

## Stichwortverzeichnis

### **Symbole**

1,3-Butadien 196  
1,3-Dimethylallen 204  
2,3-Pentadien 204  
2-Deuterobutan 208  
3-Methylheptan 208  
589 nm-Natriumlinie 175

### **A**

Absorption 47, 87  
Absorptions- und Emissionsübergänge  
45  
Absorptionsindex 87  
Absorptionskontinuum 191  
Absorptivität 47  
Adenin 197  
Ammoniak,  $\text{NH}_3$  222  
Ammoniumnatriumtartrat 204  
Androstan 208  
anharmonische Kraftkonstante 67  
anharmonischer Oszillator 66, 136, 289  
Anharmonizität 72  
Anharmonizitätseffekte 70  
anomale Dispersion 13, 84, 87, 205  
anormaler Zeeman-Effekt 137  
antibindende Orbitale 186  
Anti-Stokes-Raman-Prozess 90, 92, 303  
Assoziativgesetz 221  
assoziierte Legendre-Polynome 109, 113  
asymmetrische Moleküle 205  
asymmetrischer Kreisler 118  
asymmetrischer Rotator 105, 106  
Atomabsorptionsspektroskopie 176

Atomenergieniveau 171  
Atomradius 170  
Atomspektroskopie 175  
Aufbauprinzip 168  
aufeinanderfolgende Anwendungen 221  
Austauschintegral 183  
Austrittsarbeit 6  
Auswahlregel für Absorption 64  
Auswahlregeln XI, 44, 45, 63, 94, 112,  
117, 119, 134, 150, 174, 187, 189,  
195, 217, 299

### **B**

Bahndrehimpuls 127  
Balmer-Serie 135  
Bandenform 84  
Benzol 197, 220  
Benzol- $d_1$  221  
Besetzungsinversion 50  
bindende Orbitale 186  
Bindungsordnung 187  
 $\beta$ -Blatt-Konformation 210  
blauverschoben 202  
Boltzmann-Gleichung 49, 92  
Boltzmann-Verteilung 98, 115  
Born-Oppenheimer-Näherung 94, 180,  
191, 192, 217  
Bracket 135  
Brechung 47, 87  
Brechungsindex 12, 47, 87, 91  
Brewster-Winkelfenster 52  
Brom 69

326 | *Stichwortverzeichnis***C**

$C_{2v}$ -Punktgruppe 221  
 $C_3$ -Operation 226  
 Campher 208, 210  
 Carbonylchromophor 195  
 Carotin 197  
 Cauchy-Integral 88  
 Chandrashekar Raman 88  
 Charakterentafel 227  
 Charles Hermite 60  
 chemische Bindung XII, 179  
 chemische Verschiebung 151, 153  
 Chiralität 203  
 Chloroform 96  
 Chromophor 195  
 Clebsch-Gordan 172, 173  
 $CO_2$  237  
 Coulomb-Integral 182  
 Coulomb'sches Gesetz 126  
 Cytosin 197

**D**

Darstellungen 223  
 De-Broglie-Gleichung 6  
 Detektorrauschen 309  
 diamagnetischer Effekt 153  
 dielektrische Suszeptibilität 298, 300  
 Differenzialoperator 18  
 dipolare Kopplung 208  
 Dipol-Dipol-Wechselwirkung 209  
 dipolerlaubte Übergänge 83  
 Dirac 138, 139  
 disentanglement 306  
 diskrete und schnelle  
     Fourier-Transformation 315  
 dissymmetrische Moleküle 205  
 Domäne 310  
 doppelt entartet 226  
 Drehimpuls XII, 102  
 Drehimpulsoperator 101, 105, 207  
 dreifach entartet 226  
 dritter Hauptsatz der Thermodynamik  
     62

