

Quantenchemische Charakterisierung eines trigonalen Cu(I)-Komplexes mit einem anionischen Carben- und einem Diketophenanthrolin-Liganden

Bachelorarbeit

Vorgelegt von

Yezi Xue

Angefertigt am

Institute für Theoretische Chemie und Computerchemie
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

05. 01. 2024

Erstgutachterin: Prof. Dr. Christel Marian
Zweitgutachter: Prof. Dr. Christian Ganter

Erklärung

Hiermit versichere ich, dass ich die Bachelorarbeit selbständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe.

Düsseldorf, den 05. 01. 2024

Yezi Xue

Danksagung

Ich möchte mich herzlich bei Prof. Dr. Christel Marian bedanken. Sie sind nicht nur äußerst professionell, sondern auch außergewöhnlich freundlich und ein Vorbild für mich.

Ein besonderer Dank geht an Jasper Guhl, der die Energie und Kreativität verkörpert. Vielen Dank für die Hilfe bei der Integration in die Gruppe. Ihre Bereitschaft, mir jederzeit Rede und Antwort zu stehen, hat das Schreiben meiner Arbeit sehr erleichtert.

Ebenfalls danke ich Prof. Dr. Christian Ganter, der als mein Zweitgutachter fungierte.

Ich danke allen Mitgliedern des Arbeitskreises für ihre freundliche und unterstützende Umgebung. Ich bin dankbar, meine Bachelorarbeit in einer solch angenehmen Atmosphäre abschließen zu können.

Ebenfalls bedanke ich mich herzlich bei meiner Mutter, meinem Ehemann und meinen Freunden für ihre Unterstützung.

Schließlich bedanke ich mich auch bei mir selbst für meine anhaltende Entschlossenheit. Trotz Herausforderungen habe ich nicht aufgegeben.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Theorie	6
2.1	Angeregte Zustände	6
2.2	Geometrieoptimierung	7
2.3	Nullpunktsschwingungsenergie	8
2.4	DFT	9
2.5	Solvatationsmodelle	11
2.6	Dispersionseffekt	13
2.7	DFT/MRCI	14
2.8	Effektive Rumpfpotentiale	15
3	Programme und technische Parameter der Rechnungen	16
4	Resultate	17
4.1	Grundzustand	17
4.1.1	Geometrien	17
4.1.2	Angeregte Zustände	19
4.1.3	Absorption	23
4.2	Angeregter Zustand	26
4.2.1	Geometrien	26
4.2.2	Angeregte Zustände	36
5	Diskussion	44
6	Anhang	45
6.1	Dipolmomente	53
6.2	Koordinaten	61
6.3	Differenzdichten	101

Abkürzungsverzeichnis

- An6DAC-Cu-5,6-Dikphen** anionisches sechsgliedriges N,N-Diamidocarben-Cu(I)-5,6-Diketophenanthrolin. [iv](#), [v](#), [3–5](#), [17](#), [20](#), [28](#), [33](#), [34](#), [36](#), [44](#)
- IC** interne Konversion engl.: internal conversion. [iv](#), [3](#), [6](#)
- ISC** Intersystem Crossing. [iv](#), [2–4](#), [6](#)
- rISC** reverse Intersystem Crossing. [iv](#), [2–4](#), [6](#)
- GZ_Ortho** Grundzustand von orthogonalem Konformer. [iv](#), [v](#), [x](#), [xii](#), [17–22](#), [24–26](#), [29](#), [36](#), [41](#), [42](#), [63](#)
- GZ_Planar** Grundzustand von planarem Konformer. [iv](#), [v](#), [x](#), [xi](#), [17–20](#), [24–26](#), [28–30](#), [35](#), [36](#), [39](#), [40](#), [61](#)
- OLEDs** organische Leuchtdioden. [1](#), [2](#)
- TADF** thermisch aktivierte verzögerte Fluoreszenz. [1](#), [2](#), [4](#)
- SOC** Spin-Bahn-Kopplung. [2](#), [4](#), [6](#)
- HOMO** engl.: Highest Occupied Molecular Orbital. [2](#), [18](#), [23](#), [37](#)
- LUMO** engl.: Lowest Unoccupied Molecular Orbital. [2](#), [18](#), [23](#), [37](#)
- NHC** N-heterozyklisches Carben. [3](#), [17](#), [18](#), [23](#), [24](#), [26](#), [27](#), [37](#)
- MC** metallzentriert engl.: Metal-Centered. [4](#)
- LLCT** engl.: Ligand-to-Ligand Charge Transfer. [4](#), [23](#), [24](#), [26](#), [36–38](#)
- MLCT** engl.: Metal-to-Ligand Charge Transfer. [4](#), [23](#), [24](#), [36–38](#)
- ZPVE** Nullpunktsschwingungsenergie. [8](#), [19](#)
- ZPVC** Nullpunktsschwingungskorrektur. [9](#)
- DFT** Dichtefunktionaltheorie. [9–11](#), [13](#), [14](#)
- QM** Quantenmechanik. [12](#)
- MM** Molekülmechanik. [12](#)
- PCM** engl.: Polarizable Continuum Model. [12](#)
- COSMO** engl.: Conductor-like Screening Model. [12](#)

SAS engl.: Solvent-Accessible Surface. [12](#)

MRCI Multireferenz-Konfigurationswechselwirkung. [14](#)

ECPs effektive Rumpfpotentiale, engl.: effective core potential. [15](#)

Dikphen 5,6-Diketophenanthrolin. [24](#)

LC Ligandenzentriert engl.: Ligand-Centered. [26](#), [36–38](#)

PJTE Pseudo-Jahn-Teller-Effekt. [32](#)

Abbildungsverzeichnis

1	Vergleich von zwei anionischen N,N-Diamidinocarben-Cu(I)-Komplexen mit unterschiedlichen Liganden: Links ist An6DAC-Cu-bis-(4-Formylpyridin) und rechts An6DAC-Cu-5,6-Dikphen dargestellt.	5
2	Jablonski-Diagramm 1: Absorption; 2,6: IC; 3: ISC; 4: rISC; 5: Fluoreszenz; 7: Phosphoreszenz	6
3	Grundzustand des planaren Konformers von An6DAC-Cu-5,6-Dikphen	17
4	Grundzustand des orthogonalen Konformers von An6DAC-Cu-5,6-Dikphen	17
5	Charakterisierung der Elektronenübergänge für alle Grundzustandsgeometrien. Die DFT/MRCI-Anregungsenergien [eV] beziehen sich auf die Grundzustandsenergie des GZ_Ortho Konformers. Singulettenergien sind durch waagerechte Balken, Triplettenergien durch Rauten symbolisiert.	21
6	Charakterisierung der Elektronenübergänge für alle Grundzustandsgeometrien ohne Grundzustand, Anregungsenergien zwischen 2,0 und 3,5 eV. Die DFT/MRCI-Anregungsenergien [eV] beziehen sich auf die Grundzustandsenergie des GZ_Ortho Konformers. Singulettenergien sind durch waagerechte Balken, Triplettenergien durch Rauten symbolisiert.	22
7	Vergleich der Absorptionsspektren der GZ_Planar und GZ_Ortho	24
8	GZ_Planar relevante Differenzdichten (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	25
9	GZ_Ortho relevante Differenzdichten. Weitere Erläuterungen siehe Abb.8.	25
10	S_{LLCT} -Geometrie des planaren Konformers von An6DAC-Cu-5,6-Dikphen	28
11	S_{LLCT} -Geometrie des orthogonalen Konformers von An6DAC-Cu-5,6-Dikphen	28
12	Differenzdichte der S1-Zustandes an der planaren S_{MLCT1} -Geometrie (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	33
13	Differenzdichte der S1-Zustandes an der planaren S_{MLCT2} -Geometrie (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	33
14	S_{MLCT1} -Geometrie des planaren Konformers von An6DAC-Cu-5,6-Dikphen.	33

15	S_{MLCT2} -Geometrie des planaren Konformers von An6DAC-Cu-5,6-Dikphen.	33
16	Differenzdichte der S1-Zustandes an der orthogonalen S_{MLCT1} -Geometrie (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	34
17	Differenzdichte der S1-Zustandes an der orthogonalen S_{MLCT2} -Geometrie (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	34
18	S_{MLCT1} -Geometrie des orthogonalen Konformers von An6DAC-Cu-5,6-Dikphen.	34
19	S_{MLCT2} -Geometrie des orthogonalen Konformers von An6DAC-Cu-5,6-Dikphen.	34
20	T_{npi} -Geometrie des planaren Konformers von An6DAC-Cu-5,6-Dikphen	36
21	Charakterisierung der Elektronenübergänge für alle planaren angeregten Zustände-Geometrien. Die DFT/MRCI-Anregungsenergien [eV] beziehen sich auf die Grundzustandsenergie des GZ_Planar Konformers. Singulettenergien sind durch waagerechte Balken, Triplettenergien durch Rauten symbolisiert.	39
22	Charakterisierung der Elektronenübergänge für alle planaren angeregten Zuständegeometrien Ohne Grundzustand, Anregungsenergien zwischen 1,5 und 3,5 eV. Die DFT/MRCI-Anregungsenergien [eV] beziehen sich auf die Grundzustandsenergie des GZ_Planar Konformers. Singulettenergien sind durch waagerechte Balken, Triplettenergien durch Rauten symbolisiert.	40
23	Charakterisierung der Elektronenübergänge für alle orthogonalen angeregten Zuständegeometrien. Die DFT/MRCI-Anregungsenergien [eV] beziehen sich auf die Grundzustandsenergie des GZ_Ortho Konformers. Singulettenergien sind durch waagerechte Balken, Triplettenergien durch Rauten symbolisiert.	41
24	Charakterisierung der Elektronenübergänge für alle orthogonalen angeregten Zuständegeometrien Ohne Grundzustand, Anregungsenergien zwischen 1,5 und 3,5 eV. Die DFT/MRCI-Anregungsenergien [eV] beziehen sich auf die Grundzustandsenergie des GZ_Ortho Konformers. Singulettenergien sind durch waagerechte Balken, Triplettenergien durch Rauten symbolisiert.	42

25	Differenzdichten an der planaren Grundzustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Singulett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	101
26	Differenzdichten an der planaren Grundzustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Triplett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	102
27	Differenzdichten an der orthogonalen Grundzustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Singulett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	103
28	Differenzdichten an der orthogonalen Grundzustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Triplett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	104
29	Differenzdichten an der planaren S_{LLCT} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Singulett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	105
30	Differenzdichten an der planaren S_{LLCT} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Triplett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	106
31	Differenzdichten an der orthogonalen S_{LLCT} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Singulett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	107
32	Differenzdichten an der orthogonalen S_{LLCT} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Triplett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	108

33	Differenzdichten an der planaren T_{LLCT} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Singulett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	109
34	Differenzdichten an der planaren T_{LLCT} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Triplett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	110
35	Differenzdichten an der orthogonalen T_{LLCT} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Singulett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	111
36	Differenzdichten an der orthogonalen T_{LLCT} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Triplett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	112
37	Differenzdichten an der planaren S_{MLCT1} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Singulett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	113
38	Differenzdichten an der planaren S_{MLCT1} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Triplett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	114
39	Differenzdichten an der orthogonalen S_{MLCT1} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Singulett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	115
40	Differenzdichten an der orthogonalen S_{MLCT1} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Triplett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	116

41	Differenzdichten an der planaren S_{MLCT2} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Singulett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	117
42	Differenzdichten an der planaren S_{MLCT2} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Triplett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	118
43	Differenzdichten an der orthogonalen S_{MLCT2} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Singulett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	119
44	Differenzdichten an der orthogonalen S_{MLCT2} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Triplett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	120
45	Differenzdichten an der planaren T_{MLCT1} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Singulett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	121
46	Differenzdichten an der planaren T_{MLCT1} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Triplett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	122
47	Differenzdichten an der orthogonalen T_{MLCT1} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Singulett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	123
48	Differenzdichten an der orthogonalen T_{MLCT1} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Triplett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	124

49	Differenzdichten an der planaren T_{MLCT_2} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Singulett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	125
50	Differenzdichten an der planaren T_{MLCT_2} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Triplett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	126
51	Differenzdichten an der orthogonalen T_{MLCT_2} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Singulett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	127
52	Differenzdichten an der orthogonalen T_{MLCT_2} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Triplett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	128
53	Differenzdichten an der planaren T_{npi} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Singulett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	129
54	Differenzdichten an der planaren T_{npi} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Triplett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.	130

Tabellenverzeichnis

1	Ausgewählte Bindungswinkel der GZ_Planar und GZ_Ortho Konformere	18
2	Ausgewählte Bindungslängen der GZ_Planar und GZ_Ortho Konformere	18
3	Der vertikale Energievergleich der Konformere	19
4	Vergleich der Absorptionsspektren	25
5	Vergleich der elektronischen Übergänge für planare und ortho Konformere	26
6	Vergleich ausgewählter Bindungswinkel zwischen der S_{LLCT} -Geometrie und der Grundzustandsgeometrie der planaren und orthogonalen Konformere	27
7	Vergleich ausgewählter Bindungslängen zwischen der S_{LLCT} -Geometrie und der Grundzustandsgeometrie der planaren und orthogonalen Konformere	27
8	Vergleich ausgewählter Bindungswinkel zwischen der S_{MLCT1} -Geometrie, S_{MLCT2} -Geometrie und der Grundzustandsgeometrie der planaren und orthogonalen Konformerer	30
9	Vergleich ausgewählter Bindungslängen zwischen der S_{MLCT1} -Geometrie, S_{MLCT2} -Geometrie und der Grundzustandsgeometrie der planaren und orthogonalen Konformerer	31
10	Vergleich ausgewählter Bindungswinkel zwischen der planaren T_{npi} -Geometrie und der GZ_Planar-Konformerer	35
11	Vergleich ausgewählter Bindungslängen zwischen der planaren T_{npi} -Geometrie und der GZ_Planar-Konformerer	35
12	Fluoreszenzrate und weitere Eigenschaften für verschiedene Zustände in Planar und Ortho-Konfigurationen	43
13	Energiedifferenzen zwischen S1 und T1 für planare und orthogonale Konformationen	45
14	Energiedifferenzen, Oszillatorstärken, Anregungen und Charaktere an der planaren Grundzustandsgeometrie	45
15	Energiedifferenzen, Oszillatorstärken, Anregungen und Charaktere an der orthogonalen Grundzustandsgeometrie	46
16	Energiedifferenzen, Oszillatorstärken, Anregungen und Charaktere an der planaren S_{LLCT} Zustandsgeometrie	46
17	Energiedifferenzen, Oszillatorstärken, Anregungen und Charaktere an der planaren T_{LLCT} Zustandsgeometrie	47
18	Energiedifferenzen, Oszillatorstärken, Anregungen und Charaktere an der planaren S_{MLCT1} Zustandsgeometrie	47

19	Energiedifferenzen, Oszillatorstärken, Anregungen und Charaktere an der planaren T_{MLCT1} Zustandsgeometrie	48
20	Energiedifferenzen, Oszillatorstärken, Anregungen und Charaktere an der planaren S_{MLCT2} Zustandsgeometrie	48
21	Energiedifferenzen, Oszillatorstärken, Anregungen und Charaktere an der planaren T_{MLCT2} Zustandsgeometrie	49
22	Energiedifferenzen, Oszillatorstärken, Anregungen und Charaktere an der planaren T_{npi} Zustandsgeometrie	49
23	Energiedifferenzen, Oszillatorstärken, Anregungen und Charaktere an der orthogonalen S_{LLCT} Zustandsgeometrie	50
24	Energiedifferenzen, Oszillatorstärken, Anregungen und Charaktere an der orthogonalen T_{LLCT} Zustandsgeometrie	50
25	Energiedifferenzen, Oszillatorstärken, Anregungen und Charaktere an der orthogonalen S_{MLCT1} Zustandsgeometrie	51
26	Energiedifferenzen, Oszillatorstärken, Anregungen und Charaktere an der orthogonalen T_{MLCT1} Zustandsgeometrie	51
27	Energiedifferenzen, Oszillatorstärken, Anregungen und Charaktere an der orthogonalen S_{MLCT2} Zustandsgeometrie	52
28	Energiedifferenzen, Oszillatorstärken, Anregungen und Charaktere an der orthogonalen T_{MLCT2} Zustandsgeometrie	52
29	Dipolmomente in [a.u.] an der planaren Grundzustandsgeometrie . .	53
30	Dipolmomente in [a.u.] an der orthogonalen Grundzustandsgeometrie	53
31	Dipolmomente in [a.u.] an der planaren S_{LLCT} Zustandsgeometrie .	54
32	Dipolmomente in [a.u.] an der planaren T_{LLCT} Zustandsgeometrie .	54
33	Dipolmomente in [a.u.] an der planaren S_{MLCT1} Zustandsgeometrie	55
34	Dipolmomente in [a.u.] an der planaren T_{MLCT1} Zustandsgeometrie	55
35	Dipolmomente in [a.u.] an der planaren S_{MLCT2} Zustandsgeometrie	56
36	Dipolmomente in [a.u.] an der planaren T_{MLCT2} Zustandsgeometrie	56
37	Dipolmomente in [a.u.] an der planaren T_{npi} Zustandsgeometrie . .	57
38	Dipolmomente in [a.u.] an der orthogonalen S_{LLCT} Zustandsgeometrie	57
39	Dipolmomente in [a.u.] an der orthogonalen T_{LLCT} Zustandsgeometrie	58
40	Dipolmomente in [a.u.] an der orthogonalen S_{MLCT1} Zustandsgeometrie	58
41	Dipolmomente in [a.u.] an der orthogonalen T_{MLCT1} Zustandsgeometrie	59
42	Dipolmomente in [a.u.] an der orthogonalen S_{MLCT2} Zustandsgeometrie	59
43	Dipolmomente in [a.u.] an der orthogonalen T_{MLCT2} Zustandsgeometrie	60
44	Koordinaten des Minimums für GZ_Planar-Geometrie	61

45	Koordinaten des Minimums für GZ_Ortho-Geometrie	63
46	Koordinaten des Minimums für planare S_{LLCT} -Geometrie	66
47	Koordinaten des Minimums für orthogonale S_{LLCT} -Geometrie	68
48	Koordinaten des Minimums für planare T_{LLCT} -Geometrie	71
49	Koordinaten des Minimums für orthogonale T_{LLCT} -Geometrie	74
50	Koordinaten des Minimums für planare S_{MLCT1} -Geometrie	76
51	Koordinaten des Minimums für orthogonale S_{MLCT1} -Geometrie	79
52	Koordinaten des Minimums für planare S_{MLCT2} -Geometrie	81
53	Koordinaten des Minimums für orthogonale S_{MLCT2} -Geometrie	84
54	Koordinaten des Minimums für planare T_{MLCT1} -Geometrie	86
55	Koordinaten des Minimums für orthogonale T_{MLCT1} -Geometrie	89
56	Koordinaten des Minimums für planare T_{MLCT2} -Geometrie	92
57	Koordinaten des Minimums für orthogonale T_{MLCT2} -Geometrie	94
58	Koordinaten des Minimums für T_{npi} -Geometrie	97

1 Einleitung

In den letzten Jahren hat sich die Technologie der organischen Leuchtdioden, auch bekannt als **OLEDs**, als Display-Technologie sehr schnell entwickelt.

Die ersten praktischen **OLEDs** wurden zufällig von C. W. Tang [1], einem renommierten Wissenschaftler der Kodak Laboratories, entdeckt, der zusammen mit seinem Kollegen Steve Van Slyke begann, sie zu erforschen und einen Niederspannungs-Emitter mit hocheffizienter doppelschichtiger organischer Struktur entwickelte. Danach begannen er und sein Kollege mit der Forschung und entwickelten eine hocheffiziente organische Niederspannungs-Doppelschicht-Emitterstruktur, und in den 90er Jahren entwickelte die Universität Cambridge erfolgreich organische lichtemittierende Polymerelemente und löste das Problem der kurzen Lebensdauer und der geringen Stabilität von **OLEDs**. **OLEDs** haben viele Vorteile: Sie benötigen keine Hintergrundbeleuchtung, so dass schwarze oder andere dunkle Farben sehr deutlich dargestellt werden können, die Farben sind sehr leuchtend, der Betrachtungswinkel ist sehr groß, und sie sind gleichzeitig leicht zu formen. Der erste gekrümmte OLED-Bildschirm wurde zum Beispiel 2013 von LG hergestellt [2].

Die Grundstruktur einer OLED besteht aus einer Kathode, einer Lochtransport-schicht, einer lichtemittierenden Schicht, einer Elektronentransportschicht und einer Anode. Bei der entsprechenden Spannung verbinden sich Anoden-löcher und Kathodenelektronen in der lichtemittierenden Schicht zu einem Exziton, dem gebundenen Zustand von Löchern und Elektronen. Durch weitere Rekombination der Exzitonen wird das Molekül in den angeregten Zustand versetzt. Dieser angeregte Zustand zerfällt und wird von der Emission von Photonen begleitet, deren Frequenz im sichtbaren Bereich liegt. Die Anregung führt entweder zur Bildung eines Singulett- oder eines Triplett-Zustands. Statistisch gesehen ist das Verhältnis der gebildeten Singulett- und Triplett-Zustände 1:3, d. h. 25 % Singulett- und 75 % Triplett-Zustände. [3] Der Zerfall des niedrigsten Singulett-Zustands, S_1 , zum Grundzustand ist sehr schnell, etwa 10^{-8} s, und dieser Prozess emittiert Fluoreszenz, während der entsprechende Zerfall des niedrigsten Triplett-Zustands, T_1 , zum Grundzustand Phosphoreszenz emittiert, ein Prozess, der etwa 10^{-6} s dauert. Die Fluoreszenz wird mit etwa der 100-fachen Geschwindigkeit der Phosphoreszenz emittiert.

Die in dieser Arbeit verwendete Schlüsseltechnologie ist thermisch aktivierte verzögerte Fluoreszenz (**TADF**), die Kerntechnologie der **OLEDs** der dritten Generation. Die erste Generation von **OLEDs** nutzt den Zerfall von Exzitonen aus dem S_1 Singulett-Zustand in den Grundzustand, wobei 25% der Exzitonen Photonen durch prompte Fluoreszenz emittieren. Im Gegensatz dazu erreicht die zweite Generation von

OLEDs durch eine extrem hohe Rate des Intersystem Crossings (**ISC**) - etwa 10^{12} bis 10^{13} pro Sekunde - den Übergang von 25% der S1-Exzitonen in den Triplett-Zustand T1. Danach emittieren 100% der Exzitonen Photonen durch Phosphoreszenz, was die effektive Nutzung aller Exzitonen ermöglicht. Allerdings ist die Phosphoreszenzrate deutlich geringer als die Fluoreszenzrate. **TADF**-Materialien, also **OLEDs** der dritten Generation, können durch thermische Aktivierung die Exzitonen, die sich im niedrigsten Triplett-Zustand T1 befinden, durch Reverse Intersystem Crossing (**rISC**) in den Singulett-Zustand S1 überführen. Diese Exzitonen zerfallen dann in den Grundzustand und emittieren zunächst eine prompte und dann eine verzögerte Fluoreszenz mit ähnlicher Wellenlänge. Theoretisch können mit **TADF** 100% der Exzitonen in Fluoreszenz zerfallen, was die Effizienz der Quantenausbeute erheblich verbessert.

Es gibt mehrere Voraussetzungen und Schlüsselfaktoren für die Verwirklichung der **TADF**-Technik: eine geringe Energiedifferenz zwischen T1 und S1, eine geeignete Spin-Bahn-Kopplung (**SOC**), eine größere **rISC**-Rate und so weiter.

Der Energieunterschied zwischen dem Singulett-Zustand S_1 und dem Triplett-Zustand T_1 ΔE_{ST} muss sehr klein sein (typischerweise weniger als 0,1 eV [4]). Hier führen wir das Konzept der Donor-Akzeptor-Struktur ein: Der Donor ist elektronenreich, was sich auf das **HOMO** auswirkt, und ein starker Donor führt zu einem höheren **HOMO**-Energieniveau, was bedeutet, dass Elektronen leichter vom **HOMO** zum **LUMO** springen können. Der Akzeptor ist elektronenarm, was sich auf das **LUMO** auswirkt, und ein starker Akzeptor führt zu einem niedrigeren **LUMO**, was bedeutet, dass das **LUMO** leichter Elektronen anziehen kann. Wir können **HOMO** und **LUMO** trennen, indem wir den Donor und den Akzeptor räumlich voneinander trennen, was die Überlappung zwischen ihren Elektronendichten verringert und somit das Austauschintegral reduziert, wie z. B. eine verdrehte Konformation oder eine nicht konjugierte Brücke. Es ist ein effektiver Weg, das Austauschintegral zwischen dem höchsten besetzten Orbital (**HOMO**) und dem niedrigsten besetzten Orbital (**LUMO**) und somit die Energielücke ΔE_{ST} zu minimieren.

Gemäß der Fermi-Goldenen Regel [5] [6] können wir wissen, dass sowohl die Spin-Bahn-Kopplung (**SOC**) als auch die Franck-Condon-gewichtete Zustandsdichte möglichst groß sein sollten, um eine hohe Rate des **rISC** zu erzielen. Nach der El-Sayed-Regel [7] ist die **SOC** zwischen zwei Zuständen groß, wenn sich der Orbitaltyp während des Übergangs ändert, wie z.B. von einem n -Orbital nach einem π^* -Orbital. Die **SOC** ist hingegen klein, wenn der Orbitaltyp beim Übergang erhalten bleibt, wie z.B. von einem π -Orbital nach einem π^* -Orbital. Bei der Gestaltung von **TADF**-Materialien besteht das Ziel jedoch darin, die Fluoreszenzemis-

sion zu maximieren und gleichzeitig die Phosphoreszenzemission zu minimieren. Da in MLCT-Zuständen mit starker SOC die Phosphoreszenz (der Übergang vom Triplett- zum Singulettzustand) leichter stattfinden kann, ist eine präzise Steuerung der SOC erforderlich, um ein effektives Intersystem Crossing (ISC) und rISC zu fördern, während gleichzeitig die Phosphoreszenz reduziert wird.

