    - Spin-Bahn- 135, 232
  - Kraftkonstante 96, 181
  - Kreuzungspunkt
    - von Potentialkurven 273, 315, 318
- l**
- Ladungsübertragung 255
  - Lambert-Beer'sches Gesetz 1, 101, 104
  - Landau-Zener-Theorie 272, 315
  - Laser 191
  - Lebensdauer 4, 5, 6, 178, 186, 243
    - natürliche 4, 177, 186, 189
  - Levich-Dogonadze-Modell 288, 290, 321
  - Licht 2
    - circular polarisiertes 3, 12
    - linear polarisiertes 2
    - streuung 6
    - verstärkung 190
  - Lin-Modell 225
  - Linearkombination 24, 28, 82
  - Linienkontur 199
    - funktion 255, 287
  - Löschung 251
    - Fluoreszenz- 5, 175, 244, 251, 280
- m**
- Marcus-Formel 268
  - Marcus-invertiertes Gebiet 269, 272, 299
  - Marcus-Levich-Jortner Gleichung 278, 294, 296
  - Marcus-Theorie 253
  - Materiewelle 11, 15
  - Matrizelement 88, 183, 212
  - Mehr-Determinanten-Methode 54
  - Mehr-Elektronen-System 21
  - Mehr-Elektronen-Verfahren 49
  - Mesomerie 53
  - Methylenblau 141
  - Methylviologen 251
  - Mischung von Zuständen 119, 132
  - Molekül
    - aggregate 141
    - orbitale 29, 41, 54
    - schwingungen 34, 40
    - symmetrie 57
  - Moment
    - magnetisches 33, 133, 156
    - elektrisches Übergangs- 88, 99, 116, 133, 140, 151
    - magnetisches Übergangs- 116, 151
  - Monochromasie 100, 186
  - Morse-Potenzial 37, 94
  - Multikonfigurations-SCF-Verfahren 55
  - Multiplizität 32, 132
  - Multipol
    - näherung 87, 89, 109, 162
    - entwicklung 160, 162
- n**
- $n \rightarrow \pi^*$ -Übergang 127
  - NaCl 315
  - nicht-adiabatisch 272, 318
  - n-Orbital 41
  - Normalkoordinate 39, 94, 123, 128, 212
  - Normalschwingung 39
  - Normierung 19
  - nuclear tunnelling 300
  - Nullpunktsschwingung 26, 97, 214, 220
- o**
- Oktantenregel 166
  - Operator 16, 18
    - Dipol- 144, 218
    - Energie- 16, 18, 20, 72, 128, 315
    - Hamilton- 17, 18, 24, 75, 85, 119, 123, 278, 307
    - – für Schwingungen 35
    - – Einelektronen- 45, 48
    - – Mehrelektronen- 51
  - hermitescher 19
  - kernkinetischer 209
  - elektronischer Kopplungsoperator 240, 276, 280
  - Schwingungskopplungs- 128
  - Spin-Bahn-Kopplungs- 32, 134, 135, 136, 137
  - Quadrat eines 85
  - Spin- 30, 137
  - Optische Aktivität 107
    - induzierte 150
  - optische Rotationsdispersion (ORD) 107
  - Orbital 21
    - Gruppen-, symmetrieadaptiertes 76
    - Einelektronen- 21, 44
    - Mehrelektronen- 50
    - Spin- 51, 53
    - Slater-Type (STO) 56

- Gauss-Type (GTO) 56
- Orbitalenergie 48, 59
- Orthogonalität 19, 131
- Orthogonalsystem 22, 311
  - vollständiges 82
- Ortsfunktion 17, 20, 61
- Oszillator 12
  - gekoppelter 28
  - harmonischer 35, 173, 293, 319
  - klassischer 12, 35, 103
- Oszillatorenstärke 2, 99, 103, 106
- outer sphere 252, 258, 290, 321
- Oxidationspotenzial 250