**E**

effektive Kernladung 165, 166  
 Eigenfunktion 80

Eigenwert 19, 111  
 Einstein-Koeffizient 47, 48  
 elektrischer Dipoloperator 206  
 elektrischer Übergangsmoment 3  
 elektrisches Feld 297  
 Elektron-Elektron-Abstoßung 165, 180  
 Elektronenkonfiguration 137  
 Elektronenkorrelation 165  
 elektronenparamagnetische Resonanz  
     143, 146  
 Elektronenspin 136  
 elektronische Dipolstärke 206  
 elektronische Spektren 189  
 elektronische Spektroskopie 179  
 elektronischer Zirkulardichroismus 203  
 Enantiomere 203  
 enantiomere Formen 208  
 Energieeigenwert 107  
 Energieerwartungswert 181  
 Energiezustand 8  
 entartete Zustände 31, 96  
 entgegengesetzte CD-Spektren 208  
 Erwartungswert 19, 90, 288  
 Extinktionskoeffizient 87  
 Exzitonformalismus 209  
 Exzitonmodell 208  
 Exzitonzustand 208

**F**

Farbband 309  
 femtosekundenstimulierte  
     Raman-Streuung 305  
 Fluorchlorbrommethan 204  
 Fluoreszenzenergieniveau 199  
 fluoreszenzmikroskopischen Bildgebung  
     199  
 Fluoreszenzresonanzenergietransfer  
     199  
 Fluoreszenzspektroskopie 199  
 Formaldehyd,  $H_2CO$  195, 221  
 Fourier-Serie 310  
 Fourier-Transformation 310, 313  
 Fourier-Transformationsspektroskopie  
     309  
 Franck-Condon-Faktor 193  
 Franck-Condon-Prinzip 199, 200, 202  
 Franck-Condon-Regeln 191

- free induction decay (FID) 309  
 freier Induktionsabfall 152  
 Frequenzverdopplung 298, 300  
 Frequenzverdopplungsspektroskopie 201  
 FT-IR-Spektroskopie 160
- G**
- Gaslaser 51  
 Gauß'sche Orbitalfunktionen 185  
 Gauß'sches Profil 86  
 gegenseitige Ausschlussregel 237  
 geneigte Potenzialkurve 291  
 gequanteltes Energieniveau 27  
 Gesamtmagnetisierung 309  
 Gesamtpindrehimpuls 172  
 gestörte Wellenfunktion 292  
 Glyceraldehyd 204  
 grün fluoreszierendes Protein 199  
 Gruppe 221  
 Gruppenfrequenz 101  
 Guanin 197  
 Gute Quantenzahlen 171
- H**
- H<sub>2</sub>CO, Formaldehyd 195  
 halbvolle Schale 170  
 Hamilton-Operator 19  
 Händigkeit 203  
 harmonische Analyse 310  
 harmonische Oszillatorwellenfunktion 59  
 harmonische Potenzialfunktion 67  
 harmonischer Oszillator 109, 112  
 Hartree-Fock-Selbstkonsistenzmethode 166  
 Hauptträgheitsmoment 103  
 Heisenberg 138  
 Heisenberg'sche Matrixmechanik 320  
 Heisenberg'sche Unschärferelation 62  
 heiße Bande 69  
 $\alpha$ -helikale Geometrie 210  
 helikale Moleküle 204  
 $\alpha$ -Helix 210  
 He-Ne-Laser 51  
 Hermite und Legendre 128  
 Hermite'sche Differenzialgleichung 58  
 Hermite'sche Polynome 60, 111  
 high spin 198  
 höchstes besetztes Molekülorbital 35, 197  
 Hohlkathodenlampe 176  
 homonukleares zweiatomiges Molekül 187  
 Hund'sche Regel 169, 187, 188  
 Hyperpolarisierbarkeitstensor 298  
 Hyper-Raman-Streuung 298  
 Hyper-Rayleigh-Streuung 298
- I**
- Identitätselement 219, 221  
 Impulserhaltung 300  
 Induktionszerfall 160  
 induziertes Dipolmoment 89  
 Infrarot (IR)-Spektroskopie 101, 309  
 Infrarotabsorptionsspektroskopie 82  
 Interkombination VIII, 200  
 intersystem crossing VIII, 200  
 intrinsische Fluoreszenz 199  
 inverse Operation 221  
 Inversionssymmetrieelement 237  
 Inversionszentrum 219  
 Iodbromid 69  
 Ionisierungsenergie 6, 170  
 Ionisierungspotenzial 170  
 irreduzible Darstellung 207, 224  
 Isotop 69  
 Isotopenspaltung 71
- J**
- J-Kopplung 157  
 Jablonski-Diagramm 199
- K**
- kartesische Koordinaten 106  
 kartesisches Verschiebungs-  
 koordinatensystem 230  
 Kernmagneton 147  
 Kernresonanz 101  
 Kernspin 146  
 Kernspinenergiezustand 143  
 Kernspinresonanzspektroskopie 143, 309