Außerdem muss der Zerfall von S_1 nach S_0 so schnell wie möglich erfolgen, das heißt, die Fluoreszenzemission muss so schnell wie möglich sein. Zusätzlich ist es wichtig, die interne Konversion (IC) in OLED-Materialien so weit wie möglich zu reduzieren oder zu minimieren. IC ist ein strahlungsloser Prozess, bei dem angeregte Elektronen ihre Energie in Form von Wärme an das umgebende Material abgeben, anstatt Photonen zu emittieren. Dies führt zu einer Verringerung der Fluoreszenz-Emissionseffizienz, da ein Teil der Exzitonen ihre Energie verliert, bevor sie Licht emittieren können. Da die IC ein mit der Fluoreszenz konkurrierender Prozess ist und ihre Rate umgekehrt proportional mit der Energielücke zwischen dem S_1 - und dem Grundzustand $\Delta E_{S_1-S_0}$ skaliert, erhöht sich die Rate der IC, wenn die Energielücke zwischen dem angeregten S_1 - und dem Grundzustand kleiner wird. Diese Erhöhung der IC-Rate bei kleineren Energielücken stellt eine signifikante Herausforderung für die Effizienz von OLED-Materialien dar.

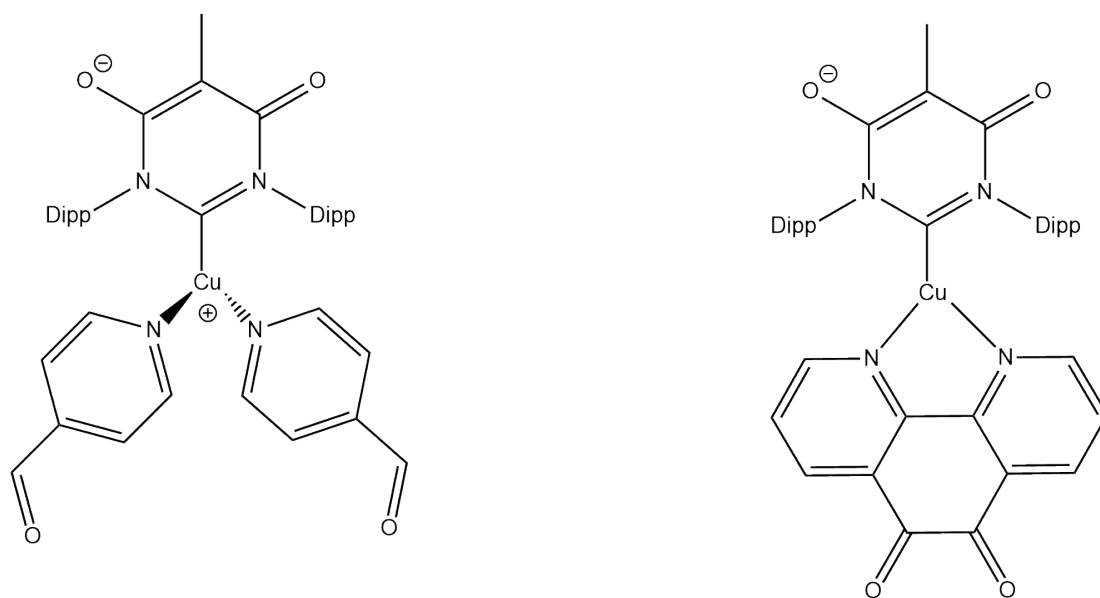
Die untersuchte Verbindung in dieser Arbeit ist ein anionisches sechsgliedriges N,N-Diamidocarbon-Cu(I)-5,6-Diketophenanthrolin (An6DAC-Cu-5,6-Dikphen). Es handelt sich um einen Kupfer-Metall-Komplex, der sowohl ein N-heterozyklisches Carben mit einem Sechsring als auch einen Diketophenanthrolin-Liganden enthält.

In N-heterozyklischen Carbenen (NHCs) verfügt das zentrale Kohlenstoffatom über drei sp^2 -hybridisierte Orbitale sowie ein unhybridisiertes p -Orbital. Zwei dieser sp^2 -Hybridorbitale sind an benachbarte Stickstoffatome gebunden, während das dritte sp^2 -Hybridorbital ein freies Elektronenpaar enthält. Dieses freie Elektronenpaar ist aufgrund des hohen s -Orbitalanteils im sp^2 -Hybridorbital näher am Kohlenstoffkern und somit räumlich konzentrierter als ein freies Elektronenpaar in einem reinen p -Orbital. Diese räumliche Konzentration der Elektronendichte ermöglicht eine stärkere Wechselwirkung mit dem Atomkern und somit eine effektivere Überlappung mit den leeren Orbitalen des Metallzentrums, was zur Bildung starker σ -Bindungen führt. Zusätzlich ist die Elektronendichte in NHCs stark auf das zentrale Kohlenstoffatom konzentriert, was die Fähigkeit erhöht, Elektronendichte zum Metallzentrum zu liefern. Diese Eigenschaften, zusammen mit der chemischen Stabilität der NHCs, fördern die Bildung stabiler und starker σ -Bindungen mit dem Metallzentrum. Aufgrund des doppelt besetzten sp^2 -Orbitals fungieren NHCs als starke σ -Donoren, während das leere p^π -Orbital zu einem starken π -

Akzeptorcharakter führt. [8] [9]

Kupfer(I) mit seiner d^{10} -Konfiguration vermeidet die Entstehung von metallzentrierten MC Zuständen, die bei anderen Metallen der ersten Übergangsreihe wie Fe(III) üblich sind und zu Energieverlusten durch nichtstrahlende Prozesse führen können. Die geringe SOC ist vorteilhaft für TADF-Materialien, da sie die unerwünschte Phosphoreszenz reduziert. Die Nähe der Energielevel von S_1 und T_1 in Kupfer(I)-TADF-Komplexen begünstigt eine ISC und rISC, was die Umwandlung zwischen diesen Zuständen ermöglicht. Kupfer bietet darüber hinaus als wirtschaftliche und umweltfreundliche Alternative zu schwermetallbasierten Phosphoreszenzemittern kommerzielle und nachhaltige Vorteile. Die Energieunterschiede der MLCT-Zustände sind generell größer als die der LLCT-Zustände [9] [10]. Dies impliziert, dass durch geeignete Anpassung der Ligandenstrukturen und deren Wechselwirkungen mit Kupfer die MLCT-Zustände energetisch angehoben werden können. Somit wird vermieden, dass MLCT als niedrigster angeregter Zustand dominiert, was für die TADF-Leistung kritisch ist, da MLCT-Zustände zu nichtstrahlenden Verlusten führen können. Die Steuerung der relativen Energieniveaus ist somit entscheidend, um die LLCT-Zustände als primäre strahlende Zustände zu etablieren und dennoch eine ausreichende ISC zu gewährleisten.

Diese Bachelorarbeit konzentriert sich auf den An6DAC-Cu-5,6-Dikphen, der aufgrund seiner erwarteten höheren chemischen Stabilität im Vergleich zum bereits untersuchten, aber experimentell als instabil erwiesenen An6DAC-Cu-bis-(4-Formylpyridin)-Komplex ausgewählt wurde. Obwohl der An6DAC-Cu-bis-(4-Formylpyridin)-Komplex bemerkenswerte TADF-Eigenschaften aufweist und die Energie des LLCT-Anregungszustands durch die Bindung einer elektronenziehenden Formylgruppe an das Pyridin senkt, führt diese Modifikation zu einer geschwächten Bindung zum Kupferion und resultiert in einer hohen Instabilität in Lösung mit sofortiger Bildung eines weißen Niederschlags [11]. Im Gegensatz dazu verspricht der An6DAC-Cu-5,6-diketophenanthrolin-Komplex, der ein ähnliches Akzeptormotiv aufweist, eine verbesserte chemische Stabilität bei möglicherweise vergleichbaren photophysikalischen Eigenschaften.



Dipp = 2,6-Diisopropylphenyl

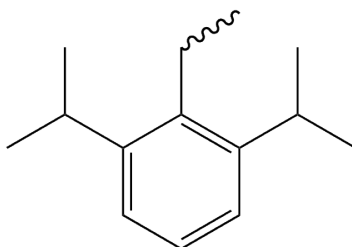


Abbildung 1: Vergleich von zwei anionischen *N,N*-Diamidinocarben-*Cu*(I)-Komplexen mit unterschiedlichen Liganden: Links ist *An6DAC-Cu-bis-(4-Formylpyridin)* und rechts *An6DAC-Cu-5,6-Dikphen* dargestellt.

2 Theorie

2.1 Angeregte Zustände

Wenn Elektronen eines Moleküls durch Energiezufuhr, z. B. durch Licht (Photonen) oder Wärmeenergie, in höhere Energiezustände angeregt werden, folgt häufig eine Relaxation zurück in niedrigere Energiezustände, die als Elektronenrelaxation bezeichnet wird. Das folgende Jablonski-Diagramm 2 [12] zeigt den Prozess der Absorption und Relaxation von Energie:

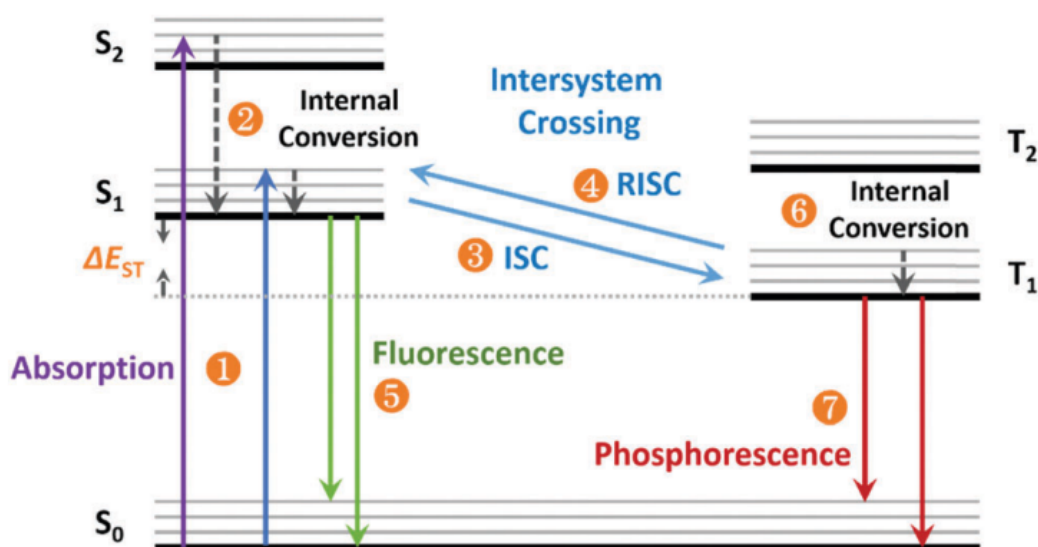


Abbildung 2: Jablonski-Diagramm 1: Absorption; 2,6: IC; 3: ISC; 4: rISC; 5: Fluoreszenz; 7: Phosphoreszenz

Nach der Absorption ① von Energie eines Photons geht das Molekül vom Grundzustand S_0 in einen angeregten Singulettzustand über, welcher energetisch höher liegt (wie beispielsweise S_1 oder S_2 in der Abbildung 2. Durch IC ② ⑥ kann das Molekül dann in einen niedrigeren elektronisch angeregten Zustand übergehen, oft unter Umverteilung der Energie auf die Molekülschwingungen, ohne Strahlung zu emittieren. ISC ③ ist ein nicht strahlender Übergang, der es einem Molekül erlaubt, von einem Singulettzustand in einen energetisch ähnlichen Triplettzustand überzugehen, wobei die Spinorientierung der Elektronen verändert wird. Dies ist in der Regel ein spin-verbotener Prozess, kann aber durch SOC ermöglicht werden. Elektronen, die sich im niedrigsten Triplett-Zustand T_1 befinden, können durch thermisch aktivierte rISC ④ in den Singulett-Zustand S_1 überführt werden. Aus dem angeregten Singulett-Zustand kann das Molekül Licht aussenden und durch

Fluoreszenz [5](#) in den Grundzustand zurückkehren. Im Triplettzustand kann das Molekül alternativ Photonenenergie durch Phosphoreszenz [7](#) abgeben, ein Prozess, der aufgrund der Spinverbotsbedingung des Übergangs langsamer abläuft als die Fluoreszenz. Diese Phänomene sind entscheidend für das Verständnis der Lumineszenz.

2.2 Geometrieoptimierung

Das Ziel der geometrischen Optimierung in der theoretischen Chemie ist die geometrische Konvergenz. Dies bedeutet, dass sich die Strukturparameter der Moleküle im Laufe des Optimierungsprozesses allmählich stabilisieren und vorgegebene Standards erreichen. Der wichtigste Standard ist dabei das globale Minimum auf der Potentialhyperfläche. Dieser Punkt stellt nicht nur den energetisch niedrigsten Punkt dar, sondern weist auch eine hohe Stabilität, dynamische Stabilität und thermodynamische Vorteile auf. Außerdem deutet das Schwingungsverhalten darauf hin, dass die Kräfte zwischen den Atomen zwar nicht ganz null, aber relativ klein sind und sich im Gleichgewicht befinden. Mathematisch kann dieser Prozess durch die Formel

$$R + x = R_{\text{eq}} \quad (1)$$

beschrieben werden, wobei R die Ausgangsgeometrie darstellt und x ein Schrittvektor ist, der die Startgeometrie R in die Gleichgewichtsgeometrie R_{eq} mit minimaler potentieller Energie überführt. Dieser Prozess wird wiederholt, bis das globale Minimum R_{global} gefunden wird. Im globalen Minimum, dem Grundzustand des Systems, verschwindet der Gradient, und die Hessematrix ist an diesem Punkt positiv definit, was die Stabilität des Punktes bestätigt [\[13\]](#).

Um das lokale Minima zu finden, werden verschiedene Methoden verwendet, darunter die **Function-Only Methoden**, **Gradientenverfahren** und **quadratischen Methoden**. Diese Methoden werden nach der Art des zugrundeliegenden Modellpotentials unterschieden. Die effektive Kombination und Anwendung dieser Methoden ist entscheidend für das Verständnis des molekularen Verhaltens, der chemischen Reaktionsmechanismen und der physikalisch-chemischen Eigenschaften [\[13\]](#).

1. **Function-Only Methoden:** Diese Methode hängt nicht von lokalen Informationen ab, sondern sucht durch zufällige Veränderungen der geometrischen Struktur nach Richtungen mit niedrigerer Energie. Ihr Hauptvorteil liegt darin, dass sie breitere Bereiche der Potentialenergieoberfläche erforschen kann und manchmal globale Minima findet, die andere Methoden möglicherweise nicht entdecken. Allerdings erfordert diese Methode aufgrund des Mangels

an lokalen Informationen mehr Versuche und Fehler, was zu einer relativ niedrigen Effizienz führt.

2. **Gradientenverfahren:** Diese Methode nutzt die erste Ableitung (den Gradienten) der Energie-Funktion, um den Suchprozess zu leiten. Sie basiert auf Taylor-Reihenentwicklungen erster und zweiter Ordnung, um Änderungen in der Energie vorherzusagen und optimiert die Struktur effizienter, indem sie in Richtung des größten Energieabfalls bewegt wird. Im Vergleich zu Function-Only Methoden sind Gradientenmethoden effizienter.
3. **Quadratische Methoden:** Neben dem Gradienten nutzen diese Methoden auch die Hesse-Matrix (die Matrix der zweiten Ableitungen der Energie), um zusätzliche Informationen über die lokale Krümmung der Energieoberfläche zu erhalten. Dies macht sie bei der Vorhersage von Energieänderungen, insbesondere in Systemen mit komplexen Energieoberflächen, genauer. Aufgrund ihres hohen Rechenaufwands und ihrer Komplexität sind quadratische Methoden am besten für komplexe Systeme geeignet, die eine hochpräzise Analyse erfordern.

unterscheiden sich diese drei Methoden in der Tiefe und Genauigkeit, mit der sie Informationen verarbeiten, was zu signifikanten Unterschieden in Effizienz und Genauigkeit bei der Suche nach Minima führt. Function-Only Methoden sind am einfachsten, aber möglicherweise am wenigsten effizient; Gradientenverfahren steigern die Effizienz; während quadratische Methoden bei der Genauigkeit und der Bearbeitung komplexer Systeme am ausgezeichnetesten sind.

Diese Methoden sind allerdings primär auf das Auffinden lokaler Minima ausgerichtet. Die Herausforderung besteht darin, dass sie in diesen lokalen Minima gefangen werden können, ohne das tatsächliche globale Minimum zu erreichen. Um die Wahrscheinlichkeit zu erhöhen, aus solchen lokalen Minima herauszufinden und das globale Minimum effizienter und genauer zu identifizieren, werden zusätzliche Techniken wie das simulierte Tempern [14] eingesetzt. Diese Methode ermöglicht es, durch kontrollierte Zufallsprozesse die Energieschwellen zu überwinden und somit eine umfassendere Suche im gesamten Energieprofil des Systems zu gewährleisten.

2.3 Nullpunktsschwingungsenergie

Die Gesamtenergie eines Moleküls setzt sich aus verschiedenen Energiekomponenten zusammen, einschließlich elektronischer Energie, Translationsenergie, Rotationsenergie, Schwingungsenergie und den entsprechenden thermischen Korrekturen. Die **Nullpunktsschwingungsenergie (ZPVE)** repräsentiert die minimale Energiemenge eines Moleküls im Grundzustand seiner Schwingungen und spielt eine

entscheidende Rolle. Die Berechnung erfolgt auf Basis der Schwingungsfrequenzen des Moleküls, welche die Anzahl der Schwingungen der Atome um ihre Gleichgewichtslage angeben. Diese wird durch Summierung der halben Quantenenergien aller Schwingungsmoden ermittelt und ist ein Resultat der Quantennatur der Moleküle. [15]

$$E_{\text{ZPVE}} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{3N-6(5)} h\nu_k \quad (2)$$

wobei h für Planksche Konstante und ν_k für die Schwingungsfrequenz steht. Besonders wichtig ist die Berücksichtigung der Nullpunktsenergie bei der Berechnung des Energieunterschieds zwischen Isomeren, da sie feine Unterschiede in deren Schwingungseigenschaften berücksichtigt. Zusätzlich wird die Nullpunktsschwingungskorrektur (ZPVC) verwendet, um die berechneten elektronischen Energien zu modifizieren. Dadurch werden genauere Gesamtenergieberechnungen ermöglicht. Die Korrekturen sind wesentlich für ein präzises Verständnis der molekularen Energieeigenschaften.

2.4 DFT

Die Dichtefunktionaltheorie (DFT) ist ein häufig verwendetes quantenmechanisches Verfahren. Es wird eingesetzt, um die elektronische Struktur der Vielelektronensystemen wie Molekülen und Festkörpern zu untersuchen.

Anders als die Hartree-Fock-Methode, welche die Wellenfunktion nutzt, verwendet die DFT die Elektronendichte als zentrales Funktional. Im Gegensatz zur hochdimensionalen Wellenfunktion $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_n)$, die von der Anzahl der Elektronen und der spezifischen Molekülstruktur abhängt, ist die Elektronendichte $\rho(\mathbf{r})$ nur dreidimensional. Dies liegt daran, dass die Dichte nur von Ortskoordinaten abhängig ist und unabhängig von der Größe des Moleküls [16] [17].

In der DFT wird die Gesamtenergie eines Systems als ein Funktional der Elektronendichte $\rho(\mathbf{r})$ beschrieben, was durch die folgende Gleichung ausgedrückt wird:

$$E = E[\rho(\mathbf{r})] \quad (3)$$

Diese Grundgleichung kann weiter verfeinert werden, um die verschiedenen Energiebeiträge im System detaillierter darzustellen:

$$E = T[\rho] + E_{eN}[\rho] + E_{ee}[\rho] \quad (4)$$

Hierbei repräsentiert $T[\rho]$ die kinetische Energie der Elektronen, $E_{eN}[\rho]$ steht für die Wechselwirkungsenergie zwischen Elektronen und Kernen, und $E_{ee}[\rho]$ bezeichnet die Elektron-Elektron-Wechselwirkungsenergie. Der Term $E_{ee}[\rho]$ kann weiter

aufgespalten werden in einen elektrostatischen Abstoßungsterm und einen Austauschwechselwirkungsterm. Diese Aufspaltung führt zu einer erweiterten Form der Energiegleichung:

$$E = T[\rho] + E_{eN}[\rho] + J[\rho] + E_{XC}[\rho] \quad (5)$$

Die Wechselwirkungsenergie zwischen Elektronen und Kernen, also die Coulomb-Anziehung, sowie die elektrostatische Abstoßung zwischen den Elektronen können mit klassischen Ausdrücken abgeleitet werden. Diese klassischen Terme lassen sich relativ direkt formulieren. Die Herausforderung in der DFT liegt jedoch in der korrekten Beschreibung der kinetischen Energie von Elektronen und der Austauschwechselwirkung [18]. Für diese Terme müssen geeignete Näherungen gefunden werden [19].

Es gibt verschiedene Ansätze, um diese Näherungen zu entwickeln.

Einer der ersten Ansätze war das Thomas-Fermi-Modell [20], das eine sehr vereinfachte Beschreibung der Elektronendichte und der kinetischen Energie lieferte. Die Grundannahme besteht darin, dass die Elektronenhülle als eine Art ‘Gas’ angesehen werden kann. Die Variationen in der Dichte dieser Hülle werden durch das Coulomb-Potential sowohl des Atomkerns als auch des Elektronengases beeinflusst. Obwohl es viele Aspekte der Elektronenwechselwirkung und -korrelation nicht berücksichtigt, war dieses Modell ein wichtiger Schritt in der Entwicklung der DFT.

Ein signifikanter Fortschritt wurde mit der Einführung des Kohn-Sham-Ansatzes erzielt. Im Kohn-Sham-Ansatz [21] der DFT ist die Berechnung der kinetischen Energie eng verbunden mit der Verwendung von Kohn-Sham-Orbitalen. Diese Kohn-Sham-Orbitale dienen auch dazu, die Elektronendichte zu bestimmen. Hierbei repräsentieren die Orbitale ein hypothetisches System von nicht wechselwirkenden Elektronen. Die Elektronendichte $\rho(\mathbf{r})$ im Kohn-Sham-Ansatz wird definiert als:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |\phi_i(\mathbf{r})|^2 \quad (6)$$

wobei $\phi_i(\mathbf{r})$ die Kohn-Sham-Orbitale sind und N die Anzahl der Elektronen im System darstellt. Die kinetische Energie T der nicht wechselwirkenden Elektronen wird dann ausgedrückt durch:

$$T_S = \sum_i^n \langle \phi_i | -\frac{1}{2} \nabla^2 | \phi_i \rangle \quad (7)$$

wobei ∇^2 der Laplace-Operator ist.

Gleichzeitig ermöglicht die Kohn-Sham-Methode durch die Einführung von Austausch-Korrelations-Funktionalen, die komplexen Wechselwirkungen zwischen den Elektronen in einem realistischeren Maßstab zu berücksichtigen:

$$E_{XC}[\rho] = (T[\rho] - T_S[\rho]) + (E_{ee}[\rho] - J[\rho]) \quad (8)$$

In der Kohn-Sham-DFT werden Kohn-Sham-Orbitale durch das Lösen einer Reihe von Ein-Elektronen-Schrödinger-Gleichungen, den sogenannten Kohn-Sham-Gleichungen \hat{H}_{KS} , erhalten. Diese Gleichungen enthalten ein effektives Potential $\hat{V}_{\text{eff}}(\mathbf{r})$, dessen Berechnung wesentlich einfacher ist als die direkte Lösung der multi-elektronischen Schrödinger-Gleichung. Das effektive Potential setzt sich zusammen aus:

$$\hat{V}_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = V_{eN}(\mathbf{r}) + \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' + V_{XC}(\mathbf{r}) \quad (9)$$

In dieser Formel repräsentiert $V_{eN}(\mathbf{r})$ das externe Potential (üblicherweise die Anziehung durch die Atomkerne), $\int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'$ ist der Hartree-Term, der die elektrostatische Wechselwirkung zwischen den Elektronen beschreibt, und $V_{XC}(\mathbf{r})$ ist das Austausch-Korrelations-Potential.

Da das effektive Potential $\hat{V}_{\text{eff}}(\mathbf{r})$ von der Elektronendichte $\rho(\mathbf{r})$ abhängt und die Elektronendichte wiederum durch die Lösungen der Kohn-Sham-Gleichungen bestimmt wird, muss der Lösungsprozess iterativ erfolgen. Dabei wird mit dem neu gefundenen Potential die Kohn-Sham-Gleichung erneut gelöst, ein neues Potential bestimmt und so weiter, bis eine stabile (selbstkonsistente) Lösung gefunden wird.