**p**

- Paracyclophan 142, 144
- Pauli-Prinzip 33, 49, 131
- Permutation 50, 131
- Perylen 98, 188, 250
- Phosphoreszenz 176, 218, 231
- Photoelektronenspektroskopie 59
- Photoreaktion 177
- Photosynthese 252
- Pinacyanol 141
- Planck'sche Strahlungsformel 185
- Planck'sches Wirkungsquantum 11
- Poincaré-Zeit (recurrence time) 175, 204
- Polarisation, des Lichts 2, 107
  - – lineare 2, 90
  - – zirkulare 3, 113
  - eines Übergangs 6, 90, 127
  - eines Photons 12
- Polarisation
  - dielektrische 258, 277
  - elektrische 24
  - Lösungsmittel- 253, 260, 267
  - Orientierungs- 253, 259, 260
  - Atom- 253, 260
  - Elektronen- 253, 259, 260
  - Gleichgewichts- 256, 261
  - Nichtgleichgewichts- 258, 261, 265, 267
- Polarisationsenergie 256, 267, 279, 284
- Polarisationskoordinate 259
- Polarisierbarkeit 150, 159, 164
  - anisotrope 160, 164, 166
  - isotrope 155, 159, 166
- Post-Komplex 251, 256, 271, 275, 321
- Potenzial
  - barriere
  - – Tunnel- 301
  - (hyper)fläche 181, 254, 279, 315
  - kurve, „nested“ 222, 229
  - topf 39, 181

- Präparation
  - von Zuständen 29, 175, 181, 197, 276
- Precursor Komplex 251, 275
- promoting mode 212, 225
- Pseudoskalar 153
- Punktgruppe 63
- Pyridin 42, 92, 139

**q**

- Quadrupolmoment, elektrisches 90, 110
- Quantelung 11, 20
- Quanten
  - ausbeute 4, 177, 187, 190
  - bedingung 13
  - effizienz 177
  - zahl 21, 31
- quantum beats 175

**r**

- Raumladungsdichte 43
- Reabsorption 233
- Reaktions-
  - enthalpie 298
  - – freie 254, 268
  - – freie Standard- 268
  - koordinate 254, 256, 271, 273
- recurrence time (Poincaré-Zeit) 175, 204
- Redoxpotenzial 251
- Redoxreaktion 253, 256, 268
  - Photo- 195, 250
- Reduktionspotenzial 250
- Reorganisationsenergie 275, 288
  - inner-sphere 270, 271, 295
  - outer-sphere (Lösungsmittel) 258, 259, 260, 266, 268
  - Berechnung 260
  - – für 2 Ionen 266
  - – für 2 Kugeln 265
- Rhodamin 176, 246
- Rosenfeld-Gleichung 116
- Rotatorstärke 4, 116, 150, 163
- Ruthenium-trisbipyridyl-Komplex 251

**s**

- Schoenflies Symbole 64
- Schrödingergleichung 20, 173
  - zeitabhängige 15, 81
  - zeitunabhängige 17, 18, 20
- Schweratomeffekt 135
- Schwingung 6, 12, 14, 94
  - erzwungene 103
  - harmonische 15, 35, 173, 220, 291
  - Molekül-, kollektive 283, 294, 303
  - Gruppen- 39