328 | *Stichwortverzeichnis*

- kohärente Anti-Stokes-Raman-Streuung (CARS) 201, 298, 302  
 kohärente nicht lineare Effekte 300  
 kohärenter Strahl 300  
 kollimierter, kohärenter Laserstrahl 304  
 Kollisionsenergieverlust 199  
 Kommutator 21, 106  
 Kommutierung 21  
 Kommutierungseigenschaften 145, 322  
 konjugierte Polyene 35  
 konstruktive und destruktive Interferenz 3  
 Kopplungskonstante 158  
 Kramers-Kronig-Transformation 87  
 Kristallfeldtheorie 198  
 Kronecker-Symbol 29  
 Kugelflächenfunktionen 107, 110, 127, 132
- L**
- L. Pasteur 204  
 Lagrange-Bewegungsgleichung 77  
 LaGuerre-Differenzialgleichung 128  
 LaGuerre-Polynome 130  
 Lambert-Beer'sches Gesetz 47, 176  
 Laplace-Operator 127  
 Larmor-Frequenz 152  
 Laser 50  
 Lebensdauer 84, 85  
 Lichtstreuung 88  
 Ligandenfeldtheorie 198  
 linear polarisiertes Licht 204  
 Lorentz-Bande 85  
 Lorentz-Kraft-Gesetz 149  
 low spin 198  
 Lyman-Serie 135
- M**
- magnetische Quantenzahl 127, 137  
 magnetischer Dipolübergangsoperator 206  
 magnetisches Moment 146  
 Magnetisierung 143, 150, 152  
 magnetogyrisches Verhältnis 148  
 massengewichtete kartesische Verschiebungskordinaten 78  
 Maxwell'sche Gleichungen 1, 2
- mehrdimensionale NMR-Prozesse 297  
 Mehr-Elektronen-System 165  
 Mikrowellenspektren 113  
 Molekülorbital 180  
 Molekülorbitaltheorie 184  
 Morse-Potenzial 66
- N**
- Näherungsmethode 287  
 Natrium-D-Linie 137  
 Natriumdublett 137  
 natürliche Verbreiterung 85  
 Nd:YAG-Laser 98  
 Newtons zweites Bewegungsgesetz 56  
 nicht kohärente, nicht lineare Effekte 298  
 nicht lineare Spektroskopie 297, 306  
 nicht lineare spektroskopische Methode 297  
 nicht lineare Suszeptibilität 201, 202  
 nicht lineare Suszeptibilität dritter Ordnung 302  
 nicht starrer Rotator 136  
 nicht wechselwirkende Spins 155  
 niedrigstes unbesetztes Molekülorbital 35, 197  
 normale Schwingungsmoden 76  
 Normalisierungsbedingung 27  
 Normalkoordinaten 78, 80  
 Normalkoordinatenanalyse 75  
 Nullpunktsenergie 62, 81
- O**
- oblater (abgeflachter) symmetrischer Kreisel 105  
 oblater Rotator 117  
 Observable 19, 78  
 Olefine 196  
 optische Aktivität 203–205  
 optische Rotation 203–205  
 optische Rotationsdispersion (ORD) 88, 204, 205  
 Orbitalnäherung 165  
 Ordnung 221, 224  
 Ordnungszahl 169  
 Orthogonalitätsbedingung 227  
 orthonormale Funktion 319