2.5 Solvationsmodelle

In der theoretischen Quantenchemie werden Studien oft entweder im Vakuum oder in einem Lösungsmittel durchgeführt. Die Unterschiede zwischen diesen beiden Umgebungen sind erheblich. Im Vakuum fehlen die Wechselwirkungen mit einem Lösungsmittel, was zu anderen elektronischen Eigenschaften und Reaktivitäten führen kann. In einem Lösungsmittel werden Moleküle durch die Solvation beeinflusst, was sich auf ihre Stabilität, Struktur und Energiezustände auswirkt. Diese unterschiedlichen Bedingungen müssen bei der Interpretation von quantenchemischen Berechnungen und bei der Vorhersage von Molekülverhalten berücksichtigt werden.

Wenn ein Molekül von einem Vakuum in ein Lösungsmittel überführt wird, verändert

sich die Ladungsverteilung im Molekül, wobei eine Separation von Partialladungen begünstigt wird. Dies erhöht die freie Energie des Lösungsmittels und die innere Energie des Moleküls. Es gibt jedoch auch einen Energiegewinn durch die günstigen Wechselwirkungen zwischen dem polarisierten Solvens und dem gelösten Molekül. Die Relaxation des Moleküls ist abgeschlossen, wenn sich der Energiegewinn und der Verlust von innerer Energie im Gleichgewicht befinden. Die Wechselwirkungen zwischen Solvens und Molekül sind meist durch Ladung und Dipolmoment gekennzeichnet und haben langreichweitigen Charakter, der über die erste Solvatationsschicht hinausgeht [19].

Bei der Diskussion von Solvatationsmodellen wird zwischen expliziten und impliziten Solvatationsmethoden unterschieden [19].

Explizite Solvatationsmodelle behandeln Solvens als separate Moleküle. Dieser Ansatz ist in der Regel zeitaufwändig und kann mit Hilfe der Quantenmechanik (QM) oder der Molekülmechanik (MM) berechnet werden. Die explizite Solvatation liefert eine genauere Beschreibung der Wechselwirkung zwischen Solvens und Solvat.

Implizite Solvatationsmodelle behandeln das Solvens als ein einheitliches Dielektrikum. Dieser Ansatz ist relativ einfach zu implementieren. Seine Ergebnisse hängen jedoch von der Beschreibung der Kavität ab. Das Polarizable Continuum Model (PCM) [22] und das Conductor-like Screening Model (COSMO) [23] sind zwei gängige implizite Solvatationsmodelle [19]. Im PCM wird die van-der-Waals-Oberfläche als Basis für die Kavität verwendet, auf der das elektrostatische Potenzial berechnet wird. Die Parametrisierung der Kavität und der Dispersionswechselwirkungen stützt sich auf die solvent-accessible surface (SAS). Im Gegensatz dazu orientiert sich das COSMO an der tatsächlichen Form des Moleküls, um die Kavitäten zu gestalten und das elektrostatische Potenzial an den Oberflächen der Kavitäten zu bestimmen. Dies wird durch die Ladungen erreicht, die an den Oberflächen der Kavitäten angebracht sind und den Polarisierungseffekt der Lösungsmittelmoleküle widerspiegeln.

Bei PCM werden die betrachteten Moleküle in einem virtuellen dielektrischen Kontinuum platziert, einem Medium, das in der Regel eine bestimmte Dielektrizitätskonstante hat. Das Hauptmerkmal dieses Modell besteht darin, dass es das Solvens als ein kontinuierliches, polarisiertes Medium behandelt und nicht aus diskreten Solvens-Molekül besteht [19].

Das PCM simuliert den Polarisierungseffekt des Solvens, indem es einen zusätzlichen Potentialterm in die Schrödinger-Gleichung einführt. Dieser Potentialterm dient

der Berechnung der Ladungsumlagerung und der Polarisation, die durch die dielektrische Eigenschaft des Lösungsmittels verursacht werden.

$$\hat{H}_{eff} = \hat{H}_0 + \hat{V}_{PCM} \quad (10)$$

wobei H_0 für den Hamilton-Operator ohne Berücksichtigung des Solvens steht. V_{PCM} repräsentiert die Potentialänderung aufgrund von Solvenseffekten.

Der Vorteil des PCM liegt in seiner Vielseitigkeit und Berechnungseffizienz. Durch Anpassung der Dielektrizitätskonstante kann das PCM eine große Bandbreite von Solvens simulieren, von unpolaren bis hin zu hochpolaren.

2.6 Dispersionseffekt

Viele traditionelle Funktionale können aufgrund des unzureichenden Langstreckenverhaltens des Korrelationspotentials Dispersionseffekte nicht beschreiben. Daher sind ihre Ergebnisse bei der Untersuchung von dispersionsdominierten Problemen wie physikalischer Adsorption, Konformationen von langkettigen Alkanen und Clustern schwach polarer Moleküle sehr schlecht. Ein effektiver Weg, diese Schwäche zu beheben, ist die Einführung empirischer Dispersionkorrekturen. Diese Arbeit wird sich nicht eingehend mit Dispersionseffekten befassen und diese Effekte sind auch nicht in den nachfolgenden Berechnungen enthalten. Allerdings wird am Anfang bei der Berechnung der Energien der beiden Rotamere des Grundzustands eine Grimme-DFT-D3-Berechnung (durch Einführung des Befehls `EmpiricalDispersion=GD3`) durchgeführt, um den Unterschied in der Energie mit und ohne Dispersionseffekte zu vergleichen.

Die DFT-D3 Korrektur, auch als Dispersion-Korrektur bekannt, kann zur Gesamtenergie eines durch eine DFT berechneten Systems hinzugefügt werden, um die Energie nach Korrektur zu erhalten. Die DFT-D3-Korrekturformel beinhaltet spezifische Terme und Koeffizienten, die auf die Eigenschaften des Systems abgestimmt sind:

$$E_{\text{disp}}^{\text{DFT-D3}} = -\frac{1}{2} \sum_{A \neq B} \sum_{n=6,8} \frac{s_n C_n^{AB}}{R_{AB}^n} f_{\text{damp},n}(R_{AB}) \quad (11)$$

R_{AB} steht für den Abstand zwischen den Atomen A und B, und der obere Index n repräsentiert die n-te Potenz dieses Abstandes. C ist der Koeffizient für die Dispersionkorrektur zwischen den Atomen, der nach bestimmten Regeln berechnet wird. Sehr oft werden C6 und C8 verwendet. s_n ist ein Skalierungsfaktor. Die Dämpfungsfunktion f im DFT-D3-Verfahren reguliert die Stärke der Dispersionswirkungen über verschiedene Distanzen. Diese Funktion stellt sicher, dass Dispersionswirkungen bei kurzen Abständen, wo die Hauptmethode bereits ausreichende

Interaktionen beschreibt, nicht überbetont werden. Sie ist besonders auch wichtig für die Behandlung von langreichweiten van der Waals-Interaktionen und sorgt für physikalisch realistische Ergebnisse. Der Ausdruck für die Dämpfungsfunktion f lautet:

$$f_{\text{damp},n}(R_{AB}) = \frac{1}{1 + 6 \left(\frac{R_{AB}}{s_{r,n}R_0} \right)^{-\gamma}} \quad (12)$$

Die Konstante γ definiert die Form der Dämpfungsfunktion. Mit abnehmendem Atomabstand R_{AB} nähert sich die Funktion null an, sodass die DFT-D3-Korrektur bei kurzen Distanzen präzise auf null gesetzt wird.

2.7 DFT/MRCI

Die Kombination von **DFT** und Multireferenz Konfigurationswechselwirkung (**MRCI**) führt zur DFT/MRCI-Methode. Hierbei liefert **DFT** eine verfeinerte Basis für Einzelelektronen, während **MRCI** genaue Berechnungen für Mehrteilchen-Effekte durchführt. **DFT** ist effizient in der Behandlung dynamischer Korrelationen, wohingegen **MRCI** sich auf statische Korrelationen spezialisiert. Obwohl **MRCI** primär statische Korrelationen adressiert, kann es auch dynamische Korrelationen erfassen, was potentiell zu Doppelzählungen führen könnte [24] [25]. Deswegen werden Modifikationen der Wechselwirkungsmatrixelemente sowie eine Vorschrift zur Selektion der wichtigsten Konfigurationen eingeführt.

In der DFT/MRCI-Methode beginnt der Prozess mit der Elektronendichte aus **DFT**-Berechnungen. Anschließend werden Energie und Wellenfunktion unter Verwendung von **MRCI** angepasst. Dies geschieht mit dem Ziel, Doppelzählungen zu vermeiden und eine präzise Darstellung der Elektronenkorrelation zu ermöglichen. Eine wesentliche Korrektur im Hamilton-Operator betrifft die Behandlung der Diagonal- und Außerdiagonalelemente. Kohn-Sham-Orbitalenergien ersetzen hierbei die diagonalen Hartree-Fock-Orbitalenergien, um eine bessere Darstellung der dynamischen Korrelation zu erreichen. Die Außerdiagonalelemente werden durch Skalierungsfaktoren oder eine Dämpfungsfunktion modifiziert, um Doppelzählungen zu verhindern [24].

2.8 Effektive Rumpfpotentiale

In der Quantenchemie vereinfachen **effektive Rumpfpotentiale**, engl.: **effective core potential (ECPs)** die Behandlung schwerer Elemente, indem sie die Rumpfelektronen eines Atoms durch ein spezialisiertes Potential ersetzen, das ausschließlich mit den Valenzelektronen wechselwirkt. Diese Methode reduziert nicht nur die Berechnungskomplexität, sondern erlaubt auch die Berücksichtigung relativistischer Effekte auf einfache Weise im Hamiltonoperator integriert werden. Es gibt zwei Haupttypen von **ECPs** [26]: einkomponentige, die sich auf skalare relativistische Effekte konzentrieren, und zweikomponentige, die sowohl skalare als auch spinabhängige relativistische Effekte einbeziehen. Die Stuttgarter/Kölner **ECPs** bieten beide Varianten, einschließlich nicht-relativistischer und skalar-relativistischer **ECPs** sowie Spin-Orbit- und Kern-Polarisationspotentiale. Hauptsächlich sind die einkomponentigen **ECPs** ausführlich aufgeführt [27]. Im semi-lokalen Ansatz wird das Rumpfpotential wie folgt definiert:

$$V_X^{ECP}(i) = -\frac{Q}{r} + \sum_{l,j} \left[\sum_k B_{l,j,k} e^{-\beta_{l,j,k} r^2} \right] P_{l,j} \quad (13)$$

wobei X das Atom, l und $j = \frac{1}{2}$ Drehimpulsquantenzahl, Q die effektive Kernladung, $P_{l,j}$ der Projektionsoperator und die Koeffizienten $B_{l,j,k}$ und $\beta_{l,j,k}$ die Entwicklungskoeffizienten einer Linearkombination von Gaußfunktionen sind [26].

3 Programme und technische Parameter der Rechnungen

Die Geometrie wurde zunächst mit Avogadro [28] und Chemcraft [29] entworfen. Anschließend wurde die Geometrie im elektronischen Grundzustand optimiert. Hierbei wurde das PCM-Modell verwendet, um eine Dichlormethan-Lösung zu simulieren. Zur Optimierung wurden die Optionen `Opt` und `SCRF=(Solvent=Dichloromethane, SAS)` in Gaussian 16 [30] genutzt. Für die Optimierung der Geometrie der angeregten Singulett-Zustände wurde TDDFT [31] verwendet, während für die Optimierung der Geometrie der angeregten Triplett-Zustände TDDFT-TDA [32] (Gaussian 16) zum Einsatz kam. Dabei wurde das PBE0-Dichtefunktional [17] verwendet. Nach der Optimierung der Geometrie wurde eine Schwingungsfrequenzberechnung mit den Optionen `Freq=hpmodes` und `nosym` durchgeführt, um zu überprüfen, ob ein Minimum für die optimierte Geometrie gefunden wurde. Falls nicht, wurden die neuesten Koordinaten für eine erneute Geometrieoptimierung verwendet. Dieser Prozess wurde wiederholt, bis ein Minimum gefunden wurde.

Anschließend wurde die Punktladung der PCM-Umgebung [15] für nachfolgende Turbomole- [33] und DFT/MRCI-Rechnungen [25] exportiert (unter Verwendung der Option `IOP(5/33=3)`). Für die DFT/MRCI-Rechnungen wurden zunächst die Basissätze und das bh-lyp [34] Funktional mit `'define'` definiert. Der def2-SV(P)-Basissatz [35] wurde für alle Atome außer Kupfer eingesetzt. Für das Kupferatom wurde das skalarrelativistische Kölner-Stuttgarter Rumpfpotential [36] (defpp-ecp) und der entsprechende cc-pVDZ-PP Basissatz [35] verwendet. Anschließend wurden die Berechnungen zweimal mit der DFT/MRCI-Methode für jeweils 10 angeregte Singulett- und Triplett-Zustände durchgeführt. Dabei wurde der Hamiltonoperator R2022 [37] verwendet und der Parametersatz `tight` angewendet. Die Selektionsschwelle betrug $0.6E_h$ in der ersten und $0.8E_h$ in der zweiten Iteration. In der zweiten Iteration wurde `mergerefsp 1 3` angewendet. Nach Abschluss der DFT/MRCI-Berechnungen wurde mittels des Befehls `'qcidens'` im Terminal die Differenzdichte zwischen den 10 angeregten Singulett- bzw. Triplett-Zuständen und dem Grundzustand berechnet. Die entsprechenden Bilder wurden im Terminal mit dem Befehl `'write'` in `'jmol'` gespeichert [38].

Zur ersten Einschätzung des Charakters der angeregten Zustände wurden die Elektronenübergänge mit `'TheoDORE'` [39] berechnet. Die Absorptionsspektren wurden mithilfe von `make_UV` erstellt und die Diagramme wurden mit Gnuplot generiert.

4 Resultate

4.1 Grundzustand

4.1.1 Geometrien

Das Molekül besitzt zwei Konformere, die abhängig von der Ausrichtung des Diketophenanthrolin-Liganden in Bezug auf das NHC bestimmt werden. Wenn der Ligand annähernd parallel zum NHC steht, wird es als planares Konformer bezeichnet, und wenn er annähernd senkrecht dazu steht, wird es als orthogonales Konformer bezeichnet. Die Grundzustände werden entsprechend als **GZ_Planar** und **GZ_Ortho** abgekürzt.

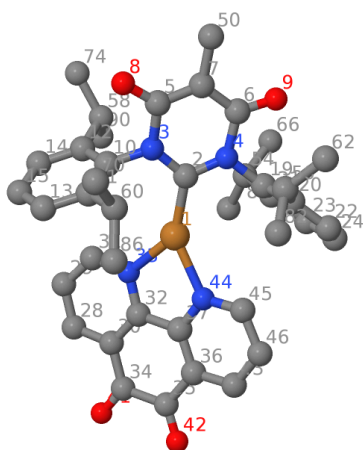


Abbildung 3: Grundzustand des planaren Konformers von *An6DAC-Cu-5,6-Dikphen*

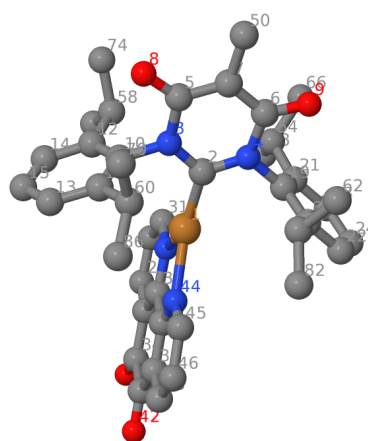


Abbildung 4: Grundzustand des orthogonalen Konformers von *An6DAC-Cu-5,6-Dikphen*

Die Diederwinkel beider Konformere werden, wie in der Abbildung 3 und in der Abbildung 4 gezeigt, durch die Atomgruppierung 4(N)-2(C)-1(Cu)-44(N) bestimmt. Der Diederwinkel des **GZ_Planar** beträgt $37,0^\circ$, während der des ortho-Konformers bei $90,2^\circ$ liegt. Obwohl das planare Konformer nicht vollständig planar ist, da es einen ziemlich großen Neigungswinkel aufweist, bezeichnen wir es zur Vereinfachung und klaren Unterscheidung dennoch als **GZ_Planar**. Beim ortho-Konformer stehen die Diketophenanthrolin-Liganden vollständig senkrecht zur NHC-Ebene, was ihn zu einem vollständig orthogonalen Konformer macht.

Aus den Tabellen 1 und 2 geht hervor, dass die Winkel und Bindungslängen in **GZ_Planar** und **GZ_Ortho**, die mit den in den Abbildungen 3 und 4 nummerierten

Atomen verbunden sind, nahezu identisch sind. Dies weist darauf hin, dass abgesehen von ihrer planaren bzw. orthogonalen Anordnung, die Strukturen der beiden Konformere weitgehend ähnlich sind.

Tabelle 1: Ausgewählte Bindungswinkel der *GZ.Planar* und *GZ.Ortho* Konformere

Winkel	Planar [°]	Ortho [°]
4(N)-2(C)-1(Cu)	122.2	121.8
3(N)-2(C)-1(Cu)	122.1	121.8
2(C)-1(Cu)-33(N)	141	138.5
2(C)-1(Cu)-44(N)	141	142.2

Tabelle 2: Ausgewählte Bindungslängen der *GZ.Planar* und *GZ.Ortho* Konformere

Bindungslänge	Planar [Å]	Ortho [Å]
6(C)-9(O)	1.23	1.24
6(C)-4(N)	1.45	1.44
4(N)-2(C)	1.35	1.35
3(N)-2(C)	1.35	1.35
2(C)-1(Cu)	1.92	1.9
1(Cu)-44(N)	2.10	2.08
1(Cu)-33(N)	2.10	2.09
5(C)-8(O)	1.23	1.24

Da sowohl das **NHC** als auch das Diketophenanthrolin eine hohe Symmetrie aufweisen, besitzt das planare Konformer eine C_2 -Symmetrie. Im Gegensatz dazu zeigt das ortho-Konformer eine C_{2v} -Symmetrie.

Bei der Untersuchung der elektronischen Strukturen beider Konformere zeigt sich, dass in beiden Fällen das **HOMO** hauptsächlich auf dem **NHC** lokalisiert ist, während das **LUMO** auf dem Diketophenanthrolin zu finden ist. Diese räumliche Trennung der **HOMO**- und **LUMO**-Orbitale entspricht der theoretischen Vorhersage, dass eine maximale räumliche Trennung von **HOMO** und **LUMO** zur Minimierung des Austauschintegrals beiträgt.

Unter der Annahme, dass Dispersionseffekte nicht berücksichtigt werden, ist die Energie des Ortho-Konformers um 31 *meV* niedriger als die des planaren Konformers. Dies deutet darauf hin, dass der Ortho-Konformer energetisch günstiger

ist und somit bevorzugt wird. Wenn zusätzlich die Nullpunktsschwingungsenergie (ZPVE) berücksichtigt wird, ist die Energie des Ortho-Konformers um 7,0 meV höher als die des planaren Konformers. Der Energieunterschied zwischen den beiden Konformern ist sehr gering, sodass man sagen könnte, dass sie thermisch neutral sind. Wenn jedoch Dispersionseffekte durch ein semiempirisches Verfahren (D3-BJ) berücksichtigt werden, ist die Energie des planaren Konformers um 700 meV höher als die des Ortho-Konformers. Unter Berücksichtigung der ZPVE ist die Energie des planaren Konformers sogar um 767 meV höher als die des Ortho-Konformers. Daher kann man grundsätzlich sagen, dass das einzige Produkt der Ortho-Konformer ist. Es ist unrealistisch. In unseren nachfolgenden Berechnungen werden deshalb weder die Dispersionseffekte noch die Nullpunktsschwingungsenergie berücksichtigt. Hier wird lediglich ein Versuch bezüglich des Grundzustandes unternommen.

Tabelle 3: Der vertikale Energievergleich der Konformere

	E_{el} [E_h]	ΔE_{el} [eV]	ZPVE [E_h]	$E_{el}+ZPVE$ [E_h]	$\Delta E_{el+ZPVE}$ [eV]
mit_Disp					
Ortho	-2302.700476	0	0.765548	-2301.934928	0
Planar	-2302.671906	0.777	0.765163	-2301.906743	0.767
ohne_Disp					
Ortho	-2302.581801	0	0.764632	-2301.817169	0.007
Planar	-2302.580650	0.031	0.763226	-2301.817424	0

4.1.2 Angeregte Zustände

In den planaren und orthogonalen Grundzustandsgeometrien wurden jeweils zehn Singulett- und Triplett-Anregungszustände mittels DFT/MRCI berechnet. Diese 20 angeregten Zustände zeigen eine Vielzahl von Elektroneneigenschaften. Abbildung 5 präsentiert die vertikalen Anregungsenergien für beide Geometrien. Da die Grundzustandsenergie von **GZ_Ortho** niedriger als die von **GZ_Planar** ist, wird in der Grafik die Grundzustandsenergie von **GZ_Ortho** (in eV) als Referenzpunkt 0 dargestellt. Aufgrund der sehr geringen Energiedifferenzen zwischen den angeregten Zuständen werden die Anregungsenergien ohne den Grundzustand in Abbildung 6 erneut verglichen. Die detaillierten Energiedaten werden in Tabelle 14 und 15 dargestellt. Aus der Grafik können einige Beobachtungen gemacht werden.

Zunächst zu den gemeinsamen Merkmalen: Für jeden Anregungszustand liegt die Energie aller Triplett-Zustände niedriger als die der Singulett-Zustände, was auf eine nach der Hund'schen Regel relativ stabilere Elektronenkonfiguration und eine

niedrigere Austauschwechselwirkungsenergie der Triplett-Zustände zurückzuführen ist. Ferner besitzen diese beiden Geometrien viele ähnliche Charakteristika, wie LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$), MLCT ($d_{z^2} \rightarrow \pi^*$), LC ($n \rightarrow \pi^*$), LLCT+MLCT ($\pi \rightarrow \pi^* d_{xz} \rightarrow \pi^*$) und MLCT2 ($d_{z^2} \rightarrow \pi^*$). Es ist deutlich ersichtlich, dass für die meisten gemeinsamen Charakteristika die Energien von [GZ_Planar](#) über [GZ_Planar](#)-Triplett bis hin zu [GZ_Ortho](#) und [GZ_Ortho](#)-Triplett abnehmen, was hauptsächlich auf die größere strukturelle Stabilität von im Vergleich zur planaren Geometrie zurückzuführen ist. Natürlich gibt es auch einige Ausnahmen, wie LC ($n \rightarrow \pi^*$) und LLCT+MLCT ($\pi \rightarrow \pi^* d_{xz} \rightarrow \pi^*$). Die Energie des Triplettzustands LC ($n \rightarrow \pi^*$) ist deutlich gesunken, während die Energie von LLCT+MLCT ($\pi \rightarrow \pi^* d_{xz} \rightarrow \pi^*$) im orthogonalen Konformer höher ist als in der planaren Konformation. Für das [An6DAC-Cu-5,6-Dikphen](#)-Molekül wird nur LC in Dikeph gefunden. Es gibt keine LC in NHC. Darüber hinaus ist der niedrigste Charaktertyp sowohl bei der -Geometrie als auch bei der -Geometrie LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$). Der Elektronenübergang erfolgt von HOMO (NHC) nach LUMO (Diketophenanthrolin), was hauptsächlich durch die geringe Energiedifferenz zwischen HOMO und LUMO und die geringe räumliche Überlappung zwischen diesen beiden Orbitalen verursacht wird, was den Ladungstransfer begünstigt.

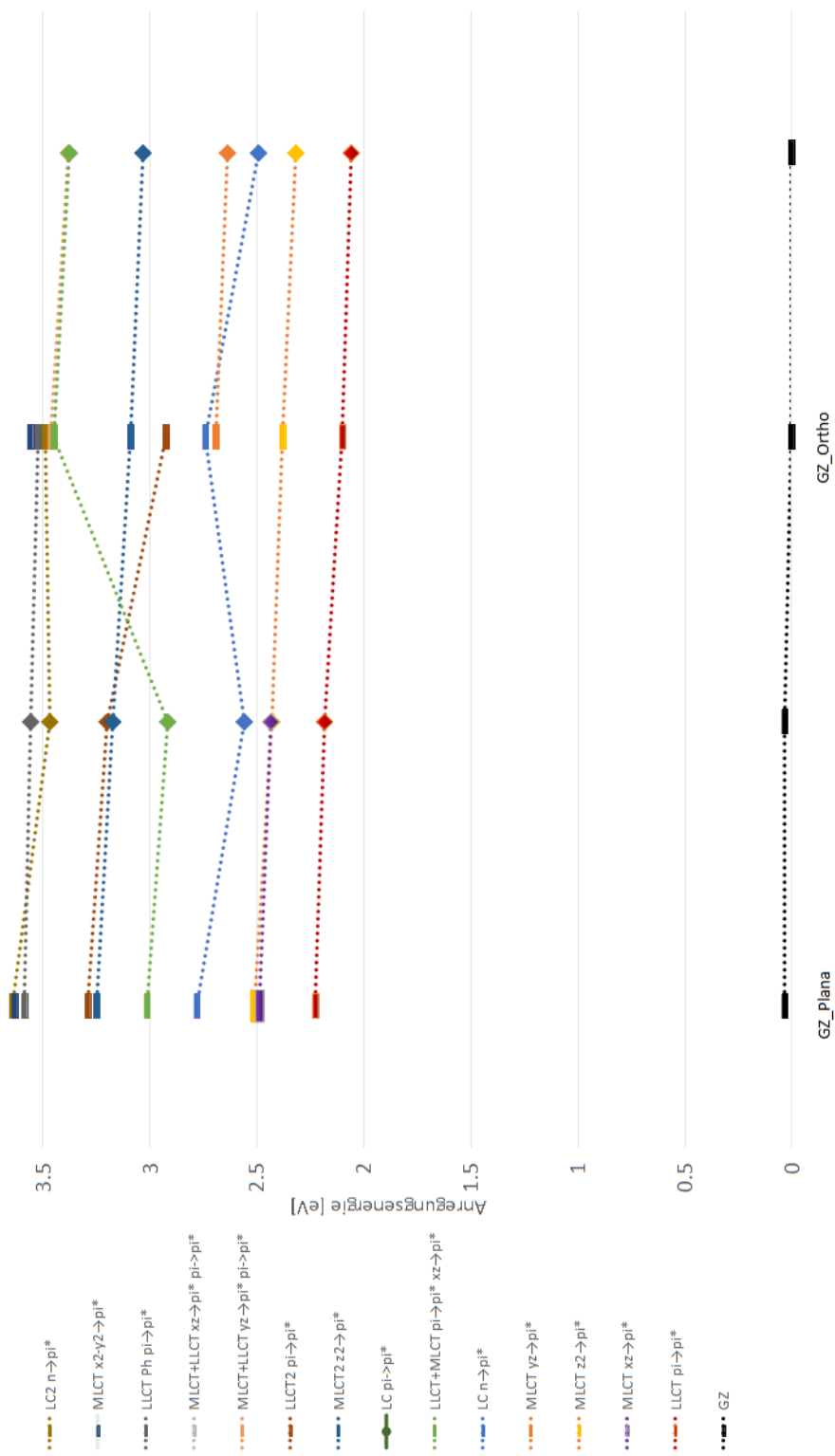


Abbildung 5: Charakterisierung der Elektronenübergänge für alle Grundzustandsgeometrien. Die DFT/MRCI-Anregungsenergien [eV] beziehen sich auf die Grundzustandsenergie des GZ_Ortho Konformers. Singulettenergien sind durch waagerechte Balken, Triplettenergien durch Rauten symbolisiert.

