

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, 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 Kreisel 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
 β -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

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
 Exzitonenformalismus 209
 Exzitonmodell 208
 Exzitonzustand 208

F

Farbband 309
 femtosekundenstimulierte
 Raman-Streuung 305
 Fluorchlorbrommethan 204
 Fluoreszenzenenergieniveau 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
 Gesamtspindrehimpuls 172
 gestörte Wellenfunktion 292
 Glyceraldehyd 204
 grün fluoreszierendes Protein 199
 Gruppe 221
 Gruppenfrequenz 101
 Guanin 197
 Gute Quantenzahlen 171

H

H₂CO, 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
 α -helikale Geometrie 210
 helikale Moleküle 204
 α -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

- 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 Verschiebungskoordinaten 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

Phasen Anpassungsbedingung 301, 303

Phasen Anpassungskriterium 301

Phenylalanin 198

Phosphoreszenz 200

photoelektrischer Effekt 1, 6

Polarisierbarkeit 89, 202

Polarisierbarkeitstensor komponenten
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

reduzible 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_6 82

Schwefelkohlenstoff, CS_2 83

Schwingungsdephasierung 305

Schwingungseigenfrequenz 57

Schwingungsfreiheitsgrade 78

Schwingungs-Schrödinger-Gleichung
57, 79

Schwingungsspektroskopie 75
 Schwingungszirkulardichroismus 211
 second harmonic generation 300
 sekundäre Struktur motive 210
 senkrechte Bandenhülle 121
 Serienexpansion 294
 SF₆, 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_{2v} 227
 Symmetrieoperation 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, C₂Cl₄ 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
 tunnellen 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, 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 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