- orthonormaler Vektorraum 29  
 Orthonormalität 289  
 Östrogen 208
- P**
- parallele Hüllkurve 121  
 paramagnetisch 187  
 Parität 46, 64, 188  
 Paschen-Serie 135  
 Pauli-Ausschließungsprinzip 21  
 Pauli-Prinzip 167, 169  
 Pauli-Spinmatrizen 319, 321  
 Periodensystem 125  
 Phasenanpassungsbedingung 301, 303  
 Phasenanpassungskriterium 301  
 Phenylalanin 198  
 Phosphoreszenz 200  
 photoelektrischer Effekt 1, 6  
 Polarisierbarkeit 89, 202  
 Polarisierbarkeitstensorskomponenten 229  
 Poly-L-Pro(II)-Struktur 210  
 potenzielle Energie 22  
 prolater (gestreckter) symmetrischer Kreisel 105  
 prolater Kreisel 117  
 prolater und oblater symmetrischer Kreisel 116  
 Puls-FT Methode 143, 309  
 Puls-FT-NMR Spektroskopie 160  
 P-Zweig 120
- Q**
- Quadrantenregel 208  
 Quantenkaskadenlaser 35  
 Quantenpunkt 35  
 Q-Zweig 120
- R**
- Racemat 204  
 radiale Verteilungsfunktion 133  
 Radiofrequenzimpuls 309  
 Raman-optische Aktivität (ROA) 211  
 Raman-Prozess 202  
 Raman-Spektroskopie 88, 229  
 Raman-Streuung 69, 236  
 Randbedingungen 26, 27
- Random Coil 210  
 räumliche Quantisierung 111, 140, 145  
 Rayleigh-Streuung 88, 91  
 Rechteckwelle 312  
 reduzierbare Darstellung 231, 232  
 reduzierte Masse 56, 71  
 Reflexion an einer Spiegelebene 219  
 Rekursionsformel 60, 63, 111  
 Resonanz- und Nichtresonanzeffekte 12  
 Resonanz-Raman-Prozess 202  
 Resonanz-Raman-Spektroskopie 93  
 Resonatorstruktur 51  
 richtige Rotationsachse 219  
 Röntgenkristallographie 81  
 Rotation 77, 207  
 Rotationsfreiheitsgrade 232  
 Rotationskonstante 104  
 Rotationsquantenzahl 108  
 Rotations-Raman-Spektrum 104  
 Rotationsreflexionsachse 219, 220  
 Rotations-Schrödinger-Gleichung 105, 125  
 Rotationsschwingungsübergänge 119  
 Rotationsstärke 206  
 Rotationsübergänge 112  
 Rotationswellenfunktion 101  
 rotverschoben 202  
 Rubinlaser 297  
 Rutherford 1  
 Rydberg-Gleichung 9  
 Rydberg-Konstante 128  
 R-Zweig 120
- S**
- schlechte Quantenzahlen 171  
 Schrödinger-Gleichung 23, 55, 234  
 Schrödinger-Gleichung für Rotation 107  
 Schwarzer Körper 3  
 Schwarzkörperstrahlung 1  
 Schwebungsfrequenz 90  
 Schwefelhexafluorid, SF<sub>6</sub> 82  
 Schwefelkohlenstoff, CS<sub>2</sub> 83  
 Schwingungsdephasierung 305  
 Schwingungseigenfrequenz 57  
 Schwingungsfreiheitsgrade 78  
 Schwingungs-Schrödinger-Gleichung 57, 79