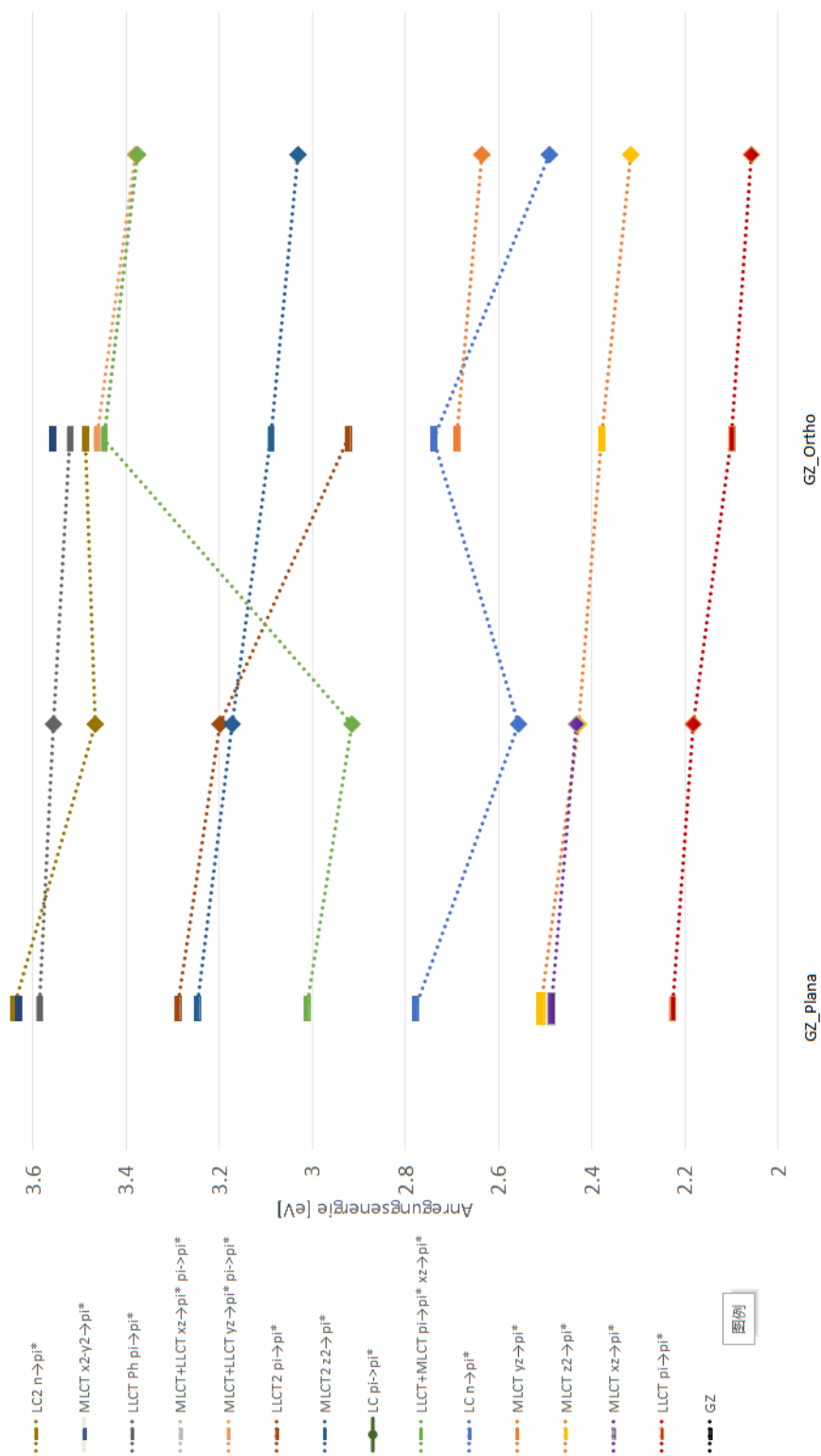


Abbildung 6: Charakterisierung der Elektronenübergänge für alle Grundzustandsgeometrien ohne Grundzustand, Anregungsenergien zwischen 2,0 und 3,5 eV. Die DFT/MRCI-Anregungsenergien [eV] beziehen sich auf die Grundzustandsenergie des GZ-Ortho Konformers. Singulettenergien sind durch waagerechte Balken, Triplettenergien durch Rauten symbolisiert.

4.1.3 Absorption

Das Absorptionsspektrum ist in Abbildung 7 dargestellt. Die zugehörigen Daten sind in der Tabelle 4 dargestellt. Die relevanten Differenzdichten werden in Abbildung 8 9 gezeigt.

Für das planare Konformer liegt der erste langwellige Absorptionspeak bei 565 nm, der durch eine relativ niedrige Oszillatorstärke von 0.0004 charakterisiert ist und dem angeregten Zustand S_1 entspricht. Dieser Peak repräsentiert einen LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$) Charakter, bei dem die Elektronen von NHC zu den Diketophenanthrolin-Liganden übertragen werden, wobei die Elektronen vom HOMO zum LUMO wechseln. Der zweite Peak bei 500 nm mit einer Oszillatorstärke von 0.00020 gehört zum angeregten Zustand S_3 und zeigt einen MLCT ($d_{z^2} \rightarrow \pi^*$) Übergang. Ein weiterer signifikanter Peak bei 381 nm mit einer Oszillatorstärke von 0.01475 entspricht dem Zustand S_7 und weist einen LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$) Charakter auf, der eine deutliche Elektronenübertragung zwischen den Liganden anzeigt. Der vierte Peak bei 342 nm repräsentiert den angeregten Zustand S_{10} mit einer Oszillatorstärke von 0.01247 und ist durch einen MLCT ($d_{x^2-y^2} \rightarrow \pi^*$) Charakter gekennzeichnet. Die Zustände S_7 und S_{10} zeigen eine höhere Oszillatorstärke, was darauf hindeutet, dass diese Übergänge im Spektrum deutlicher sind.

Für das Ortho-Konformer ist der $S_0 \rightarrow S_1$ -Übergang bei 590 nm Symmetrieverboten und deshalb ist es im Absorptionsspektrum nicht sichtbar. Der erste Peak bei 521 nm gefunden, der dem Zustand S_2 zugeordnet wird und eine Oszillatorstärke von 0.00026 aufweist. Dieser Peak zeigt einen MLCT ($d_{z^2} \rightarrow \pi^*$) Charakter, der einen Elektronentransfer vom Kupfer zu den Diketophenanthrolin-Liganden indiziert. Der Peak bei 401 nm korrespondiert mit dem angeregten Zustand S_6 und einer Oszillatorstärke von 0.0041, was ebenfalls einen MLCT ($d_{z^2} \rightarrow \pi^*$) Übergang darstellt, der den Elektronentransfer vom Kupferzentrum zu den Diketophenanthrolin-Liganden impliziert. Der markanteste Peak bei 360 nm gehört zum Zustand S_7 mit der höchsten Oszillatorstärke von 0.01304, der eine Mischung aus MLCT- und LLCT-Charakter MLCT/LLCT ($d_{z^2} \rightarrow \pi^*$; $\pi \rightarrow \pi^*$) zeigt und auf einen ausgeprägten Ladungstransfer sowohl zwischen dem Kupferzentrum und den Diketophenanthrolin-Liganden als auch innerhalb der Liganden selbst hindeutet.

Beide Konformere beinhalten MLCT- und LLCT-Prozesse. Diese Charakter zeigen, dass in diesen Zuständen der Elektronenübergang einen Ladungstransfer zwischen dem Metallzentrum und dem Liganden beinhaltet. Wir beobachten, dass die Absorptionspeaks mit höherer Oszillatorstärke im ultravioletten Bereich bei kürzeren Wellenlängen liegen, was auf eine höhere Energie dieser angeregten Zustände

hinweist. Darüber hinaus ist das Dipolmoment im Grundzustand bei beiden Konformationen am größten: **GZ_Planar** hat 15,36, **GZ_Ortho** hat 16,44. Dies lässt darauf schließen, dass die Elektronenverteilung im Grundzustand am weitesten ist. Aus Tabelle 29 30 geht hervor, dass sich die Richtung des Dipolmoments im **LLCT**-Zustand gegenüber dem Grundzustand umkehrt: Statt vom **NHC** zum **Dikphen** zeigt es nun vom **Dikphen** zum **NHC**. Die **LLCT**-Zustände erfahren aufgrund der Wechselwirkung mit einem polaren Lösungsmittel eine starke hypsochrome Verschiebung in der Absorption, was als negative Solvatochromie bezeichnet wird. Im **MLCT**-Zustand ist das Dipolmoment kleiner, weil die Distanz zwischen dem Metall und dem Liganden gering ist.

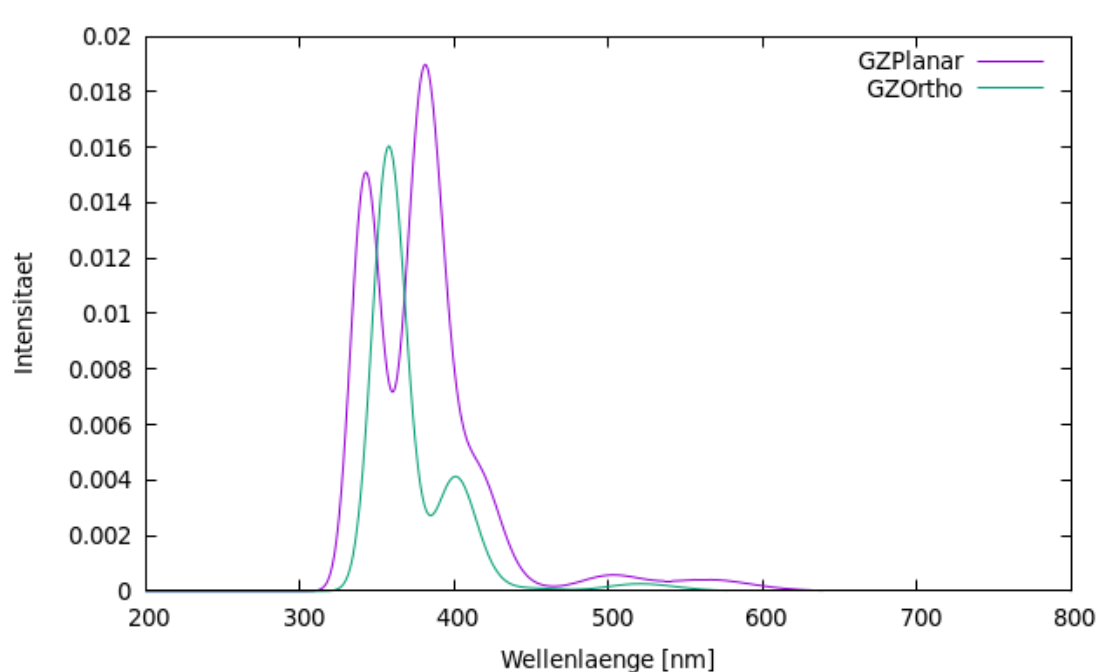


Abbildung 7: Vergleich der Absorptionsspektren von planaren und ortho-Konformere. Lila steht für das planare Konformer und grün für das orthogonale Konformer (mit einer Gaußverbreitung von 0,1 eV).

Tabelle 4: Vergleich der Absorptionsspektren

Zustand	ΔE [eV]	Wellenlänge [nm]	Oszillatorstärke	Charakter	Anregung
Planar-Konformer					
S1	2.195	565	0.00040	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	H \rightarrow L
S3	2.478	500	0.00020	MLCT ($d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	H-1 \rightarrow L
S7	3.258	381	0.01475	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	H \rightarrow L+1
S10	3.631	342	0.01247	MLCT ($d_{x^2-z^2} \rightarrow \pi^*$)	H-8 \rightarrow L
Ortho-Konformer					
S1	2.100	590	0.00000	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	H \rightarrow L
S2	2.379	521	0.00026	MLCT ($d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	H-1 \rightarrow L
S6	3.089	401	0.00410	MLCT ($d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	H-1 \rightarrow L+1
S7	3.447	360	0.01304	MLCT/LLCT ($d_{z^2} \rightarrow \pi^*$; $\pi \rightarrow \pi^*$)	H-4 \rightarrow L

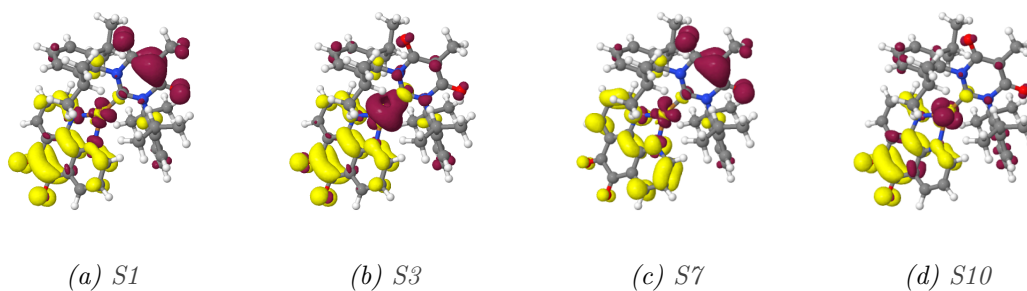


Abbildung 8: *GZ_Planar* relevante Differenzdichten (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.

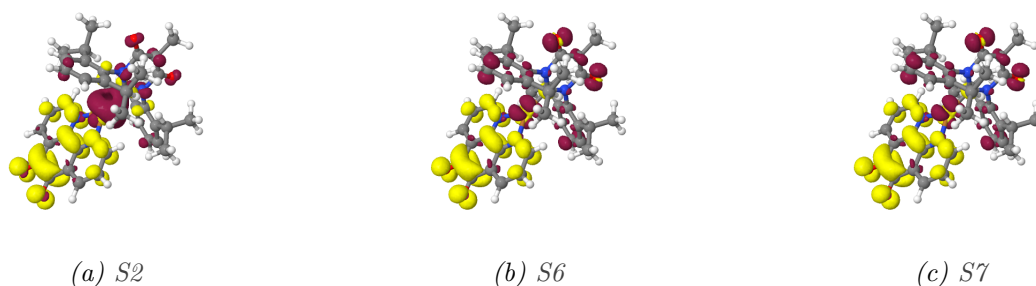


Abbildung 9: *GZ_Ortho* relevante Differenzdichten. Weitere Erläuterungen siehe Abb.8.

4.2 Angeregter Zustand

Die Geometrie des S_1 -Zustands wurden im Anschluss mit TDDFT und die des T_1 -Zustands mit TDDFT-TDA(Gaussian) optimiert. Es wurden die Minima für viele verschiedene Geometrien gefunden, in der folgenden Tabelle sind die Typen der optimierten Geometrien dargestellt.

Tabelle 5: Vergleich der elektronischen Übergänge für planare und ortho Konformere

Konformer	S_{LLCT}	T_{LLCT}	S_{MLCT1}	S_{MLCT2}	T_{MLCT1}	T_{MLCT2}	T_{npi}
Planar	x	x	x	x	x	x	x
Ortho	x	x	x	x	x	x	-

Der T_{npi} -Zustand ist aufgrund seiner niedrigsten Energie im [Ligandenzentriert engl.: Ligand-Centered \(LC\)](#) ($n \rightarrow \pi^*$)-Orbital weniger bedeutend. Seine Energie wird zuerst auf andere Bahnen mit einem niedrigeren [LLCT](#) $\pi \rightarrow \pi^*$ -Charakter relaxieren und schließlich zum Grundzustand zurückkehren. Daher ist dieser Zustand nicht so relevant, und aus diesem Grund wurde in dieser Arbeit keine spezielle Optimierung für die planaren und orthogonalen Geometrien bezüglich dieses Zustands durchgeführt.

Die Namen dieser Geometrien entsprechen dem Charakter ihres jeweils niedrigsten angeregten Zustands. Beispielsweise steht S_{LLCT} für die Geometrie des S_1 -Zustands, der den niedrigsten Zustand mit einem [LLCT](#) ($\pi \rightarrow \pi^*$) Charakter darstellt.

Da eine Ähnlichkeit zwischen der S_1 -Geometrie und der entsprechenden T_1 -Geometrie mit der gleichen Art von niedrigstem angeregtem Zustand besteht, wird in dieser Arbeit nur jede Singulett-Geometrie diskutiert.

4.2.1 Geometrien

S_{LLCT} -Geometrie:

Der Diederwinkel des planaren S_{LLCT} von N44-C2-Cu1-N4 beträgt 47.9° , während der Winkel der [GZ_Planar](#) 37° ist. Die planare S_{LLCT} -Geometrie weist im Vergleich zur [GZ_Planar](#)-Geometrie einen relativ großen Abweichungswinkel von 10° auf und die Molekülstruktur nähert sich fast einer querliegenden Form. Im Vergleich dazu hat das orthogonale Konformer S_{LLCT} einen Diederwinkel von 90.3° , während der Winkel der [GZ_Ortho](#) 90.2° beträgt. Es gibt keinen signifikanten Unterschied; beide sind streng orthogonal. Der Ligand steht senkrecht zum [NHC](#).

Tabelle 6: Vergleich ausgewählter Bindungswinkel zwischen der S_{LLCT} -Geometrie und der Grundzustandsgeometrie der planaren und orthogonalen Konformere

Winkel	GZ		SLLCT	
	Planar [°]	Ortho [°]	Planar [°]	Ortho [°]
4(N)-2(C)-1(Cu)	122.2	121.8	121.8	121.5
3(N)-2(C)-1(Cu)	122.1	121.8	121.8	121.6
2(C)-1(Cu)-33(N)	141.0	138.5	139.6	137.6
2(C)-1(Cu)-44(N)	141.0	142.2	139.3	140.2

Aus der Tabelle 6 wird erkannt, dass es keine großen Unterschiede in den Winkeln gibt. Fast alle Winkelunterschiede sind kleiner als 0.5° , wobei es auch einige Veränderungen gibt, die etwas größer sind. Für das planare Konformer hat der Winkel von 2(C)-1(Cu)-33(N) um 1.5° abgenommen, während der Winkel von 2(C)-1(Cu)-44(N) um 1.2° zugenommen hat. Für das orthogonale Konformer hat der Winkel von 2(C)-1(Cu)-33(N) um 2° abgenommen, während der Winkel von 2(C)-1(Cu)-44(N) um 0.9° zugenommen hat. Dies ist normal und deutet darauf hin, dass das NHC leicht zu einer Seite hin geneigt ist.

Tabelle 7: Vergleich ausgewählter Bindungslängen zwischen der S_{LLCT} -Geometrie und der Grundzustandsgeometrie der planaren und orthogonalen Konformere

Bindungslänge	GZ		SLLCT	
	Planar [Å]	Ortho [Å]	Planar [Å]	Ortho [Å]
6(C)-9(O)	1.23	1.24	1.22	1.22
6(C)-4(N)	1.45	1.44	1.42	1.41
4(N)-2(C)	1.35	1.35	1.36	1.36
3(N)-2(C)	1.35	1.35	1.36	1.36
2(C)-1(Cu)	1.92	1.90	1.90	1.88
1(Cu)-44(N)	2.10	2.08	2.07	2.04
1(Cu)-33(N)	2.10	2.09	2.07	2.05
5(C)-8(O)	1.23	1.24	1.22	1.22

Gemäß den Informationen in Tabelle 7 kann festgestellt werden, dass die Bindungslängen der beiden S_{LLCT} Konformer nahezu identisch mit denen der Grundzustandsgeometrien sind. Der größte Unterschied besteht zwischen dem Kupferatom und dem Stickstoffatom, wobei z.B. die Bindungslänge von 1(Cu)-44(N) am planaren Konformer von 2,10 Å auf 2,7 Å gesunken ist, während beim orthogonalen Konformer die Bindungslänge von 2,08 Å auf 2,04 Å gesunken ist. Die

entsprechenden Geometrien sind in Abbildung 10 11 dargestellt.

In der S_{LLCT} -Zustandsgeometrie kommt es zu signifikanten strukturellen Veränderungen im Vergleich zum Grundzustand. Der Diederwinkel im planaren Konformer vergrößert sich deutlich, was auf eine annähernd querliegende Form der Molekülstruktur hinweist. Insbesondere die Cu-N-Bindungslängen erfahren eine Verkürzung, was auf eine stärkere Wechselwirkung zwischen dem Kupferatom und den Stickstoffatomen im angeregten Zustand schließen lässt. Diese geometrischen Veränderungen sind vermutlich eine Folge der Neuverteilung der Elektronendichte, die durch die Anregung verursacht wird.

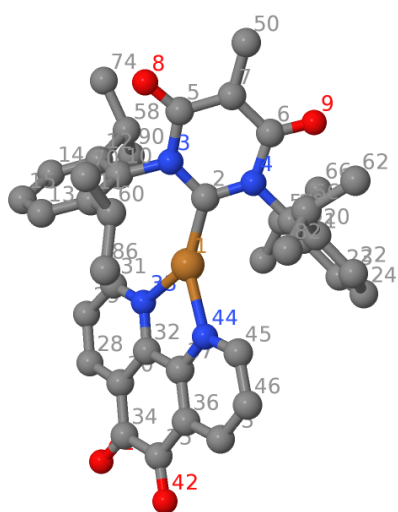


Abbildung 10: S_{LLCT} -Geometrie des planaren Konformers von *An6DAC-Cu-5,6-Dikphen*

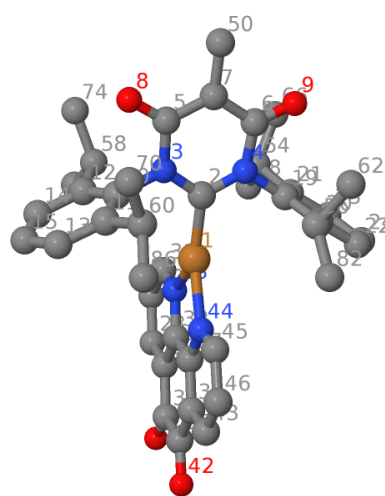


Abbildung 11: S_{LLCT} -Geometrie des orthogonalen Konformers von *An6DAC-Cu-5,6-Dikphen*

S_{MLCT} -Geometrie:

Es gibt zwei unterschiedliche MLCT-Geometrien. Sie werden als MLCT1 und MLCT2 bezeichnet. Beide haben einen gemischten MLCT-Charakter im niedrigsten angeregten Zustand. Die ausführlichen Daten für ihre Metall-Liganden-Transfer-Charakteristiken werden im nächsten Unterkapitel diskutiert.

Der Diederwinkel des planaren S_{MLCT1} beträgt 45.5° , im Vergleich zu 37° der *GZ.Planar*-Geometrie. Dies resultiert in einer erheblichen Abweichung von 8.5° , wodurch die Molekülstruktur einer querliegenden Form ähnelt. Im Gegensatz dazu weist der orthogonale Konformer S_{MLCT1} einen Diederwinkel von 108.2° auf,

verglichen mit 90.2° der [GZ_Ortho](#)-Geometrie. Die deutliche Differenz von 18.2° zeigt, dass im Vergleich zur perfekt orthogonalen Struktur des [GZ_Ortho](#), der Winkel des S_{MLCT1} merklich geneigt ist.

1. S_{MLCT1} : Im Vergleich zum [GZ_Planar](#) weist der planare S_{MLCT1} signifikante Winkeländerungen auf. Der Winkel $4(N)-2(C)-1(Cu)$ hat sich um 13.9° verringert, während $3(N)-2(C)-1(Cu)$ um 11° zugenommen hat. Der Winkel $2(C)-1(Cu)-33(N)$ hat sich um 25.1° verringert, und $2(C)-1(Cu)-44(N)$ hat sich um 19.6° erhöht. Das Diagramm für den planaren S_{MLCT1} wird in [Abbildung 14](#) gezeigt. Aus dem Diagramm ist eine deutliche Änderung der Geometrie erkennbar. Das Kupferatom bildet eine Bindung mit dem Kohlenstoffatom im Phenylring des NHC, während im [GZ_Planar](#) keine solche Verbindung besteht. Das gesamte Molekül ist geknickt, was zu einer veränderten molekularen Geometrie führt und die C_2 -Symmetrie des Moleküls aufhebt.