- Lösungsmittel-, kollektive 276, 281, 288, 321
- Normal- 39, 95
- Schwingungs-
  - bild zweier linearer Dipole 158
  - funktion 14, 28, 35, 95, 218, 283
  - – vollständiger Satz von 38, 40, 189
  - gleichung, allgemeine 14
  - kopplung 123, 128, 174, 213
  - überlappung 96, 97, 218, 293
  - zustand, Kern- 36, 40, 94, 197, 207, 210, 296
- Sektorenregeln 154, 164
- Selbstaustauschreaktion 254, 257, 267, 271, 289
- Self Consistent Field (SCF)-Verfahren 48
- Sensibilisator 233
- Singulett-Zustand 32, 133, 137, 231
- Slaterdeterminante 49, 50, 132
- Slater-Type-Funktionen (STO) 56
- Spektrum 1, 61, 100, 102, 106, 11
  - Absorptions- 3, 5, 7, 100, 102, 103, 106, 127, 142, 187, 245
  - Emissions- 4, 189, 233, 241, 243, 245
  - CD- 4
  - Charge transfer- 266
  - Banden- 4
  - Fluoreszenz- 5, 178, 187, 188, 244
  - Photoelektronen- 60
  - Infrarot (IR)- 6, 39
  - Raman- 6
  - Linien- 6, 7
- Spiegelbildsymmetrie 5, 187, 246
- Spin 13, 14, 30, 32
  - funktion 30, 33, 52, 131
  - operator 30, 137
  - moment 33
  - eigenwertsgleichung 32, 131
  - koordinaten 30, 131
  - quantenzahl 32
  - zustand 30, 131, 236
- Spin-Bahn-Kopplung (spin-orbit-coupling) 32, 133, 134, 231
- Spiran 159
- statistical limit 215
- Stokes Shift 187, 221, 227
- Störoperator
  - des elektromagnetischen Wechselfelds 84, 182
  - für die optische Aktivität 109
- Störung 23, 24, 81, 214
  - asymmetrische 150, 155, 160
  - pseudoskalare 153, 160
  - zeitabhängige 24, 86
  - zeitunabhängige 110
- Störungstheorie
  - 1. Ordnung 121
  - 2. Ordnung 123
  - zeitabhängige 81
  - zeitunabhängige 119
- Strahlungsdichte, spektrale 185
- Strahlungsformel, Planck'sche 185
- Strickler-Berg-Formel 189, 193
- Successor Komplex 251, 257, 324
- Symmetrie 47, 61, 128
  - element 64
  - operation 64
- t**
  - Temperatur, negative 190
  - Termschema 7, 57, 149, 176
  - Tetraazaspiropyran 108
  - Thionin 141, 142
  - Trajektorie 315
  - Triphenylmethan 141
  - Triplet-Zustand 32, 58, 132, 137, 186, 231, 246
  - Triptycen 159
  - Trivialmechanismus 233
  - Tunneln 229, 300
- u**
  - Übergang
    - erlaubter 2
    - horizontaler 218
    - schwingungsinduzierter 123
    - strahlungsloser 7
    - verbotener 2, 126
    - – Schwingungs- 99
    - – Spin- 92, 247
    - – Symmetrie- 92, 130
    - – thermisch 266
    - – Überlappungs- 92
    - Charge-transfer- 265
    - Singulett-Triplett- 130
  - Übergangsdipolmoment 88, 92, 97, 100, 102, 133, 145, 237, 240
  - Übergangswahrscheinlichkeit 4
    - Dipolnäherung 91, 102, 312
    - für optische Aktivität 115
    - als Einsteinkoeffizienten 182
    - und Lebensdauer 186
    - Modell von Robinson-Frosch 208
    - Modell von Englmann-Jortner und Lin 227
    - bei Energieübertragung 247

- bei Elektronenübertragung
- – halbklassisches Modell v. Landau-Zener 272, 315
- – quantenmechanisches Modell mit Fermi's Golden Rule 281, 282, 290, 295
- – Einfluss der Reaktionsenthalpie 297
- Tunnel- 301, 322, 324
- Übergangszustand 255, 261, 271
- Überlappungsintegral
  - von elektronischen Funktionen 46, 56
  - von Schwingungsfunktionen 96, 213, 292
- Unschärferelation, Heisenberg'sche 12, 36, 186, 198
- Ununterscheidbarkeit 50
  
- v**
- Valence Bond (VB) 53
- Valenzstruktur 53
- van der Waals-Kraft 141
- Variationsprinzip der Quantenmechanik 42
- Vektorpotenzial 16, 84, 182
- Vertauschungsklammer 31
- Verteilungsfunktion 18, 288
- vibrational Relaxation 176, 197
  
- w**
- Wärmebad 196, 207
- Wasserstoffatom 17, 20, 21, 40, 91
  
- Welle
  - stehende 12, 15
- Wellenfunktion 11, 34, 122
  - symmetrisch gegen Elektronenvertauschung 50
  - antisymmetrisch gegen Elektronenvertauschung 50
- Wellenvektor 14
- Welle-Teilchen-Dualismus 13
- Wirkungsquantum, Planck'sches 11
- Wolfsberg-Helmholtz-Gleichung 47
  
- z**
- Zustand 20
  - Anregungs- 25, 54, 74, 81, 142, 171, 176, 181, 195, 276
  - – Symmetrie 74
  - Eigen- 173, 174, 203
  - Misch- 119, 127
  - Nicht-Eigen- 173, 175, 199, 309
  - Spin- 30, 32, 131, 136, 236
  - „reiner“ 81, 173
  - vibronischer 93, 177, 209, 213, 282
- Zustandsdichte 216, 238, 277
- Zustandsraum 11, 41, 83, 128
  - vollständiger 22
  - unvollständiger 26
- Zustandssumme 226, 282
- Zweielektronensystem 33