330 | *Stichwortverzeichnis*

- Schwingungsspektroskopie 75  
 Schwingungszirkulardichroismus 211  
 second harmonic generation 300  
 sekundäre Strukturmotive 210  
 senkrechte Bandenhülle 121  
 Serienexpansion 294  
 SF<sub>6</sub>, Schwefelhexafluorid 237  
 Singulett 175, 188, 200  
 Singulett-Triplett-Übergang 189, 195  
 Singulettzustand 172  
 skalare Kopplung 157  
 Slater-Determinante 167  
 spektroskopischer Übergang XI  
 sphärische Polarkoordinaten 106, 126  
 sphärische wasserstoffähnliche Orbitale 185  
 sphärischer Rotator 104  
 Spiegelbildüberlagerung 204  
 Spindrehimpuls 144, 145  
 Spin-Gitter-Relaxation 161  
 Spinmatrizen 322  
 Spinmultiplizität 172, 188  
 Spin-Orbit-Kopplung 173  
 Spinpaarungsenergie 169  
 Spinspektroskopie 140  
 Spin-Spin-Kopplung 157, 158  
 Spinwellenfunktion 319  
 Spinzustand 138  
 spontane Raman-Streuung 300  
 Spur 230  
 Stark-Aufspaltung 118  
 starrer Rotator 116  
 stationärer Energiezustand XI, XVI  
 stationärer Zustand 8, 41  
 statistische Thermodynamik 98  
 Stefan-Boltzmann-Gesetz 6  
 Stereochemie 205  
 Stern-Gerlach-Experiment 138  
 stimulierte Emission 44  
 stimulierte Raman-Streuung 305  
 Stokes 90, 91  
 Stokes-Raman-Streuung 305  
 Störungs-Hamilton-Operators 290  
 Störungsmethode 67  
 Störungstheorie 41  
 Streutensor 93  
 Streuung 47  
 Summenfrequenzerzeugung 301  
 Suszeptibilität dritter Ordnung 305  
 Suszeptibilitätstensors dritter Ordnung 304  
 Symmetriedarstellung 218  
 Symmetriegruppe 218  
 Symmetriegruppe C<sub>2v</sub> 227  
 Symmetrioperation 218
- T**
- Teilchen im Kasten (TiK) 24, 290  
 Teilchen im Kasten mit endlichen Energiebarrieren 33  
 Teilchen im zweidimensionalen (2-D)-Kasten 31  
 Teilchen-Wellen-Dualität 5  
 Tensorelemente der Polarisierbarkeit 93  
 Termsymbol 173, 187  
 Testfunktion 26  
 Testosteron 208  
 Tetrachlorethen, C<sub>2</sub>Cl<sub>4</sub> 299  
 Tetramethylsilan (TMS) 154  
 thermisches Ellipsoid 81  
 Thymin 197  
 TiK 24, *siehe auch* Teilchen im Kasten (TiK)  
 Toluol 198  
 Trägheitsmoment 101, 102  
 Trägheitstensor 103  
*trans*-Dichlorethen 237  
 Transformationsmatrix 222, 223  
 Translation 77, 207, 229  
 Translationsfreiheitsgrade 232  
 transversale Relaxation 152  
 Triplett 175  
 Triplettzustand 173, 188, 200  
 tunneln 62, 294
- U**
- Übergang XVI, 8  
 Übergangskopplung 208  
 Übergangsmetall 198  
 Übergangsmoment 44, 63, 93, 95, 234  
 Übergangsoperator 46  
 ungebundenes Teilchen 32

Unsicherheitsprinzip 85  
Uran(VI)-fluorid,  $\text{UF}_6$  82

## V

Valance Shell Electron Pair Repulsion  
Model 101  
Variationsmethode 288  
Vektorraum 20, 287  
Verstärkungsmedium 52  
vibronische Zustände 179  
vibronisches Absorptionsspektrum 189  
Voigt-Funktion 86  
Volumenmagnetisierung 140

## W

Wasser 221  
Wasserstoffatom 125  
Wasserstoffatomübergänge 135  
Weinsäure 204  
Wellenfunktion 18  
Wellenfunktionen für das  $\text{TiK}$  27

Wellenvektor 2, 303  
Wellenzahl 62  
Wien'sches Gesetz 6

## Z

Zeeman-Effekt 137  
zeitabhängige Schrödinger-Gleichung  
20, 295  
zeitabhängige Störung 295  
zeitunabhängige Störungstheorie 289  
Zentrifugaleffekt 116  
Zentrifugalverzerrung 119  
zirkular polarisierte Lichtwellen 204  
zirkular polarisiertes Licht 203  
Zirkulardichroismus (CD) 88, 204, 205  
Zustandssumme 98  
zweiatomige Moleküle 186  
Zwei-Elektronen-Hamilton-Operator  
165  
Zwei-Photonen-Fluoreszenz 201  
Zwei-Photonen-Prozess 93, 95