Für das orthogonale S_{MLCT} -Konformer sind die markantesten Winkeländerungen bei $2(C)-1(Cu)-33(N)$ zu beobachten. Im Vergleich zur GZ_{Ortho} -Konformation hat sich dieser Winkel um 26.2° erhöht. Der Winkel $2(C)-1(Cu)-44(N)$ hat sich um 31.2° verringert, was darauf hindeutet, dass das N-heterocyclische Carben (NHC) eine Tendenz zeigt, sich in Richtung der Seite mit dem kleineren Winkel zu biegen.

Bei den Bindungslängen zeigt das planare S_{MLCT2} -Konformer Unterschiede zur [GZ_Planar](#)-Geometrie. Beispielsweise hat sich die Bindungslänge zwischen $1(Cu)$ und $44(N)$ von $2,10 \text{ \AA}$ auf $2,00 \text{ \AA}$ um $0,10 \text{ \AA}$ verringert. Im orthogonalen Konformer ist die Bindungslänge zwischen $1(Cu)$ und $44(N)$ von $2,08 \text{ \AA}$ auf $1,99 \text{ \AA}$ um $0,09 \text{ \AA}$ gesunken, während die Bindungslänge zwischen $1(Cu)$ und $33(N)$ von $2,09 \text{ \AA}$ auf $1,95 \text{ \AA}$ um $0,14 \text{ \AA}$ reduziert wurde.

2. S_{MLCT2} : Bei dem planaren S_{MLCT2} -Konformer ist der Diederwinkel mit 39.3° nur geringfügig größer als der von 37° der [GZ_Planar](#)-Geometrie. Eine Abweichung von lediglich 2.3° deutet auf eine relativ geringe strukturelle Veränderung hin. Hingegen zeigt der orthogonale S_{MLCT2} -Konformer mit einem Diederwinkel von 74.8° eine große Abweichung von der [GZ_Ortho](#)-Geometrie, die 90.2° beträgt. Diese Differenz von 15.4° unterstreicht eine deutlich geneigte Struktur in dem S_{MLCT2} -Konformer im Vergleich zur ideal orthogonalen Anordnung des [GZ_Ortho](#).

In den Winkeln weist das planare S_{MLCT2} -Konformer deutliche Unterschiede auf. Beispielsweise hat der Winkel $2(C)-1(Cu)-33(N)$ eine Vergrößerung

um 14.2° (von 141.0° auf 155.2°) und $2(\text{C})-1(\text{Cu})-44(\text{N})$ eine Verringerung um 17.9° (von 141.0° auf 123.1°) erfahren. Aus der Abbildung 15 wird erkannt, dass die Struktur in dem planaren $S_{\text{MLCT}2}$ -Konformer immer noch geknickt ist. Allerdings besteht die Bindung zwischen dem Kupferatom und dem Kohlenstoffatom im Phenylring des NHC, die in dem $S_{\text{MLCT}1}$ -Konformer beobachtet wurde, in dem $S_{\text{MLCT}2}$ -Konformer nicht mehr, da der Abstand zwischen diesen Atomen größer geworden ist. Bei der orthogonalen Geometrie ist der Winkel $2(\text{C})-1(\text{Cu})-33(\text{N})$ um 24.2° (von 138.5° auf 114.3°) gesunken und der Winkel $2(\text{C})-1(\text{Cu})-44(\text{N})$ um 20.5° (von 142.2° auf 162.7°) gestiegen.

Bei den Bindungslängen zeigt das planare $S_{\text{MLCT}2}$ -Konformer ebenfalls einige Unterschiede zur [GZ.Planar](#)-Geometrie. Zum Beispiel ist die Bindungslänge zwischen $1(\text{Cu})$ und $33(\text{N})$ von $2,10 \text{ \AA}$ auf $2,01 \text{ \AA}$ um $0,09 \text{ \AA}$ erfahren. In dem orthogonalen Konformer ist die Bindungslänge zwischen $1(\text{Cu})$ und $44(\text{N})$ von $2,08 \text{ \AA}$ auf $1,99 \text{ \AA}$ gesunken, was eine stärkere Interaktion zwischen diesen Atomen impliziert.

Tabelle 8: Vergleich ausgewählter Bindungswinkel zwischen der $S_{\text{MLCT}1}$ -Geometrie, $S_{\text{MLCT}2}$ -Geometrie und der Grundzustandsgeometrie der planaren und orthogonalen Konformer

Winkel	GZ		SMLCT1		SMLCT2	
	Planar [°]	Ortho [°]	Planar [°]	Ortho [°]	Planar [°]	Ortho [°]
$4(\text{N})-2(\text{C})-1(\text{Cu})$	122.2	121.8	108.3	114.1	129.5	116.5
$3(\text{N})-2(\text{C})-1(\text{Cu})$	122.1	121.8	133.1	126.6	112.7	124.3
$2(\text{C})-1(\text{Cu})-33(\text{N})$	141.0	138.5	115.9	164.7	155.2	114.3
$2(\text{C})-1(\text{Cu})-44(\text{N})$	141.0	142.2	160.6	111.0	123.1	162.7

Tabelle 9: Vergleich ausgewählter Bindungslängen zwischen der S_{MLCT1} -Geometrie, S_{MLCT2} -Geometrie und der Grundzustandsgeometrie der planaren und orthogonalen Konformerer

Bindungslänge	GZ		SMLCT1		SMLCT2	
	Planar [Å]	Ortho [Å]	Planar [Å]	Ortho [Å]	2Planar [Å]	2Ortho [Å]
6(C)-9(O)	1.23	1.24	1.23	1.23	1.22	1.22
6(C)-4(N)	1.45	1.44	1.45	1.45	1.45	1.44
4(N)-2(C)	1.35	1.35	1.33	1.33	1.34	1.34
3(N)-2(C)	1.35	1.35	1.33	1.33	1.34	1.34
2(C)-1(Cu)	1.92	1.90	1.96	1.94	1.96	1.93
1(Cu)-44(N)	2.10	2.08	2.00	1.99	2.11	1.99
1(Cu)-33(N)	2.10	2.09	2.04	1.95	2.01	2.09
5(C)-8(O)	1.23	1.24	1.22	1.23	1.22	1.22

Das Abknicken in den MLCT-Zustandsgeometrien erfolgt aufgrund des **Pseudo-Jahn-Teller-Effekt (PJTE)**. Dieses Phänomen bewirkt eine Verzerrung in der Geometrie. Der Effekt tritt auf, wenn ein Molekül im angeregten Zustand eine andere Geometrie als im Grundzustand annimmt, um eine niedrigere Energie zu erreichen. Dies äußert sich in Veränderungen der Bindungswinkel und -längen zwischen den beteiligten Atomen, insbesondere zwischen Kupfer (Cu), Stickstoff (N) und Kohlenstoff (C). Änderungen der Bindungswinkel um das Cu-Atom können eine Verzerrung des gesamten Moleküls bewirken, um einen energetisch günstigeren Zustand zu erreichen. Solche Anpassungen können die elektronische Struktur des Moleküls beeinflussen und somit dessen physikalische und chemische Eigenschaften verändern. Eine Verkürzung der Bindungslänge deutet auf eine stärkere, eine Verlängerung auf eine schwächere Bindung hin.

Die Geometrien der Abbildungen 12 13 entsprechen den Abbildungen 14 15. Die Geometrien der Abbildungen 16 17 entsprechen den Abbildungen 18 19. Es gibt große Unterschiede in der Differenzdichte zwischen S_{MLCT1} und S_{MLCT2} , wobei die roten Bereiche in die Richtung der Verdrehung neigen (ähnlich wie Z_2 -Orbital), also in die Richtung, in der ein größerer Elektronenverlust stattfindet, was auch die tatsächliche Neigung des Moleküls ist. Wenn das Metallzentrum Elektronen verliert, schrumpft seine Elektronenwolke. Diese Veränderung beeinflusst die Wechselwirkungen zwischen dem Metall und den umliegenden Atomen (wie die Bindung des Kupferatoms und des Kohlenstoffatoms im Phenyling des NHC in der planaren S_{MLCT1} Zustandsgeometrie). Die Verringerung der Elektronendichte kann dazu führen, dass die Bindungen zwischen dem Metallzentrum und den umgebenden Atomen enger werden wodurch die gesamte Molekülstruktur in Richtung des Elektronenverlustes verdreht wird, um eine stabilere Elektronenkonfiguration zu erreichen.

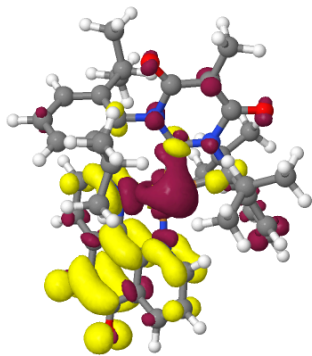


Abbildung 12: Differenzdichte der S_1 -Zustandes an der planaren S_{MLCT1} -Geometrie (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.

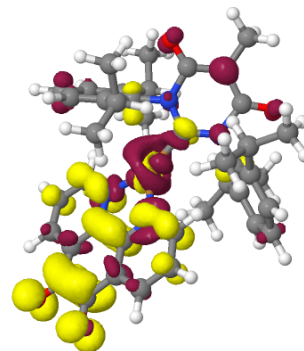


Abbildung 13: Differenzdichte der S_1 -Zustandes an der planaren S_{MLCT2} -Geometrie (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.

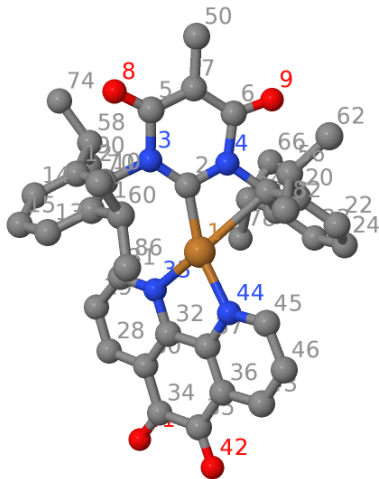


Abbildung 14: S_{MLCT1} -Geometrie des planaren Konformers von *An6DAC-Cu-5,6-Dikphen*.

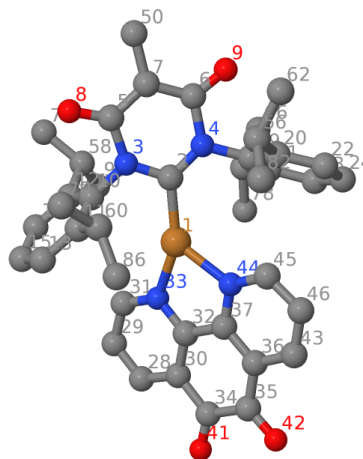


Abbildung 15: S_{MLCT2} -Geometrie des planaren Konformers von *An6DAC-Cu-5,6-Dikphen*.

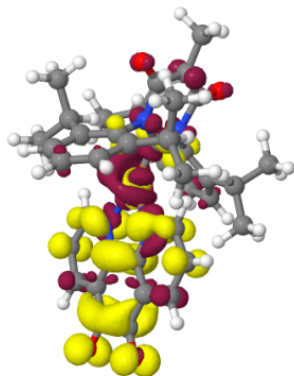


Abbildung 16: Differenzdichte der S_1 -Zustandes an der orthogonalen S_{MLCT1} -Geometrie (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.

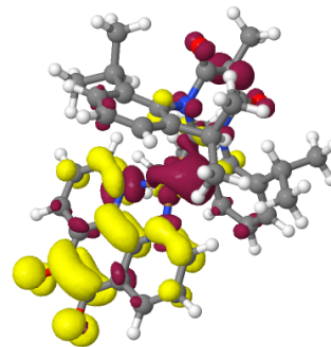


Abbildung 17: Differenzdichte der S_1 -Zustandes an der orthogonalen S_{MLCT2} -Geometrie (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.

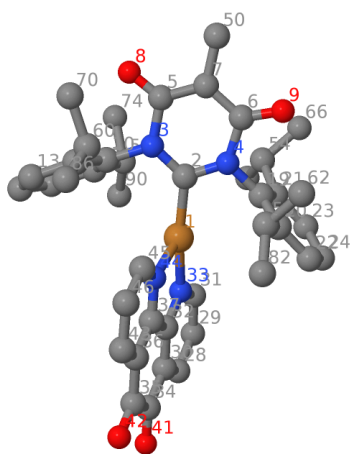


Abbildung 18: S_{MLCT1} -Geometrie des orthogonalen Konformers von An6DAC-Cu-5,6-Dikphen.

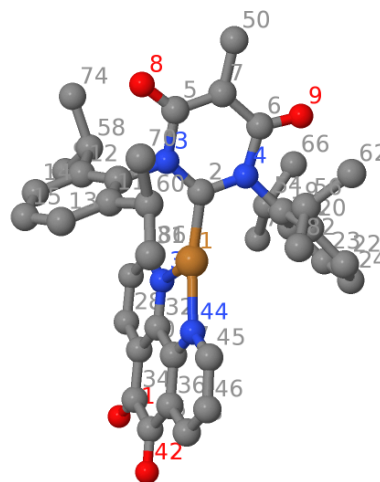


Abbildung 19: S_{MLCT2} -Geometrie des orthogonalen Konformers von An6DAC-Cu-5,6-Dikphen.

T_{npi}-Geometrie:

Im Vergleich zum [GZ_Planar](#) gibt es bei der *T_{npi}*-Geometrie keine signifikanten Unterschiede in Bezug auf Diederwinkel, Winkel und Bindungslänge.

*Tabelle 10: Vergleich ausgewählter Bindungswinkel zwischen der planaren *T_{npi}*-Geometrie und der [GZ_Planar](#)-Konformerer*

Winkel	GZ	<i>T_{npi}</i>
	Planar [°]	Planar [°]
4(N)-2(C)-1(Cu)	122.2	122.2
3(N)-2(C)-1(Cu)	122.1	122.1
2(C)-1(Cu)-33(N)	141.0	140.7
2(C)-1(Cu)-44(N)	141.0	140.6

Für das *T_{npi}*-Konformer ändert sich die Bindungslänge von 35(C)-42(O) im Allgemeinen erheblich [9]. Es ist erwähnenswert, dass die Änderung der Bindungslänge bei diesem Molekül sehr gering ist. Sie ändert sich von 1,21 im Grundzustand auf *T_{npi}*-Konformer 1,22. Dies ist wahrscheinlich darauf zurückzuführen, dass der angeregte Zustand hauptsächlich einen Übergang von einem nicht-bindenden n-Orbital zu einem *-Orbital involviert, der die Elektronendichte im Bereich der C-O-Bindung nicht direkt beeinflusst.

*Tabelle 11: Vergleich ausgewählter Bindungslängen zwischen der planaren *T_{npi}*-Geometrie und der [GZ_Planar](#)-Konformerer*

Bindungslänge	GZ	<i>T_{npi}</i>
	Planar [Å]	Planar [Å]
6(C)-9(O)	1.23	1.23
6(C)-4(N)	1.45	1.45
4(N)-2(C)	1.35	1.35
3(N)-2(C)	1.35	1.35
2(C)-1(Cu)	1.92	1.92
1(Cu)-44(N)	2.10	2.11
1(Cu)-33(N)	2.10	2.11
5(C)-8(O)	1.23	1.23
35(C)-42(O)	1.21	1.22

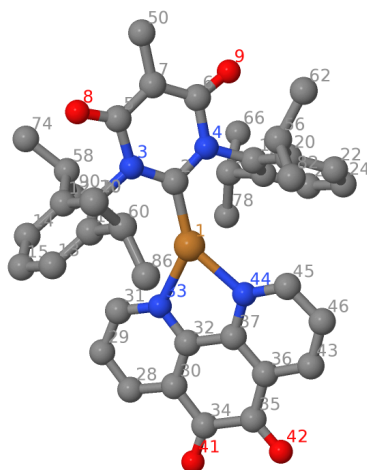


Abbildung 20: $T_{n\pi}$ -Geometrie des planaren Konformers von *An6DAC-Cu-5,6-Dikphen*

4.2.2 Angeregte Zustände

Wie bei den Grundzustandsgeometrien wurden an allen erwähnten Geometrien des S_1 -Zustands jeweils 10 Singulett- und 10 Triplett-Zustände mit DFT/MRCI berechnet. Abbildungen 21 und 23 zeigen die adiabatischen Energien basierend auf der *GZ_Planar*-Geometrie und der *GZ_Ortho*-Geometrie sowie deren jeweilige Charaktere. Die Abbildungen 22 und 24 zeigen gleiche Charaktere wie die Abbildungen 21 und 23. Allerdings wurde der y-Achsenbereich (Anregungsenergie) auf 1,5 bis 3,5 eV eingeschränkt, um die Ähnlichkeiten und Unterschiede zwischen den angeregten Zuständen besser zu visualisieren. Der Grundzustand wurde dabei ausgelassen. Es ist zu beachten, dass in den Abbildungen lediglich die ersten fünf Singulett- und die ersten fünf Triplett-Zustände dargestellt sind. Die energieniedrigeren angeregten Zustände haben einen signifikanten Einfluss auf die Photophysik des Moleküls. Im Anhang sind Informationen zu allen Charakteren der Geometrien aufgeführt.

Da die Besetzung des $T_{n\pi}$ -Zustandes von LC $n \rightarrow \pi^*$ zu LLCT-Geometrie relativiert und die anschließende Energie-Relaxation ebenfalls mit der LLCT-Geometrie identisch ist, werden wir seinen Charakter hier nicht im Detail diskutieren.

1. Planare Konformere:

- (a) S_{LLCT} und T_{LLCT} : Die elektronische Struktur der Zustände an der S_{LLCT} und T_{LLCT} Geometrie ist ähnlich, wobei die Energie in der Reihenfolge von niedrig bis hoch folgendermaßen verteilt ist: **LLCT** $\pi \rightarrow \pi^*$, **MLCT** $d_{xz} \rightarrow \pi^*$, **MLCT** $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$, **LC** $n \rightarrow \pi^*$. Bei S_{LLCT} und T_{LLCT}

ist der niedrigste angeregte Zustand S_1 bzw. T_1 vom Charakter **LLCT** $\pi \rightarrow \pi^*$, bei dem die Elektronen von **HOMO** zu **LUMO** übergehen, d.h. von **NHC** zu Diketophenanthrolin-Liganden. Die adiabatische Energie des S_1 -Zustands S_{LLCT} beträgt $1,739 \text{ eV}$. Die adiabatische Energie des T_1 -Zustands T_{LLCT} beträgt $1,700 \text{ eV}$. Die Energiedifferenz beträgt $0,039 \text{ eV}$, was weniger als $0,1 \text{ eV}$ ist.

- (b) **S_{MLCT1} und T_{MLCT1}** : Die Charaktere der Zustände an den Geometrien S_{MLCT1} und T_{MLCT1} sind in aufsteigender Reihenfolge **MLCT** Mischung $d_{xz} \rightarrow \pi^* d_{z^2} \rightarrow \pi^*$, **LLCT** $\pi \rightarrow \pi^*$, **MLCT** Mischung $xz \rightarrow \pi^* z^2 \rightarrow \pi^*$ sowie **LC** $n \rightarrow \pi^*$. Dabei ähneln sich **MLCT** Mischung $xz \rightarrow \pi^* d_{z^2} \rightarrow \pi^*$ und **MLCT** Mischung 2 $d_{xz} \rightarrow \pi^* d_{z^2} \rightarrow \pi^*$, aber der erstere ist eine Anregung von **HOMO-1** nach **LUMO**, der letztere von **HOMO-1** nach **LUMO+1**. Der niedrigste angeregte Zustand S_1 bzw. T_1 ist vom Charakter **MLCT** Mischung $d_{xz} \rightarrow \pi^* d_{z^2} \rightarrow \pi^*$. Die Elektronen werden vom **HOMO-1** zu **LUMO** übertragen, d.h. von Kupferatom zu Diketophenanthrolin-Liganden. Die adiabatische Energie des S_1 -Zustands beträgt $1,796 \text{ eV}$, während die des T_1 -Zustands $1,747 \text{ eV}$ beträgt. Die Energiedifferenz beträgt $0,049 \text{ eV}$, was weniger als $0,1 \text{ eV}$ ist.
- (c) **S_{MLCT2} und T_{MLCT2}** : An den S_{MLCT2} und T_{MLCT2} reichen die Charaktere von niedrig nach hoch von **MLCT** Mischung $d_{xz} \rightarrow \pi^* d_{z^2} \rightarrow \pi^*$, **LLCT** $\pi \rightarrow \pi^*$, **MLCT** Mischung + **LC** bis zu **LC** $n \rightarrow \pi^*$. Dabei ist die **MLCT**-Mischung in **MLCT** Mischung + **LC** schwer zu identifizieren, daher wird sie allgemein als **MLCT** Mischung bezeichnet. Der niedrigste angeregte Zustand S_1 bzw. T_1 ist vom Charakter **MLCT** Mischung $d_{xz} \rightarrow \pi^* d_{z^2} \rightarrow \pi^*$. Die Elektronen sind ähnlich wie im **MLCT1** übertragen. Die adiabatische Energie des S_1 -Zustands beträgt $1,929 \text{ eV}$, während die des T_1 -Zustands $1,878 \text{ eV}$ beträgt. Die Energiedifferenz beträgt $0,051 \text{ eV}$, was weniger als $0,1 \text{ eV}$ ist. Die Energie des S_1 -Zustands an der T_{MLCT2} -Geometrie beträgt $1,941 \text{ eV}$, während die des T_1 -Zustands $1,891 \text{ eV}$ beträgt. Die Energiedifferenz beträgt $0,050 \text{ eV}$, was weniger als $0,1 \text{ eV}$ ist.

2. Orthogonale Konformere:

- (a) **S_{LLCT} und T_{LLCT}** : Für die S_{LLCT} und T_{LLCT} Geometrien ist die Reihenfolge der Charaktere mit aufsteigender Energie wie folgt: Zuerst **LLCT** $\pi \rightarrow \pi^*$, gefolgt von **MLCT** $d_{yz} \rightarrow \pi^*$, dann **MLCT** $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$, und schließlich **LC** $n \rightarrow \pi^*$. Die Energie des S_1 -Zustands an der S_{LLCT} -Geometrie beträgt $1,714 \text{ eV}$, während die des T_1 -Zustands $1,672 \text{ eV}$ beträgt. Die Energiedifferenz beträgt $0,042 \text{ eV}$, was weniger als $0,1$

eV ist. Die Energie des S_1 -Zustands von der T_{LLCT} beträgt $1,719 eV$, während die des T_1 -Zustands $1,678 eV$ beträgt. Die Energiedifferenz beträgt $0,041 eV$, was weniger als $0,1 eV$ ist.

(b) **S_{MLCT1} und T_{MLCT1}** : Die S_{MLCT1} - und T_{MLCT1} -Geometrie zeigen eine aufsteigende Folge von elektronisch angeregten Zuständen, beginnend mit **MLCT** Mischung $2 d_{yz} \rightarrow \pi^* d_{z^2} \rightarrow \pi^*$, gefolgt von **MLCT** Mischung $2 d_{yz} \rightarrow \pi^* d_{z^2} \rightarrow \pi^*$, **LLCT** $\pi \rightarrow \pi^*$ und schließt mit **LC** $n \rightarrow \pi^*$ ab. Die Energie des S_1 -Zustands an der S_{MLCT1} -Geometrie beträgt $1,962 eV$, während die des T_1 -Zustands $1,909 eV$ beträgt. Die Energiedifferenz beträgt $0,053 eV$, was weniger als $0,1 eV$ ist. Die Energie des S_1 -Zustands an der T_{MLCT1} -Geometrie beträgt $1,946 eV$, während die des T_1 -Zustands $1,893 eV$ beträgt. Die Energiedifferenz beträgt $0,053 eV$, was weniger als $0,1 eV$ ist.

(c) **S_{MLCT2} und T_{MLCT2}** : Die Charaktere der elektronisch angeregten Zustände an den S_{MLCT2} und T_{MLCT2} Geometrien reichen von einer **MLCT** Mischung $d_{yz} \rightarrow \pi^* d_{z^2} \rightarrow \pi^*$ über **LLCT** $\pi \rightarrow \pi^*$ und **MLCT2** Mischung $d_{xz} \rightarrow \pi^*$ und $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$ bis hin zu **LC** $n \rightarrow \pi^*$. Die Energie des S_1 -Zustands an der S_{MLCT2} -Geometrie beträgt $1,773 eV$, während die des T_1 -Zustands $1,725 eV$ beträgt. Die Energiedifferenz beträgt $0,048 eV$, was weniger als $0,1 eV$ ist. Die Energie des S_1 -Zustands an der T_{MLCT2} -Geometrie beträgt $1,774 eV$, während die des T_1 -Zustands $1,726 eV$ beträgt. Die Energiedifferenz beträgt $0,048 eV$, was weniger als $0,1 eV$ ist.

Unabhängig davon, ob es sich um planare oder orthogonale Konformer handelt, weist **LLCT**-Zustandsgeometrie stets die niedrigste Zustandsgeometrie-Energie auf, und sein niedrigster angeregter Zustand S_1 hat die niedrigste adiabatische Anregungsenergie. Die S_1 Anregungsenergie von **MLCT1** ist deutlich höher als die von **MLCT2**, und die Energie von ortho **MLCT1** ist wesentlich höher als die von planar **MLCT1**.

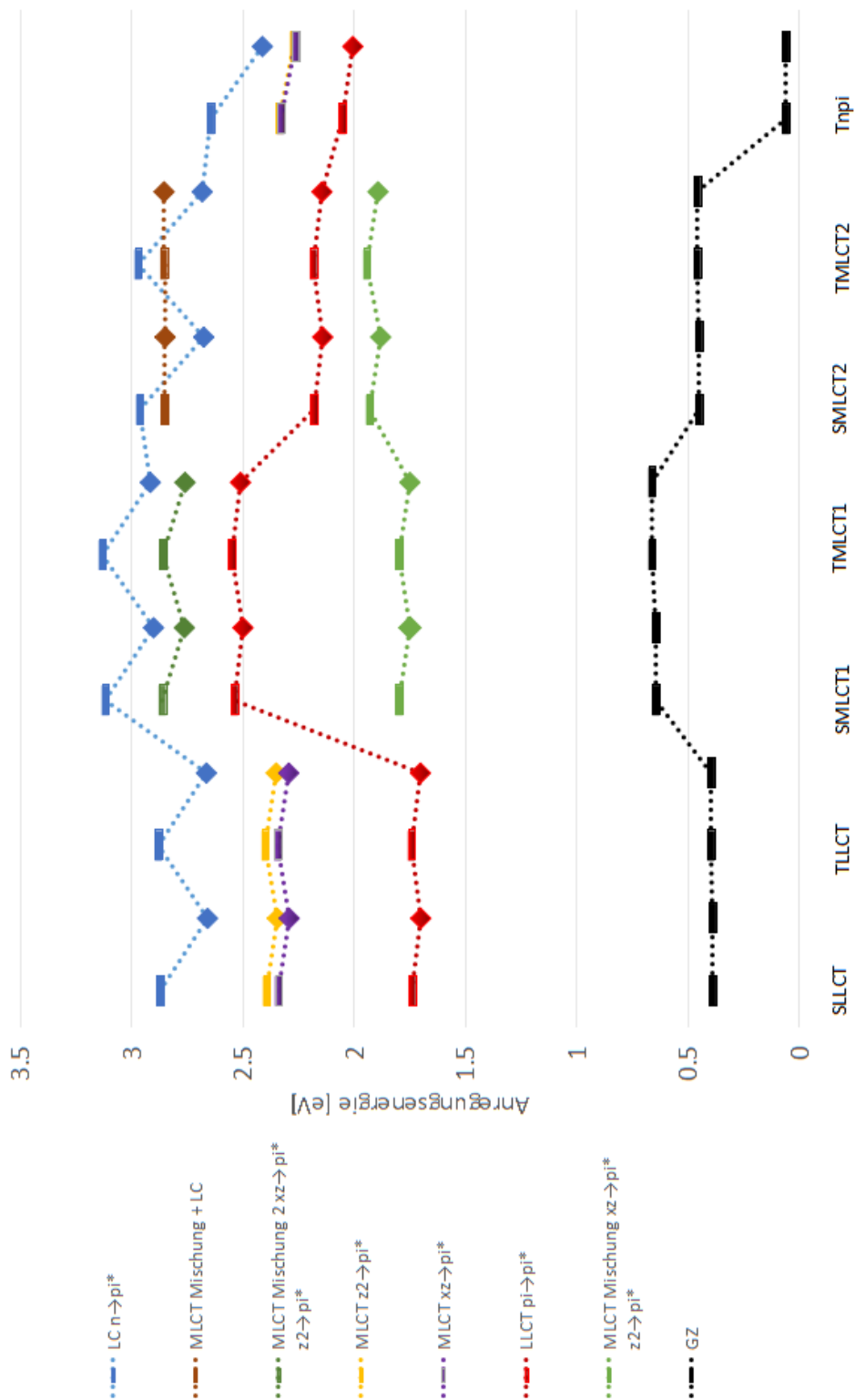


Abbildung 21: Charakterisierung der Elektronenübergänge für alle planaren angeregten Zustände-Geometrien. Die DFT/MRCI-Anregungsenergien [eV] beziehen sich auf die Grundzustandsenergie des *GZ*-Planar Konformers. Singulettenergien sind durch waagerechte Balken, Triplettenergien durch Rauten symbolisiert.

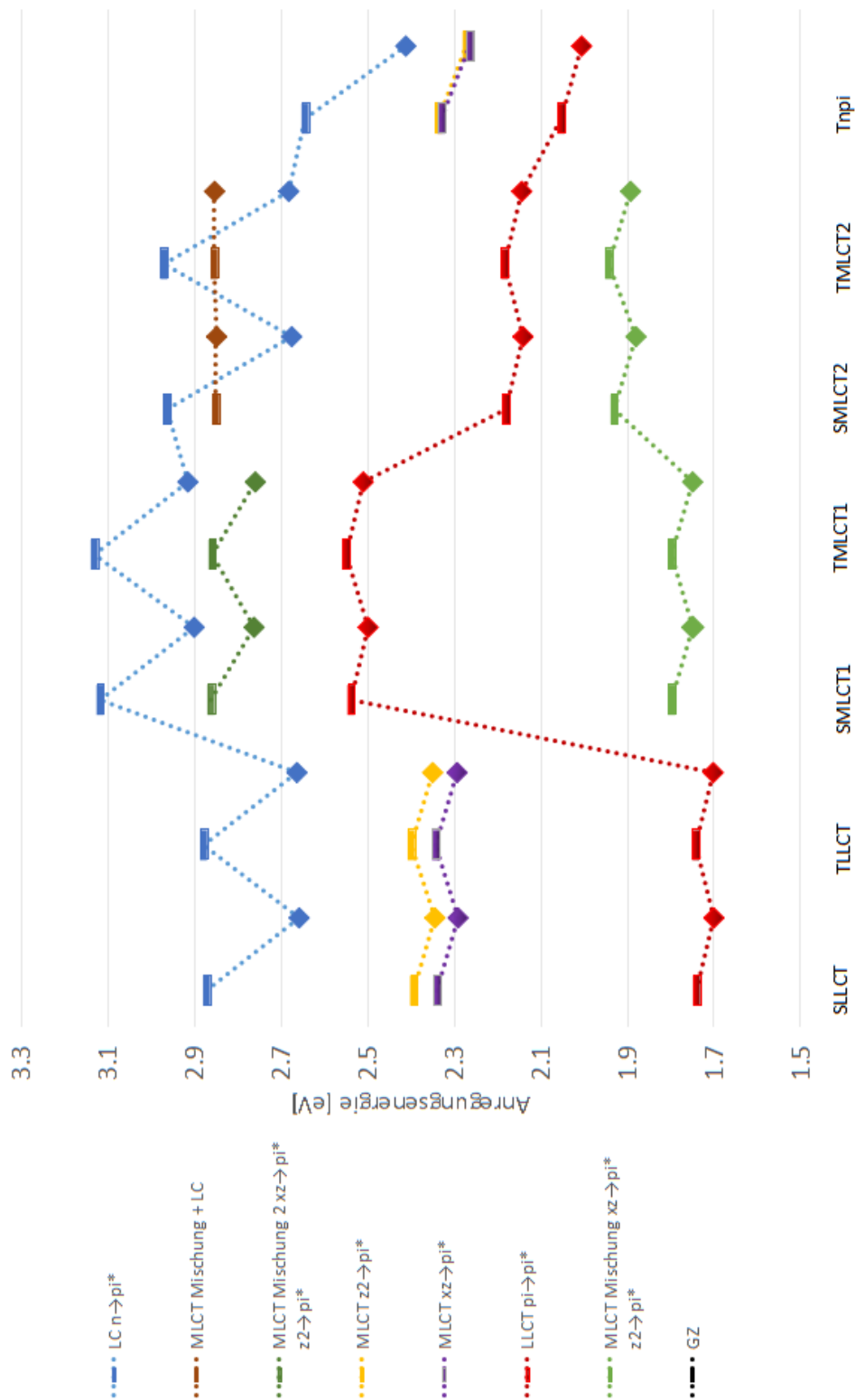


Abbildung 22: Charakterisierung der Elektronenübergänge für alle planaren angeregten Zustandsgeometrien Ohne Grundzustand, Anregungsenergien zwischen 1,5 und 3,5 eV. Die DFT/MRCI-Anregungsenergien [eV] beziehen sich auf die Grundzustandsenergie des *GZ_Planar* Konformers. Singulettenergien sind durch waagerechte Balken, Triplettenergien durch Rauten symbolisiert.

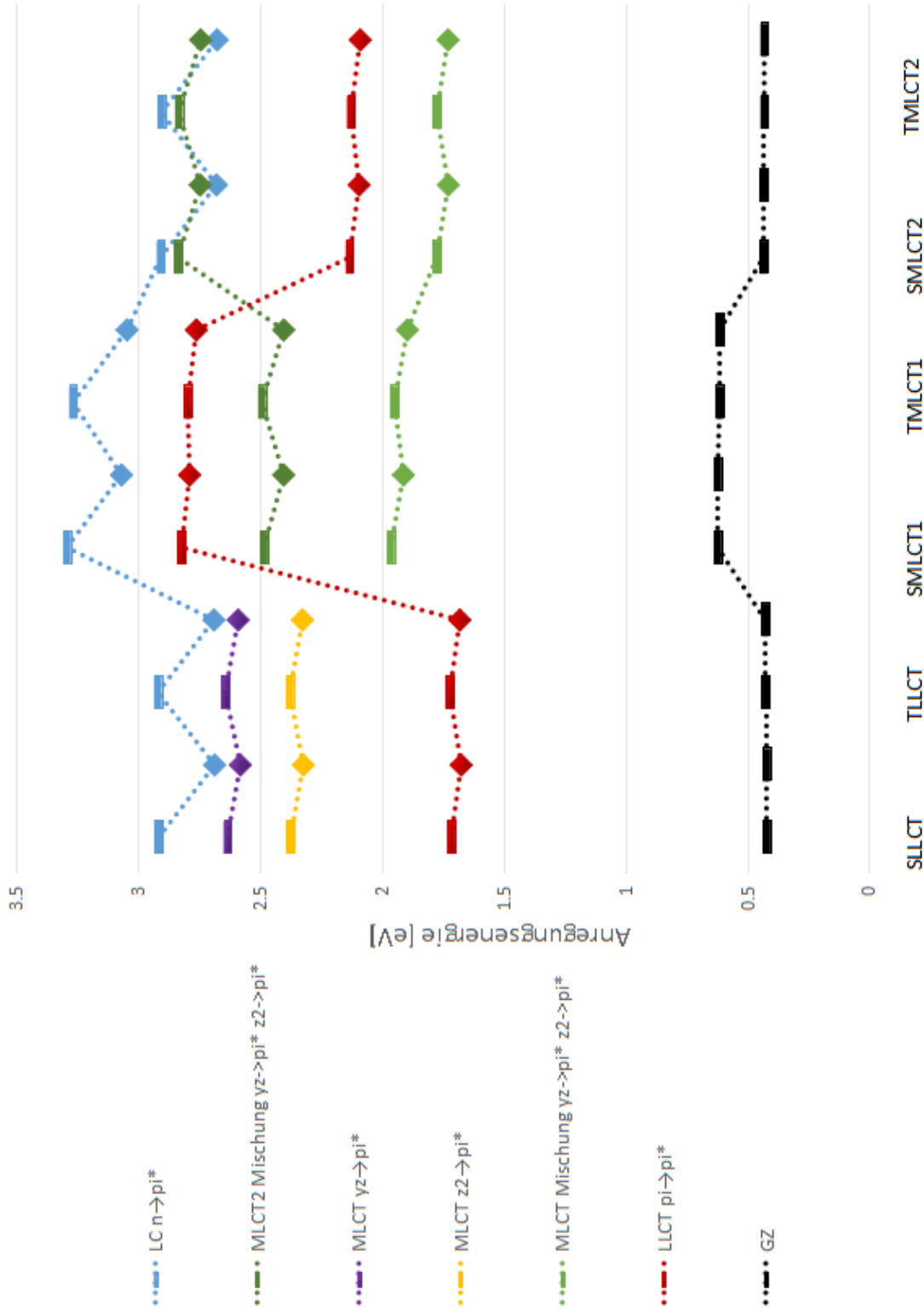


Abbildung 23: Charakterisierung der Elektronenübergänge für alle orthogonalen angeregten Zustandsgeometrien. Die DFT/MRCI-Anregungsenergien [eV] beziehen sich auf die Grundzustandsenergie des *GZ-Ortho* Konformers. Singulettenergien sind durch waagerechte Balken, Triplettenergien durch Rauten symbolisiert.

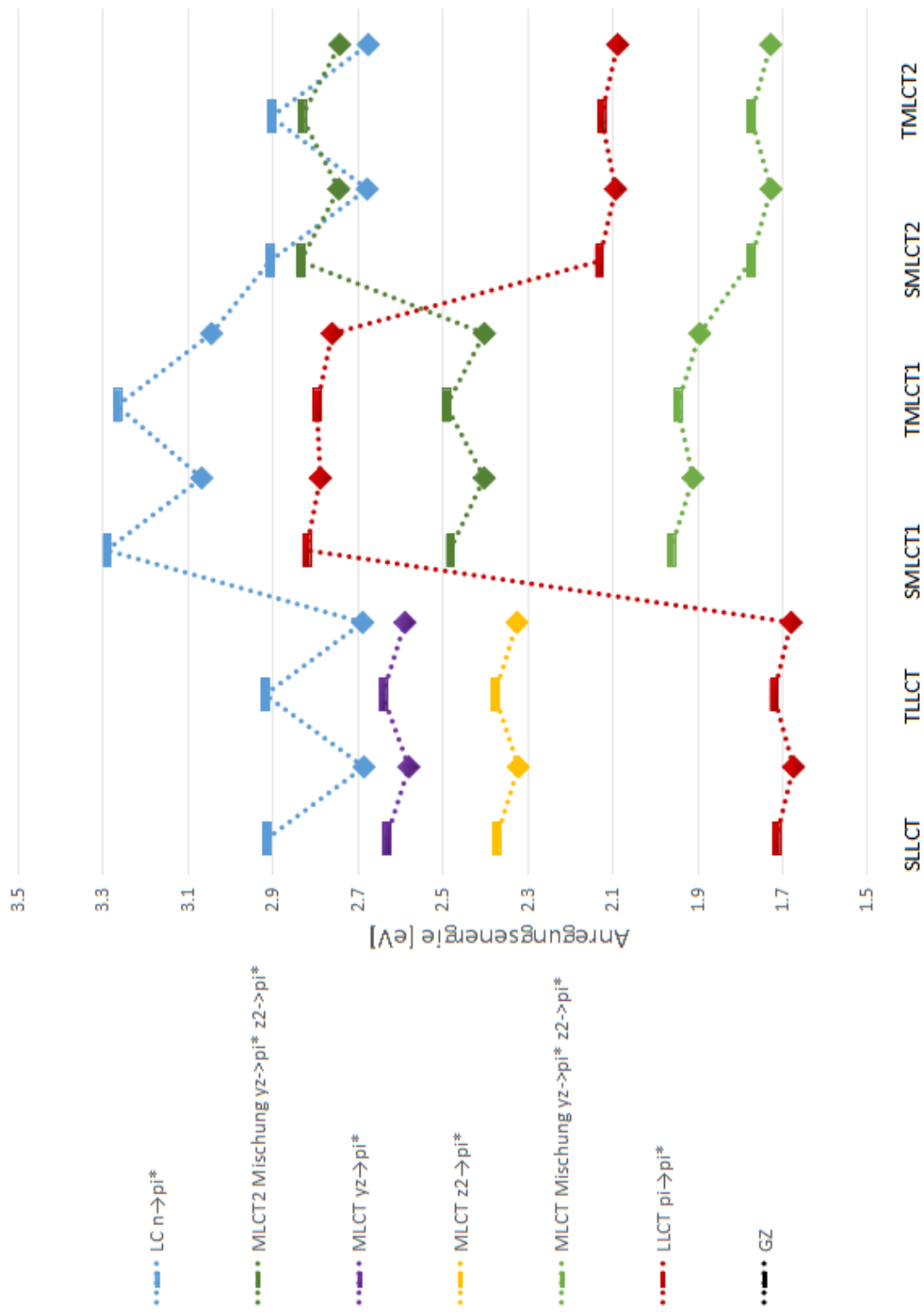


Abbildung 24: Charakterisierung der Elektronenübergänge für alle orthogonalen angeregten Zustandsgeometrien Ohne Grundzustand, Anregungsenergien zwischen 1,5 und 3,5 eV. Die DFT/MRCI-Anregungsenergien [eV] beziehen sich auf die Grundzustandsenergie des GZ-Ortho Konformers. Singulettenergien sind durch waagerechte Balken, Triplettenergien durch Rauten symbolisiert.

Tabelle 12: Fluoreszenzrate und weitere Eigenschaften für verschiedene Zustände in Planar und Ortho-Konfigurationen

Zustand	Fluoreszenz Rate [s ⁻¹]	ΔE [nm]	Farbe	Dipolmoment [Debye]	Oszillatorstärke
Planar					
S _{LLCT}	2.95 · 10 ⁴	918	nahes Infrarot	18,49 → 16,20	0,00037
T _{LLCT}	-	2095	nahes Infrarot	2,61 → 18,5	-
S _{MLCT1}	1.60 · 10 ³	1075	nahes Infrarot	4,73 → 14,82	0,00003
T _{MLCT1}	-	1629	nahes Infrarot	20,51 → 4,61	-
S _{MLCT2}	4.58 · 10 ³	838	nahes Infrarot	4,44–15,24	0,00005
T _{MLCT2}	-	4929	nahes Infrarot	20,23 → 4,29	-
Ortho					
S _{LLCT} Ortho	0,5	958	nahes Infrarot	17,45 → 16,94	0
T _{LLCT} Ortho	-	1921	nahes Infrarot	2,56 → 17,48	-
S _{MLCT1} Ortho	8.41 · 10 ³	925	nahes Infrarot	5,08 → 15,95	0,00011
T _{MLCT1} Ortho	-	2445	nahes Infrarot	5,87 → 4,66	-
S _{MLCT2} Ortho	3.40 · 10 ³	925	nahes Infrarot	6,10 → 16,11	0,00004
T _{MLCT2} Ortho	-	3443	nahes Infrarot	17,87 → 5,98	-

Die Fluoreszenzrate und weitere Eigenschaften sind in Tabelle 12 zusammengefasst. Dabei ist erkennbar, dass das emittierte Licht ausschließlich im nahen Infrarotbereich liegt und kein sichtbares Licht emittiert wird. Die höchste Fluoreszenzrate, die im Bereich von 10⁴ s⁻¹ liegt, findet sich bei der planaren S_{LLCT}-Geometrie mit einem Wert von 2.95 · 10⁴ s⁻¹. Im Vergleich zu anderen Singulett-Zustandsgeometrien besitzt dieser Zustand auch die größte Oszillatorstärke mit einem Wert von 0,00037. Die niedrigste Fluoreszenzrate wird bei der orthogonalen S_{LLCT}-Geometrie beobachtet, da dessen Oszillatorstärke null ist. Eine Oszillatorstärke von null bei der orthogonalen S_{LLCT}-Geometrie bedeutet, dass im Rahmen der Quantenmechanik der elektronische Übergang vom Grundzustand zum orthogonalen S_{LLCT}-Zustand streng verboten ist. Die Oszillatorstärke ist direkt mit der Erlaubnis des Übergangs verbunden und zeigt an, wie effektiv ein elektronischer Übergang Licht absorbieren oder emittieren kann. Da die Wellenlänge des Infrarotlichts länger und die Energie niedriger ist, erscheint dieser Größenordnungsbereich plausibel. Triplett-Zustände emittieren keine Fluoreszenz, sondern Phosphoreszenz, welche in dieser Bachelorarbeit nicht diskutiert wird.

5 Diskussion

In dieser Bachelorarbeit wurde untersucht, ob [An6DAC-Cu-5,6-Dikphen](#) als effektiver TADF-Emitter dienen könnte.

Es gibt mehrere Kriterien, aber wir konzentrieren uns auf zwei Hauptaspekte: Erstens, ob die Energiedifferenz zwischen S_1 und T_1 ausreichend klein ist (weniger als 0,1 eV [4]), und zweitens, ob die Fluoreszenzrate hoch genug ist (im Bereich von 10^6 bis 10^7) und sichtbares Licht emittiert wird.

[An6DAC-Cu-5,6-Dikphen](#) hat zwei Konformere, eines annähernd planar und eines orthogonal. Nach der Suche nach Minima im S_1 -Zustand wurden insgesamt 13 optimierte Geometrien mit globalen Minima entdeckt, zusätzlich zu den zwei Grundzustandsgeometrien. Dies deutet darauf hin, dass das Molekül strukturell sehr flexibel ist und viele Formen in einem stabilen Zustand halten kann. Bei der Berechnung der Energiedifferenz zwischen S_1 und T_1 für jeden angeregten Zustand stellten wir fest, dass die Energiedifferenz für alle angeregten Zustandsgeometrien kleiner als 0,1, sogar kleiner als 0,05 ist, was das erste Kriterium für einen TADF-Emitter erfüllt. Andererseits waren die Ergebnisse für die Fluoreszenzrate und die Wellenlänge des emittierten Lichts nicht zufriedenstellend, da ausschließlich nahes Infrarot emittiert wurde und die Fluoreszenzraten sich im Bereich von 10^3 bis 10^4 bewegten. Dies ist logisch, da Infrarot niedrigere Energie hat und eine Fluoreszenzrate mit der dritten Potenz der Emissionsenergie skaliert, aber es erfüllt nicht das Kriterium der Größenordnung 10^6 bis 10^7 . TADF-Technologie ist der Kern der dritten Generation von OLEDs, die hauptsächlich für Bildschirmanzeigen verwendet werden. Da jedoch dieses Molekül kein sichtbares Licht emittieren kann, ist es kein geeigneter TADF-Emitter.

Im Vergleich zu [An6DAC-Cu-bis-\(4-Formylpyridin\)](#), das als ausgezeichneter, aber chemisch instabiler TADF-Emitter bestätigt wurde, haben sie Gemeinsamkeiten, wie z.B. den Charakter des niedrigsten angeregten Zustands, der eine Kombination aus LLCT und MLCT ist. [An6DAC-Cu-bis-\(4-Formylpyridin\)](#), das Pyridin-Einheiten mit elektronenabziehenden Substituenten enthält, ist in Lösung am instabilsten. Diese Komplexe dissoziieren sofort bei Auflösung unter Bildung eines weißen Niederschlags. Da [An6DAC-Cu-bis-\(4-Formylpyridin\)](#) bereits Licht mit relativ niedriger Energie emittiert, haben wir versucht, es durch Diketophenanthrolin stabiler in Lösung zu machen, indem wir zwei Formylpyridine ersetzt haben. Dies hat jedoch dazu geführt, dass das emittierte Licht noch niedrigere Energie hat. Daher emittiert [An6DAC-Cu-5,6-Dikphen](#) nur Infrarotlicht.

6 Anhang

Tabelle 13: Energiedifferenzen zwischen S1 und T1 für planare und orthogonale Konformationen

	Planar	Ortho
GS_Planar	0.044817176	0.043238915
SLLCT	0.040327295	0.041579019
TLLCT	0.040572197	0.041497385
SMLCT_XZ	0.048762829	0.05268127
TMLCT_XZ	0.048844463	0.05306223
SMLCT_Z2	0.050449936	0.048055332
TMLCT_Z2	0.050585993	0.047837641
Tnpi	0.04723899	

Tabelle 14: Energiedifferenzen, Oszillatorstärken, Anregungen und Charaktere an der planaren Grundzustandsgeometrie

Zustand	ΔE [eV]	Anregung	Charakter	Dipolmoment [Debye]	Oszillatorstärke
GZ	0.000	-	-	15.36	-
S1	2.195	H \rightarrow L	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	15.3	0.0004
S2	2.455	H-6 \rightarrow L	MLCT ($xz \rightarrow \pi^*$)	6.43	0.00037
S3	2.478	H-1 \rightarrow L	MLCT ($z2 \rightarrow \pi^*$)	3.32	0.0002
S4	2.748	H-14 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	16.21	0.00009
S5	2.981	H \rightarrow L+1	LLCT+MLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$, $xz \rightarrow \pi^*$)	0.46	0.00405
S6	3.216	H-1 \rightarrow L+1	MLCT ($z2 \rightarrow \pi^*$)	2.25	0.00434
S7	3.258	H \rightarrow L+1	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	8.07	0.01475
S8	3.554	H-3 \rightarrow L	LLCT (Ph $\pi \rightarrow \pi^*$)	5.27	0.00332
S9	3.610	H-28 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	16.62	0.00005
S10	3.630	H-8 \rightarrow L	MLCT ($x2 - y2 \rightarrow \pi^*$)	0.79	0.01247
T1	2.150	H \rightarrow L	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	14.7	-
T2	2.396	H-1 \rightarrow L	MLCT ($z2 \rightarrow \pi^*$)	4.32	0.00036
T3	2.401	H \rightarrow L	MLCT ($xz \rightarrow \pi^*$)	6.77	0.08903
T4	2.525	H-14 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	8.68	0.00029
T5	2.883	H-6 \rightarrow L+1	LLCT+MLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$, $xz \rightarrow \pi^*$)	1.1	0.00366
T6	2.910	H-8 \rightarrow L	LC ($\pi \rightarrow \pi^*$)	11.84	0.00007
T7	3.140	H-1 \rightarrow L+1	MLCT ($z2 \rightarrow \pi^*$)	2.97	0.00004
T8	3.166	H \rightarrow L+1	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	7.15	0.00225
T9	3.434	H-28 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	18.14	0.00763
T10	3.524	H-3 \rightarrow L	LLCT (Ph $\pi \rightarrow \pi^*$)	6.81	0.00002

Tabelle 15: Energiedifferenzen, Oszillatorstärken, Anregungen und Charaktere an der orthogonalen Grundzustandsgeometrie

Zustand	ΔE [eV]	Anregung	Charakter	Dipolmoment [Debye]	Oszillatorstärke
GZ	0.000	-	-	16.44	-
S1	2.100	H \rightarrow L	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	15.62	0.0000
S2	2.379	H-1 \rightarrow L	MLCT ($z2 \rightarrow \pi^*$)	2.78	0.00026
S3	2.690	H-5 \rightarrow L	MLCT ($yz \rightarrow \pi^*$)	3.39	0.0000
S4	2.739	H-14 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	17.08	0.00009
S5	2.923	H \rightarrow L+1	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	6.09	0.00004
S6	3.089	H-1 \rightarrow L+1	MLCT ($z2 \rightarrow \pi^*$)	2.69	0.0041
S7	3.447	H-4 \rightarrow L	MLCT+LLCT ($xz \rightarrow \pi^*$, $\pi \rightarrow \pi^*$)	6.92	0.01304
S8	3.463	H-5 \rightarrow L+1	MLCT+LLCT ($yz \rightarrow \pi^*$, $\pi \rightarrow \pi^*$)	1.23	0.00001
S9	3.520	H-2 \rightarrow L	LLCT (Ph $\pi \rightarrow \pi^*$)	4.98	0.00319
S10	3.558	H-11 \rightarrow L	MLCT ($x2 - y2 \rightarrow \pi^*$)	2.57	0.00061
T1	2.057	H \rightarrow L	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	15.54	-
T2	2.316	H-1 \rightarrow L	MLCT ($z2 \rightarrow \pi^*$)	0.52	0.00116
T3	2.490	H-14 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	14.81	0.00106
T4	2.635	H-5 \rightarrow L	MLCT ($yz \rightarrow \pi^*$)	3.68	0.15519
T5	2.862	H \rightarrow L+1	MLCT+LLCT ($yz \rightarrow \pi^*$, $\pi \rightarrow \pi^*$)	4.97	0.00196
T6	2.970	H-9 \rightarrow L	LC ($\pi \rightarrow \pi^*$)	11.84	0.0000
T7	3.030	H-1 \rightarrow L+1	MLCT ($z2 \rightarrow \pi^*$)	2.7	0.00001
T8	3.375	H-4 \rightarrow L+1	MLCT+LLCT ($xz \rightarrow \pi^*$, $\pi \rightarrow \pi^*$)	5.51	0.0001
T9	3.379	H-5 \rightarrow L+1	MLCT+LLCT ($yz \rightarrow \pi^*$, $\pi \rightarrow \pi^*$)	1.5	0.0017
T10	3.487	H-2 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	11.09	0.00127

Tabelle 16: Energiedifferenzen, Oszillatorstärken, Anregungen und Charaktere an der planaren S_{LLCT} Zustandsgeometrie

Zustand	ΔE [eV]	Anregung	Charakter	Dipolmoment [Debye]	Oszillatorstärke
GZ	0.000	-	-	16.2	-
S1	1.351	H \rightarrow L	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	18.49	0.00037
S2	1.950	H-4 \rightarrow L	MLCT ($xz \rightarrow \pi^*$)	2.64	0.00023
S3	2.004	H-1 \rightarrow L	MLCT ($z2 \rightarrow \pi^*$)	3.96	0.00009
S4	2.482	H-14 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	17.67	0.00002
S5	2.582	H \rightarrow L+1	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	8.67	0.01004
S6	3.020	H-4 \rightarrow L+1	MLCT ($xz \rightarrow \pi^*$)	1.63	0.00461
S7	3.088	H-2 \rightarrow L	LLCT (Ph $\rightarrow \pi^*$)	2.13	0.00099
S8	3.111	H-1 \rightarrow L+1	MLCT ($z2 \rightarrow \pi^*$)	0.44	0.00331
S9	3.150	H-8 \rightarrow L	MLCT ($x2 - y2 \rightarrow \pi^*$)	1.15	0.01804
S10	3.166	H-4 \rightarrow L	MLCT ($yz \rightarrow \pi^*$)	6.97	0.00598
T1	1.310	H \rightarrow L	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	18.47	-
T2	1.901	H-4 \rightarrow L	MLCT ($xz \rightarrow \pi^*$)	2.62	0.08038
T3	1.955	H-1 \rightarrow L	MLCT ($z2 \rightarrow \pi^*$)	3.18	0.00023
T4	2.268	H-14 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	17.03	0.00007
T5	2.499	H-8 \rightarrow L	LC ($\pi \rightarrow \pi^*$)	12.65	0.00002
T6	2.512	H \rightarrow L+1	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	7.13	0.00807
T7	2.913	H-4 \rightarrow L+1	MLCT ($xz \rightarrow \pi^*$)	2.96	0.00183
T8	3.038	H-1 \rightarrow L+1	MLCT ($z2 \rightarrow \pi^*$)	1.61	0.00006
T9	3.065	H-2 \rightarrow L	LLCT (Ph $\rightarrow \pi^*$)	2.61	0.00013
T10	3.067	H-28 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	15.90	0.00329

Tabelle 17: Energiedifferenzen, Oszillatorstärken, Anregungen und Charaktere an der planaren T_{LLCT} Zustandsgeometrie

Zustand	ΔE [eV]	Anregung	Charakter	Dipolmoment [Debye]	Oszillatorstärke
GZ	0.000	-	-	16.2	-
S1	1.345	HOMO \rightarrow LUMO	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	18.52	0.00043
S2	1.946	HOMO-4 \rightarrow LUMO	MLCT ($xz \rightarrow \pi^*$)	2.63	0.00019
S3	2.003	HOMO-1 \rightarrow LUMO	MLCT ($z2 \rightarrow \pi^*$)	3.97	0.00008
S4	2.482	HOMO-14 \rightarrow LUMO	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	17.68	0.00002
S5	2.578	HOMO \rightarrow LUMO+1	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	8.75	0.01023
S6	3.016	HOMO-4 \rightarrow LUMO+1	MLCT ($xz \rightarrow \pi^*$)	1.67	0.00471
S7	3.088	HOMO-2 \rightarrow LUMO	LLCT (Ph $\rightarrow \pi^*$)	2.24	0.00092
S8	3.111	HOMO-1 \rightarrow LUMO+1	MLCT ($z2 \rightarrow \pi^*$)	0.36	0.00335
S9	3.148	HOMO-8 \rightarrow LUMO	MLCT ($x2 - y2 \rightarrow \pi^*$)	1.45	0.01899
S10	3.166	HOMO-4 \rightarrow LUMO	MLCT ($yz \rightarrow \pi^*$)	6.94	0.00564
T1	1.305	HOMO \rightarrow LUMO	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	18.5	-
T2	1.897	HOMO-4 \rightarrow LUMO	MLCT ($xz \rightarrow \pi^*$)	2.61	0.07967
T3	1.953	HOMO-1 \rightarrow LUMO	MLCT ($z2 \rightarrow \pi^*$)	3.18	0.00023
T4	2.267	HOMO-14 \rightarrow LUMO	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	17.03	0.00007
T5	2.493	HOMO-8 \rightarrow LUMO	LC ($\pi \rightarrow \pi^*$)	12.64	0.00002
T6	2.507	HOMO \rightarrow LUMO+1	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	7.2	0.00833
T7	2.909	HOMO-4 \rightarrow LUMO+1	MLCT ($xz \rightarrow \pi^*$)	3.01	0.00185
T8	3.037	HOMO-1 \rightarrow LUMO+1	MLCT ($z2 \rightarrow \pi^*$)	1.58	0.00006
T9	3.064	HOMO-28 \rightarrow LUMO	MLCT ($x2 - y2 \rightarrow \pi^*$)	10.71	0.00225
T10	3.065	HOMO-2 \rightarrow LUMO	LLCT (Ph $\pi \rightarrow \pi^*$)	2.78	0.00096

Tabelle 18: Energiedifferenzen, Oszillatorstärken, Anregungen und Charaktere an der planaren S_{MLCT1} Zustandsgeometrie

Zustand	ΔE [eV]	Anregung	Charakter	Dipolmoment [Debye]	Oszillatorstärke
GZ	0.000	-	-	14.82	-
S1	1.154	H-1 \rightarrow L	MLCT Mischung ($d_{xz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	4.73	0.00003
S2	1.894	H \rightarrow L	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	20.59	0.00055
S3	2.218	H-1 \rightarrow L+1	MLCT Mischung 2 ($d_{xz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	4.55	0.001
S4	2.474	H-14 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	9.86	0.00004
S5	2.536	H-14 \rightarrow L	1. MLCT+LC ($d_{xz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	3.25	0.00018
S6	2.821	H-13 \rightarrow L	MLCT ($xy \rightarrow \pi^*$)	4.4	0.00157
S7	2.972	H-12 \rightarrow L	MLCT ($x^2 - y^2 \rightarrow \pi^*$)	4.62	0.00759
S8	2.990	H-10 \rightarrow L	MLCT ($yz \rightarrow \pi^*$)	5.75	0.00978
S9	3.051	H-1 \rightarrow L+2	MLCT+LC ($d_{xz} \rightarrow \pi^*$, $n \rightarrow \pi^*$)	11.72	0.001
S10	3.064	H-1 \rightarrow L+2	MLCT Mischung ($d_{xz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	8.39	0.00051
T1	1.105	H-1 \rightarrow L	MLCT Mischung ($d_{xz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	4.67	-
T2	1.855	H \rightarrow L	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	20.57	0.02121
T3	2.098	H-1 \rightarrow L+1	MLCT Mischung 2 ($d_{xz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	4.83	0.01691
T4	2.257	H-14 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	15.93	0.00165
T5	2.466	H-6 \rightarrow L	1. MLCT+LC ($d_{xz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	3.26	0.01719
T6	2.497	H-8 \rightarrow L	LC ($\pi \rightarrow \pi^*$)	10.13	0.00216
T7	2.753	H-13 \rightarrow L	MLCT ($xy \rightarrow \pi^*$)	4.52	0.00438
T8	2.878	H-29 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	17.01	0.01134
T9	2.915	H-12 \rightarrow L	MLCT ($yz \rightarrow \pi^*$)	4.61	0.00226
T10	2.928	H-10 \rightarrow L	MLCT ($x^2 - y^2 \rightarrow \pi^*$)	5.8	0.00102

Tabelle 19: Energiedifferenzen, Oszillatorstärken, Anregungen und Charaktere an der planaren T_{MLCT1} Zustandsgeometrie

Zustand	ΔE [eV]	Anregung	Charakter	Dipolmoment [Debye]	Oszillatorstärke
GZ	0.000	-	-	14.8	-
S1	1.137	H-1 \rightarrow L	MLCT Mischung ($d_{xz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	4.67	0.00007
S2	1.888	H \rightarrow L	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	20.53	0.00066
S3	2.198	H-1 \rightarrow L+1	MLCT Mischung 2 ($d_{xz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	4.5	0.00111
S4	2.470	H-14 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	9.19	0.00004
S5	2.529	H-14 \rightarrow L	1. MLCT+LC ($d_{xz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	3.55	0.00031
S6	2.808	H-13 \rightarrow L	MLCT ($xy \rightarrow \pi^*$)	4.32	0.00138
S7	2.962	H-12 \rightarrow L	MLCT ($x^2 - y^2 \rightarrow \pi^*$)	4.36	0.00923
S8	2.979	H-10 \rightarrow L	MLCT ($yz \rightarrow \pi^*$)	5.87	0.00914
S9	3.041	H-1 \rightarrow L+2	MLCT Mischung ($d_{xz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	6.52	0.00119
S10	3.057	H-29 \rightarrow L	MLCT + LC ($d_{xz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	13.78	0.00011
T1	1.088	H-1 \rightarrow L	MLCT Mischung ($d_{xz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	4.61	-
T2	1.855	H \rightarrow L	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	20.57	0.02085
T3	2.098	H-1 \rightarrow L+1	MLCT Mischung 2 ($d_{xz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	4.83	0.01765
T4	2.257	H-14 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	15.93	0.00165
T5	2.466	H-6 \rightarrow L	1. MLCT+LC ($d_{xz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	3.26	0.01719
T6	2.488	H-8 \rightarrow L	LC ($\pi \rightarrow \pi^*$)	9.00	0.00371
T7	2.753	H-13 \rightarrow L	MLCT ($xy \rightarrow \pi^*$)	4.52	0.00438
T8	2.879	H-29 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	17.0	0.01134
T9	2.914	H-12 \rightarrow L	MLCT ($yz \rightarrow \pi^*$)	4.59	0.00246
T10	2.928	H-10 \rightarrow L	MLCT ($x^2 - y^2 \rightarrow \pi^*$)	5.56	0.00044

Tabelle 20: Energiedifferenzen, Oszillatorstärken, Anregungen und Charaktere an der planaren S_{MLCT2} Zustandsgeometrie

Zustand	ΔE [eV]	Anregung	Charakter	Dipolmoment [Debye]	Oszillatorstärke
GZ	0.000	-	-	15.24	15.24
S1	1.479	H-1 \rightarrow L	MLCT Mischung ($d_{xz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	4.44	4.44
S2	1.729	H \rightarrow L	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	20.16	20.16
S3	2.400	H-14 \rightarrow L	2. MLCT+LC (?)	2.87	2.87
S4	2.513	H-14 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	10.74	10.74
S5	2.553	H-1 \rightarrow L+1	MLCT Mischung 2 ($d_{xz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	4.24	4.24
S6	2.998	H \rightarrow L+1	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	13.02	13.02
S7	3.022	H-28 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	17.89	17.89
S8	3.041	H-3 \rightarrow L	LLCT (Ph $\pi \rightarrow \pi^*$)	6.69	6.69
S9	3.085	H-13 \rightarrow L	MLCT ($x^2 - y^2 \rightarrow \pi^*$)	3.50	3.50
S10	3.140	H-11 \rightarrow L	MLCT ($yz \rightarrow \pi^*$)	4.61	4.61
T1	1.429	H-1 \rightarrow L	MLCT Mischung ($d_{xz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	4.29	-
T2	1.690	H \rightarrow L	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	20.25	0.01812
T3	2.224	H-14 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	15.25	0.00028
T4	2.398	H-6 \rightarrow L	2. MLCT+LC (?)	1.9	0.03195
T5	2.456	H-1 \rightarrow L+1	MLCT Mischung 2 ($d_{xz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	4.35	0.00604
T6	2.475	H-8 \rightarrow L	LC ($\pi \rightarrow \pi^*$)	11.28	0.00014
T7	2.848	H-28 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	17.9	0.01328
T8	2.931	H \rightarrow L+1	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	11.76	0
T9	2.994	H-3 \rightarrow L	LLCT (Ph $\pi \rightarrow \pi^*$)	6.98	0.00339
T10	3.037	H-13 \rightarrow L	MLCT ($x^2 - y^2 \rightarrow \pi^*$)	3.66	0.00141

Tabelle 21: Energiedifferenzen, Oszillatorstärken, Anregungen und Charaktere an der planaren T_{MLCT2} Zustandsgeometrie

Zustand	ΔE [eV]	Anregung	Charakter	Dipolmoment [Debye]	Oszillatorstärke
GZ	0.000	-	-	15.21	-
S1	1.485	H-1 \rightarrow L	MLCT Mischung ($d_{xz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z2} \rightarrow \pi^*$)	4.45	0.00002
S2	1.725	H \rightarrow L	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	20.14	0.00087
S3	2.396	H-14 \rightarrow L	2. MLCT LC	2.54	0.00005
S4	2.512	H-14 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	10.99	0.00003
S5	2.553	H-1 \rightarrow L+1	MLCT Mischung ($d_{xz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z2} \rightarrow \pi^*$)	4.2	0.00105
S6	2.987	H \rightarrow L+1	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	13.05	0.01931
S7	3.018	H-28 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	17.91	0.00006
S8	3.048	H-3 \rightarrow L	LLCT (Ph $\pi \rightarrow \pi^*$)	6.52	0.00263
S9	3.091	H-10 \rightarrow L	MLCT ($x^2 - y^2 \rightarrow \pi^*$)	3.54	0.00632
S10	3.142	H-5 \rightarrow L	MLCT ($yz \rightarrow \pi^*$)	4.73	0.01345
T1	1.434	H-1 \rightarrow L	MLCT Mischung ($d_{xz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z2} \rightarrow \pi^*$)	4.29	-
T2	1.685	H \rightarrow L	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	20.23	0.0181
T3	2.224	H-14 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	15.1	0.00028
T4	2.395	H-6 \rightarrow L	2. MLCT LC	1.72	0.03175
T5	2.455	H-1 \rightarrow L+1	MLCT Mischung ($d_{xz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z2} \rightarrow \pi^*$)	4.33	0.00666
T6	2.473	H-8 \rightarrow L	LC ($\pi \rightarrow \pi^*$)	11.28	0.00008
T7	2.846	H-28 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	17.88	0.01336
T8	2.919	H \rightarrow L+1	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	11.75	0
T9	3.005	H-3 \rightarrow L	LLCT (Ph $\pi \rightarrow \pi^*$)	7.19	0.00321
T10	3.043	H-13 \rightarrow L	MLCT ($x^2 - y^2 \rightarrow \pi^*$)	3.82	0.00230

Tabelle 22: Energiedifferenzen, Oszillatorstärken, Anregungen und Charaktere an der planaren T_{npi} Zustandsgeometrie

Zustand	ΔE [eV]	Anregung	Charakter	Dipolmoment [Debye]	Oszillatorstärke
GZ	0.000	-	-	15.23	-
S1	1.992	H \rightarrow L	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	16.17	0.00039
S2	2.269	H-6 \rightarrow L	MLCT ($xz \rightarrow \pi^*$)	6.23	0.00044
S3	2.275	H-1 \rightarrow L	MLCT ($z2 \rightarrow \pi^*$)	4.08	0.00013
S4	2.584	H-14 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	16.58	0.00005
S5	2.992	H \rightarrow L+1	LLCT+MLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$, $xz \rightarrow \pi^*$)	1.27	0.00437
S6	3.222	H-1 \rightarrow L+1	MLCT ($z2 \rightarrow \pi^*$)	1.94	0.00417
S7	3.268	H \rightarrow L+1	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	7.24	0.01378
S8	3.350	H-3 \rightarrow L	LLCT (Ph $\pi \rightarrow \pi^*$)	5.86	0.00311
S9	3.373	H-28 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	17.25	0.0001
S10	3.424	H-8 \rightarrow L	MLCT ($x2 - y2 \rightarrow \pi^*$)	2.89	0.03011
T1	1.945	H \rightarrow L	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	15.63	-
T2	2.204	H-1 \rightarrow L	MLCT ($z2 \rightarrow \pi^*$)	0.45	0.00077
T3	2.212	H-6 \rightarrow L	MLCT ($xz \rightarrow \pi^*$)	6.59	0.08675
T4	2.351	H-14 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	12.29	0.00022
T5	2.671	H-8 \rightarrow L	LC ($\pi \rightarrow \pi^*$)	11.85	0.00007
T6	125310	H \rightarrow L+1	LLCT+MLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$, $xz \rightarrow \pi^*$)	0.64	0.00595
T7	3.139	H-1 \rightarrow L+1	MLCT ($z2 \rightarrow \pi^*$)	2.66	0.00008
T8	3.165	H \rightarrow L+1	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	1.34	0.00779
T9	3.196	H-28 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	9.45	0.00141
T10	3.311	H-3 \rightarrow L	LLCT (Ph $\pi \rightarrow \pi^*$)	7.06	0.00005

Tabelle 23: Energiedifferenzen, Oszillatorstärken, Anregungen und Charaktere an der orthogonalen S_{LLCT} Zustandsgeometrie

Zustand	ΔE [eV]	Anregung	Charakter	Dipolmoment [Debye]	Oszillatorstärke
GZ	0.000	-	-	16.94	-
S1	1.294	H \rightarrow L	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	17.45	0.0000
S2	1.952	H-1 \rightarrow L	MLCT ($z2 \rightarrow \pi^*$)	3.23	0.00015
S3	2.211	H-5 \rightarrow L	MLCT ($yz \rightarrow \pi^*$)	2.24	0.0000
S4	2.493	H-14 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	18.18	0.00003
S5	2.502	H \rightarrow L+1	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	9.21	0.0000
S6	3.007	H-4 \rightarrow L	MLCT+LLCT ($xz \rightarrow \pi^*$, $\pi \rightarrow \pi^*$)	11.19	0.00906
S7	3.012	H-1 \rightarrow L+1	MLCT ($z2 \rightarrow \pi^*$)	2.93	0.00338
S8	3.052	H-28 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	19.71	0.0000
S9	3.110	H-28 \rightarrow L	LLCT (Ph $\pi \rightarrow \pi^*$)	3.14	0.00793
S10	3.138	H-11 \rightarrow L	MLCT ($x2 - y2 \rightarrow \pi^*$)	2.45	0.00089
T1	1.252	H \rightarrow L	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	17.45	-
T2	1.900	H-1 \rightarrow L	MLCT ($z2 \rightarrow \pi^*$)	2.59	0.00072
T3	2.158	H-5 \rightarrow L	MLCT ($yz \rightarrow \pi^*$)	2.01	0.12736
T4	2.263	H-14 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	17.78	0.00043
T5	2.453	H \rightarrow L+1	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	8.76	0.00134
T6	2.501	H-9 \rightarrow L	LC ($\pi \rightarrow \pi^*$)	13.57	0.0000
T7	2.894	H-28 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	19.65	0.00004
T8	2.943	H-4 \rightarrow L+1	MLCT+LLCT ($xz \rightarrow \pi^*$, $\pi \rightarrow \pi^*$)	10.02	0.00001
T9	2.951	H-1 \rightarrow L+1	MLCT ($z2 \rightarrow \pi^*$)	3.14	0.00001
T10	3.085	H-28 \rightarrow L	LLCT (Ph $\pi \rightarrow \pi^*$)	5.02	0.00083

Tabelle 24: Energiedifferenzen, Oszillatorstärken, Anregungen und Charaktere an der orthogonalen T_{LLCT} Zustandsgeometrie

Zustand	ΔE [eV]	Anregung	Charakter	Dipolmoment [Debye]	Oszillatorstärke
GZ	0.000	-	-	16.93	-
S1	1.294	H \rightarrow L	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	17.48	0.0000
S2	1.950	H-1 \rightarrow L	MLCT ($z2 \rightarrow \pi^*$)	3.21	0.00015
S3	2.214	H-5 \rightarrow L	MLCT ($yz \rightarrow \pi^*$)	2.22	0.0000
S4	2.491	H-14 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	18.28	0.00003
S5	2.502	H \rightarrow L+1	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	9.37	0.0000
S6	3.005	H-4 \rightarrow L	MLCT+LLCT ($xz \rightarrow \pi^*$, $\pi \rightarrow \pi^*$)	10.9	0.00893
S7	3.009	H-1 \rightarrow L+1	MLCT ($z2 \rightarrow \pi^*$)	2.61	0.00351
S8	3.051	H-28 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	19.7	0.0000
S9	3.106	H-2 \rightarrow L	LLCT (Ph $\pi \rightarrow \pi^*$)	3.45	0.00735
S10	3.137	H-11 \rightarrow L	MLCT ($x2 - y2 \rightarrow \pi^*$)	2.41	0.00092
T1	1.252	H \rightarrow L	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	17.48	-
T2	1.898	H-1 \rightarrow L	MLCT ($z2 \rightarrow \pi^*$)	2.56	0.00005
T3	2.161	H-5 \rightarrow L	MLCT ($yz \rightarrow \pi^*$)	2.06	0.12785
T4	2.261	H-14 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	17.86	0.00005
T5	2.453	H \rightarrow L+1	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	8.82	0.00130
T6	2.499	H-9 \rightarrow L	LC ($\pi \rightarrow \pi^*$)	13.56	0.0000
T7	2.893	H-28 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	19.64	0.00003
T8	2.942	H-4 \rightarrow L+1	MLCT+LLCT ($xz \rightarrow \pi^*$, $\pi \rightarrow \pi^*$)	10.01	0.0000
T9	2.948	H-1 \rightarrow L+1	MLCT ($z2 \rightarrow \pi^*$)	3.07	0.0000
T10	3.081	H-2 \rightarrow L	LLCT (Ph $\pi \rightarrow \pi^*$)	5.18	0.00095

Tabelle 25: Energiedifferenzen, Oszillatorstärken, Anregungen und Charaktere an der orthogonalen S_{MLCT1} Zustandsgeometrie

Zustand	ΔE [eV]	Anregung	Charakter	Dipolmoment [Debye]	Oszillatorstärke
GZ	0.000	-	-	15.95	-
S1	1.341	H-1 \rightarrow L	MLCT Mischung ($d_{yz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	5.08	0.00011
S2	1.861	H-1 \rightarrow L+1	MLCT Mischung ($d_{yz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	5.78	0.00052
S3	2.199	H \rightarrow L	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	17.6	0.00026
S4	2.491	H-14 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	10.45	0.00027
S5	2.502	H-14 \rightarrow L	LC+MLCT1 Mischung (ähnlich $x^2 - y^2 \rightarrow \pi^*$, $n \rightarrow \pi^*$)	6.19	0.00085
S6	2.858	H-1 \rightarrow L+2	MLCT Mischung ($d_{yz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	4.64	0.00154
S7	2.881	H \rightarrow L+1	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	9.03	0.00216
S8	3.071	H-12 \rightarrow L	MLCT ($xy \rightarrow \pi^*$)	5.43	0.00838
S9	3.135	H-13 \rightarrow L	MLCT2	5.16	0.00747
S10	3.203	H-11 \rightarrow L	MLCT3	5.17	0.0198
T1	1.288	H-1 \rightarrow L	MLCT Mischung ($d_{yz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	5.02	-
T2	1.780	H-1 \rightarrow L+1	MLCT Mischung ($d_{yz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	5.82	0.02027
T3	2.162	H-5 \rightarrow L	MLCT ($yz \rightarrow \pi^*$)	2.06	0.12785
T4	2.261	H-14 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	17.86	0.00043
T5	2.453	H \rightarrow L+1	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	8.82	0.00130
T6	2.499	H-9 \rightarrow L	LC ($\pi \rightarrow \pi^*$)	13.56	0.0000
T7	2.893	H-28 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	19.64	0.00003
T8	2.942	H-4 \rightarrow L+1	MLCT+LLCT ($xz \rightarrow \pi^*$, $\pi \rightarrow \pi^*$)	10.01	0.0000
T9	2.948	H-1 \rightarrow L+1	MLCT ($z^2 \rightarrow \pi^*$)	3.07	0.0000
T10	3.081	H-2 \rightarrow L	LLCT (Ph $\pi \rightarrow \pi^*$)	5.18	0.00095

Tabelle 26: Energiedifferenzen, Oszillatorstärken, Anregungen und Charaktere an der orthogonalen T_{MLCT1} Zustandsgeometrie

Zustand	ΔE [eV]	Anregung	Charakter	Dipolmoment [Debye]	Oszillatorstärke
GZ	0.000	-	-	15.84	-
S1	1.334	H-1 \rightarrow L	MLCT Mischung ($d_{yz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	4.74	0.0002
S2	1.877	H-1 \rightarrow L+1	MLCT Mischung ($d_{yz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	5.81	0.00083
S3	2.182	H \rightarrow L	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	17.8	0.00042
S4	2.652	H-14 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	7.67	0.00061
S5	2.697	H-14 \rightarrow L	LC+MLCT1 Mischung (ähnlich $x^2 - y^2 \rightarrow \pi^*$, $n \rightarrow \pi^*$)	7.78	0.00091
S6	2.855	H-1 \rightarrow L+2	MLCT Mischung ($d_{yz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	5.31	0.00156
S7	2.901	H \rightarrow L+1	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	9.92	0.00529
S8	3.060	H-12 \rightarrow L	MLCT ($xy \rightarrow \pi^*$)	4.95	0.00942
S9	3.107	H-13 \rightarrow L	MLCT2	4.91	0.0037
S10	3.198	H-10 \rightarrow L	MLCT3	5.02	0.01803
T1	1.281	H-1 \rightarrow L	MLCT Mischung ($d_{yz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	4.66	-
T2	1.788	H-1 \rightarrow L+1	MLCT Mischung ($d_{yz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	5.87	0.01832
T3	2.146	H \rightarrow L	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	17.62	0.02271
T4	2.430	H-14 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	16.6	0.00048
T5	2.634	H-5 \rightarrow L	MLCT1 Mischung (ähnlich $x^2 - y^2 \rightarrow \pi^*$)	4.78	0.01603
T6	2.778	H-1 \rightarrow L+2	MLCT Mischung ($d_{yz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	6.16	0.01458
T7	2.792	H-9 \rightarrow L	MLCT+LC ($xy \rightarrow \pi^*$, $\pi \rightarrow \pi^*$)	8.77	0.00476
T8	2.861	H \rightarrow L+1	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	9.74	0.00273
T9	3.050	H-13 \rightarrow L	MLCT2	4.9	0.003
T10	3.119	H-12 \rightarrow L	MLCT3	4.86	0.00283

Tabelle 27: Energiedifferenzen, Oszillatorstärken, Anregungen und Charaktere an der orthogonalen S_{MLCT2} Zustandsgeometrie

Zustand	ΔE [eV]	Anregung	Charakter	Dipolmoment [Debye]	Oszillatorstärke
GZ	0.000	-	-	16.11	-
S1	1.341	H-1 \rightarrow L	MLCT Mischung ($d_{yz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	6.1	0.00004
S2	1.698	H \rightarrow L	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	17.89	0.00007
S3	2.401	H-1 \rightarrow L+1	MLCT Mischung ($d_{yz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	5.28	0.00079
S4	2.473	H-14 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	12.22	0.00015
S5	2.516	H-14 \rightarrow L	LC+MLCT1 Mischung (ähnlich $x^2 - y^2 \rightarrow \pi^*$, $n \rightarrow \pi^*$)	4.8	0.00027
S6	2.948	H \rightarrow L+1	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	11.27	0.00131
S7	2.968	H-13 \rightarrow L	MLCT+LLCT ($xz \rightarrow \pi^*$, $\pi \rightarrow \pi^*$)	7.02	0.01276
S8	3.040	H-11 \rightarrow L	MLCT2	6.37	0.00271
S9	3.052	H-12 \rightarrow L	LLCT+MLCT (Ph $\pi \rightarrow \pi^*$, $xy \rightarrow \pi^*$)	6.36	0.00709
S10	3.140	H-29 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	18.62	0.00001
T1	1.293	H-1 \rightarrow L	MLCT Mischung ($d_{yz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	6.01	-
T2	1.788	H-1 \rightarrow L+1	MLCT Mischung ($d_{yz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	5.87	0.01832
T3	2.244	H \rightarrow L	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	17.62	0.02271
T4	2.311	H-1 \rightarrow L+1	MLCT Mischung ($d_{yz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	5.82	0.01949
T5	2.461	H-7 \rightarrow L	MLCT1 Mischung (ähnlich $x^2 - y^2 \rightarrow \pi^*$)	5.77	0.02228
T6	2.503	H-8 \rightarrow L	LC ($\pi \rightarrow \pi^*$)	12.77	0.00005
T7	2.907	H \rightarrow L+1	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	9.06	0.0017
T8	2.912	H \rightarrow L+1	MLCT+LLCT ($xz \rightarrow \pi^*$, $\pi \rightarrow \pi^*$)	8.22	0.00296
T9	2.978	H-29 \rightarrow L	LC+MLCT ($n \rightarrow \pi^*$, $x^2 - y^2 \rightarrow \pi^*$)	13.4	0.01351
T10	2.996	H-11 \rightarrow L	MLCT2	5.19	0.00101

Tabelle 28: Energiedifferenzen, Oszillatorstärken, Anregungen und Charaktere an der orthogonalen T_{MLCT2} Zustandsgeometrie

Zustand	ΔE [eV]	Anregung	Charakter	Dipolmoment [Debye]	Oszillatorstärke
GZ	0.000	-	-	16.12	-
S1	1.345	H-1 \rightarrow L	MLCT Mischung ($d_{yz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	6.08	0.00007
S2	1.696	H \rightarrow L	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	17.77	0.0001
S3	2.401	H-1 \rightarrow L+1	MLCT Mischung ($d_{yz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	5.20	0.00078
S4	2.473	H-14 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	11.86	0.00017
S5	2.516	H-14 \rightarrow L	LC+MLCT1 Mischung (ähnlich $x^2 - y^2 \rightarrow \pi^*$, $n \rightarrow \pi^*$)	4.92	0.00027
S6	2.941	H \rightarrow L+1	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	11.35	0.00167
S7	2.970	H-13 \rightarrow L	MLCT+LLCT ($xz \rightarrow \pi^*$, $\pi \rightarrow \pi^*$)	6.97	0.01259
S8	3.040	H-11 \rightarrow L	MLCT2	6.25	0.00289
S9	3.053	H-12 \rightarrow L	LLCT+MLCT (Ph $\pi \rightarrow \pi^*$, $xy \rightarrow \pi^*$)	6.31	0.00724
S10	3.137	H-29 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	18.65	0.00001
T1	1.297	H-1 \rightarrow L	MLCT Mischung ($d_{yz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	5.98	-
T2	1.657	H \rightarrow L	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	17.87	0.04195
T3	2.244	H-14 \rightarrow L	LC ($n \rightarrow \pi^*$)	17.12	0.00036
T4	2.311	H-1 \rightarrow L+1	MLCT Mischung ($d_{yz} \rightarrow \pi^*$, $d_{z^2} \rightarrow \pi^*$)	5.76	0.01988
T5	2.461	H-7 \rightarrow L	MLCT1 Mischung (ähnlich $x^2 - y^2 \rightarrow \pi^*$)	5.70	0.02266
T6	2.502	H-8 \rightarrow L	LC ($\pi \rightarrow \pi^*$)	12.78	0.00003
T7	2.902	H \rightarrow L+1	LLCT ($\pi \rightarrow \pi^*$)	11.19	0.00018
T8	2.913	H-13 \rightarrow L	MLCT+LLCT ($xz \rightarrow \pi^*$, $\pi \rightarrow \pi^*$)	7.02	0.00445
T9	2.976	H-29 \rightarrow L	LC+MLCT ($n \rightarrow \pi^*$, $x^2 - y^2 \rightarrow \pi^*$)	14.64	0.01324
T10	2.996	H-11 \rightarrow L	MLCT2	4.99	0.00093

6.1 Dipolmomente

GZ Planar									
Zustand	x	y	z	tot	Zustand	x	y	z	tot
GZ	6.04165	-0.09774	0.14342	6.04414					
S1	-6.02074	0.01469	0.08167	6.02131	T1	-5.78188	0.01222	0.08468	5.78251
S2	-2.52764	-0.03261	0.13539	2.53147	T2	1.69061	-0.07776	0.15289	1.69929
S3	-1.29682	-0.03030	0.15763	1.30672	T3	-2.65959	-0.00785	0.12810	2.66268
S4	6.37632	-0.09456	0.13520	6.37846	T4	3.41217	-0.07091	0.14406	3.41595
S5	-0.14287	-0.02285	0.11103	0.18238	T5	0.41664	-0.03193	0.11898	0.43447
S6	0.87446	-0.05607	0.13602	0.88674	T6	4.65395	-0.08557	0.16021	4.65749
S7	-3.17223	0.01336	0.06634	3.17295	T7	1.15695	-0.06791	0.13710	1.16702
S8	-2.06674	-0.00838	0.15346	2.07245	T8	-2.81201	0.02020	0.06593	2.81285
S9	6.53514	-0.10511	0.13080	6.53729	T9	7.13674	-0.10031	0.12820	7.13860
S10	-0.27049	0.02304	0.14998	0.31015	T10	-2.67505	-0.00188	0.14997	2.67925

Tabelle 29: Dipolmomente in [a.u.] an der planaren Grundzustandsgeometrie

GZ Ortho									
Zustand	x	y	z	tot	Zustand	x	y	z	tot
GZ	-6.46252	-0.06420	0.23038	6.46694					
S1	6.14540	-0.01301	-0.01746	6.14544	T1	6.11482	-0.01296	-0.01656	6.11486
S2	1.07666	-0.03524	0.18647	1.09326	T2	-0.06683	-0.03844	0.18791	0.20311
S3	1.32580	-0.03248	0.15801	1.33558	T3	-5.82005	-0.05936	0.24926	5.82568
S4	-6.71507	-0.06096	0.18660	6.71794	T4	1.44361	-0.03008	0.09355	1.44695
S5	2.39569	-0.02419	0.01741	2.39588	T5	1.95291	-0.02687	0.03690	1.95345
S6	-1.04814	-0.03953	0.14120	1.05835	T6	-5.17433	-0.05979	0.21397	5.17910
S7	2.71903	0.06714	0.13926	2.72342	T7	-1.05243	-0.04016	0.13980	1.06244
S8	0.47959	-0.02518	0.06290	0.48435	T8	2.16080	0.05731	0.15826	2.16735
S9	1.93070	0.26303	0.19559	1.95833	T9	0.58914	-0.02676	0.05266	0.59209
S10	0.99675	-0.11379	0.12359	1.01081	T10	-4.32417	0.54399	0.23308	4.36449

Tabelle 30: Dipolmomente in [a.u.] an der orthogonalen Grundzustandsgeometrie

SLLCT									
Zustand	x	y	z	tot	Zustand	x	y	z	tot
GZ	-6.37427	-0.08658	-0.04149	6.37499					
S1	7.27440	0.06702	0.09154	7.27528	T1	7.26750	0.06749	0.09164	7.26839
S2	1.03774	0.02729	0.03578	1.03872	T2	1.02956	0.02531	0.03633	1.03051
S3	1.55762	-0.00921	0.04096	1.55818	T3	1.24936	-0.01061	0.03735	1.24996
S4	-6.95178	-0.09558	-0.04973	6.95262	T4	-6.69803	-0.09341	-0.04661	6.69884
S5	3.41120	0.01459	0.04964	3.41159	T5	-4.97702	-0.06619	-0.02414	4.97752
S6	-0.63950	-0.02174	0.01295	0.64000	T6	2.80471	0.00918	0.04365	2.80506
S7	0.83581	-0.02752	0.02624	0.83668	T7	-1.16259	-0.02898	0.00755	1.16298
S8	0.16780	-0.03773	0.02152	0.17333	T8	-0.63153	-0.03274	0.01441	0.63254
S9	-0.42610	-0.15226	-0.01437	0.45271	T9	1.02741	0.02602	0.03661	1.02839
S10	2.73559	0.16415	0.07923	2.74166	T10	-6.25126	-0.15744	-0.05758	6.25351

Tabelle 31: Dipolmomente in [a.u.] an der planaren S_{LLCT} Zustandsgeometrie

TLLCT									
Zustand	x	y	z	tot	Zustand	x	y	z	tot
GZ	-6.37131	-0.09211	-0.05309	6.37220					
S1	7.28473	0.05640	0.06854	7.28527	T1	7.27608	0.05684	0.06854	7.27663
S2	1.03446	0.01534	0.01001	1.03462	T2	1.02664	0.01263	0.01062	1.02678
S3	1.56141	-0.02357	0.01476	1.56165	T3	1.25231	-0.02379	0.01134	1.25258
S4	-6.95606	-0.10007	-0.05895	6.95703	T4	-6.69778	-0.09793	-0.05643	6.69874
S5	3.44342	0.01087	0.03381	3.44360	T5	-4.97333	-0.07159	-0.04162	4.97402
S6	-0.65844	-0.02476	-0.00649	0.65894	T6	2.83402	0.00576	0.02785	2.83416
S7	0.88256	-0.01236	0.00866	0.88269	T7	-1.18482	-0.03351	-0.01018	1.18533
S8	0.14068	-0.02138	0.00226	0.14231	T8	-0.61995	-0.03399	-0.00413	0.62090
S9	-0.56111	-0.09510	-0.02299	0.56957	T9	-4.21179	0.05923	-0.02120	4.21226
S10	2.72622	0.11274	0.04377	2.72890	T10	-1.07962	-0.17622	-0.02726	1.09424

Tabelle 32: Dipolmomente in [a.u.] an der planaren T_{LLCT} Zustandsgeometrie

SMLCT1									
Zustand	x	y	z	tot	Zustand	x	y	z	tot
GZ	-5.78199	-0.56863	0.50341	5.83166					
S1	1.17604	-1.15747	0.86087	1.86116	T1	1.15060	-1.14749	0.85657	1.83693
S2	8.07177	-0.25299	0.62087	8.09957	T2	8.06432	-0.25156	0.62034	8.09206
S3	-1.39753	-0.93735	0.60582	1.78850	T3	-1.50945	-0.97621	0.61792	1.90086
S4	-3.76340	-0.69857	0.62227	3.87794	T4	-6.22571	-0.57538	0.44545	6.26809
S5	-0.62884	-0.89989	0.65820	1.28003	T5	0.95855	-0.96158	0.78329	1.56748
S6	0.68467	-1.42454	0.70795	1.73184	T6	-3.88504	-0.61560	0.64569	3.98615
S7	0.85938	-1.34506	0.86696	1.81641	T7	0.81792	-1.40863	0.71373	1.77838
S8	1.50138	-1.47666	0.82613	2.26211	T8	-6.65505	-0.56622	0.40758	6.69152
S9	-4.53009	-0.71025	0.49029	4.61156	T9	1.13131	-0.93751	1.06658	1.81560
S10	-3.09984	-0.95068	0.62522	3.30208	T10	1.13909	-1.83897	0.72453	2.28129

Tabelle 33: Dipolmomente in [a.u.] an der planaren S_{MLCT1} Zustandsgeometrie

TMLCT1									
Zustand	x	y	z	tot	Zustand	x	y	z	tot
GZ	-5.77305	-0.59942	0.45180	5.82164					
S1	1.15554	-1.22469	0.73440	1.83698	T1	1.12880	-1.21519	0.72979	1.81203
S2	8.05493	-0.30672	0.50823	8.07678	T2	8.04559	-0.30590	0.50768	8.06739
S3	-1.38312	-0.97621	0.52353	1.77203	T3	-1.48577	-1.01603	0.53484	1.87773
S4	-3.49003	-0.75383	0.56601	3.61510	T4	-6.21488	-0.60035	0.40535	6.25695
S5	-0.85968	-0.95705	0.53903	1.39483	T5	0.47262	-1.00490	0.64002	1.28172
S6	0.60306	-1.47593	0.59034	1.70017	T6	-3.42293	-0.68855	0.57822	3.53905
S7	0.84833	-1.27176	0.77553	1.71420	T7	0.81924	-1.48437	0.59160	1.79569
S8	1.48907	-1.63433	0.67295	2.31111	T8	-6.65399	-0.57976	0.36760	6.68931
S9	-2.31274	-0.97328	0.52735	2.56401	T9	1.17349	-1.01259	0.92660	1.80582
S10	-5.34757	-0.75462	0.46676	5.42068	T10	1.02543	-1.82765	0.62546	2.18701

Tabelle 34: Dipolmomente in [a.u.] an der planaren T_{MLCT1} Zustandsgeometrie

SMLCT2									
Zustand	x	y	z	tot	Zustand	x	y	z	tot
GZ	-5.97751	0.30989	-0.37261	5.99712					
S1	1.40033	0.96865	-0.38801	1.74635	T1	1.33176	0.96262	-0.38799	1.68842
S2	7.91797	0.41001	-0.21667	7.93153	T2	7.95183	0.40586	-0.21523	7.96509
S3	-0.88764	0.52257	-0.46622	1.13064	T3	-5.97758	0.35781	-0.37772	6.00018
S4	-4.20419	0.24404	-0.34151	4.22509	T4	0.46564	0.41776	-0.41226	0.74920
S5	-1.51822	0.62620	-0.28514	1.66686	T5	-1.56327	0.62621	-0.31187	1.71267
S6	5.11968	0.06385	-0.07060	5.12057	T6	-4.40497	0.33376	-0.40132	4.43579
S7	-7.02587	0.27057	-0.33945	7.03927	T7	-7.02944	0.26011	-0.34196	7.04256
S8	1.69944	2.01043	-0.05660	2.63308	T8	4.62628	0.05341	-0.07483	4.62719
S9	0.84635	0.99443	-0.43941	1.37778	T9	1.74943	2.11418	-0.02750	2.74427
S10	1.18361	1.34564	-0.28395	1.81447	T10	0.98694	0.94682	-0.45610	1.44172

Tabelle 35: Dipolmomente in [a.u.] an der planaren S_{MLCT2} Zustandsgeometrie

TMLCT2									
Zustand	x	y	z	tot	Zustand	x	y	z	tot
GZ	-5.97025	0.32628	-0.26961	5.98524					
S1	1.41637	1.01483	-0.17778	1.75145	T1	1.34179	1.00894	-0.17778	1.68819
S2	7.90864	0.45488	-0.04761	7.92185	T2	7.94641	0.44998	-0.04599	7.95927
S3	-0.77675	0.55891	-0.29064	1.00010	T3	-5.92069	0.37395	-0.28429	5.93930
S4	-4.31129	0.26007	-0.22275	4.32487	T4	0.45408	0.45371	-0.22021	0.67863
S5	-1.51263	0.64679	-0.14031	1.65108	T5	-1.56627	0.65162	-0.16097	1.70403
S6	5.13528	0.07705	0.02765	5.13593	T6	-4.41511	0.35267	-0.25850	4.43671
S7	-7.03615	0.27394	-0.26731	7.04655	T7	-7.02609	0.26576	-0.26991	7.03629
S8	1.62913	1.97462	0.13352	2.56340	T8	4.62302	0.06935	0.01952	4.62358
S9	0.88542	1.05153	-0.22352	1.39271	T9	1.79750	2.17796	0.19101	2.83037
S10	1.26502	1.36061	-0.07547	1.85937	T10	1.03129	1.07548	-0.20577	1.50418

Tabelle 36: Dipolmomente in [a.u.] an der planaren T_{MLCT2} Zustandsgeometrie

T _{npi}									
Zustand	x	y	z	tot	Zustand	x	y	z	tot
GZ	-5.98866	-0.08801	-0.11589	5.99043					
S1	6.36274	0.03649	-0.03842	6.36296	T1	6.14885	0.03422	-0.04084	6.14908
S2	2.44811	-0.06993	-0.09296	2.45087	T2	-0.11847	-0.06739	-0.11006	0.17518
S3	1.60148	0.04550	-0.09940	1.60521	T3	2.58999	0.02680	-0.08195	2.59143
S4	-6.52231	-0.08842	-0.11157	6.52387	T4	-4.83335	-0.07124	-0.10989	4.83513
S5	0.49398	-0.00823	-0.07444	0.49962	T5	-4.66066	-0.07515	-0.12199	4.66286
S6	-0.75797	-0.04034	-0.09590	0.76507	T6	-0.23859	-0.01705	-0.08298	0.25318
S7	2.84653	0.02399	-0.04690	2.84702	T7	-1.04177	-0.05162	-0.09516	1.04738
S8	2.29908	-0.08835	-0.12299	2.30406	T8	-0.52224	-0.00801	-0.06690	0.52657
S9	-6.78408	-0.09125	-0.10877	6.78556	T9	-3.71701	-0.05648	-0.08717	3.71846
S10	-1.13128	0.00245	-0.10864	1.13648	T10	2.77550	-0.06188	-0.11493	2.77857

Tabelle 37: Dipolmomente in [a.u.] an der planaren T_{npi} Zustandsgeometrie

SLLCT _{ortho}									
Zustand	x	y	z	tot	Zustand	x	y	z	tot
GZ	-6.65882	-0.04432	0.23762	6.66321					
S1	6.86282	-0.00026	-0.10747	6.86367	T1	6.86390	-0.00010	-0.10759	6.86474
S2	1.26515	-0.01305	0.11835	1.27074	T2	1.01198	-0.01390	0.12026	1.01919
S3	0.87553	-0.01236	0.09361	0.88061	T3	0.78464	-0.01279	0.11183	0.79267
S4	-7.14851	-0.04436	0.23881	7.15264	T4	-6.99339	-0.04343	0.21814	6.99693
S5	3.62362	-0.01277	-0.06163	3.62416	T5	3.44481	-0.01336	0.05466	3.44527
S6	4.40019	0.11206	0.00679	4.40162	T6	-5.33404	-0.03681	0.21530	5.33851
S7	-1.14123	-0.08593	0.14006	1.15299	T7	-7.72703	-0.04802	0.25446	7.73137
S8	-7.74985	-0.04704	0.25086	7.75405	T8	3.94314	0.08019	0.02163	3.94401
S9	1.19470	0.28415	0.12482	1.23436	T9	-1.22620	-0.06293	0.12747	1.23441
S10	0.96249	-0.00627	0.07980	0.96581	T10	1.86702	0.62758	0.12208	1.97346

Tabelle 38: Dipolmomente in [a.u.] an der orthogonalen S_{LLCT} Zustandsgeometrie

TLLCT _{ortho}									
Zustand	x	y	z	tot	Zustand	x	y	z	tot
GZ	-6.65516	-0.04955	0.21476	6.65881					
S1	6.87329	-0.01582	-0.19240	6.87600	T1	6.87519	-0.01579	-0.19234	6.87790
S2	1.26316	-0.02905	0.00125	1.26350	T2	1.00711	-0.02975	0.00789	1.00758
S3	0.87232	-0.02850	0.00483	0.87280	T3	0.81028	-0.02841	0.01121	0.81086
S4	-7.18620	-0.04775	0.22577	7.18990	T4	-7.02206	-0.04730	0.21617	7.02554
S5	3.68441	-0.02172	-0.10897	3.68609	T5	3.47021	-0.02268	-0.10076	3.47175
S6	4.28477	0.15716	-0.09389	4.28868	T6	-5.33334	-0.04557	0.17995	5.33657
S7	-1.01329	-0.14757	0.04664	1.02504	T7	-7.72362	-0.04971	0.24317	7.72760
S8	-7.74578	-0.04911	0.24234	7.74972	T8	3.93643	0.09353	-0.08390	3.93843
S9	1.31135	0.34739	0.00094	1.35658	T9	-1.20446	-0.09092	0.05597	1.20919
S10	0.94711	-0.01567	-0.01260	0.94733	T10	1.96940	0.52892	-0.01070	2.03921

Tabelle 39: Dipolmomente in [a.u.] an der orthogonalen T_{LLCT} Zustandsgeometrie

SMLCT1 _{ortho}									
Zustand	x	y	z	tot	Zustand	x	y	z	tot
GZ	-6.22805	-0.25880	-0.71986	6.27486					
S1	-0.12562	-0.25873	-1.97909	1.99988	T1	-0.25669	-0.25785	-1.94234	1.97612
S2	-1.67739	-0.24799	-1.51427	2.27336	T2	-1.62084	-0.26833	-1.59425	2.28927
S3	6.74773	0.05576	-1.54509	6.92259	T3	6.68561	0.05547	-1.54136	6.86122
S4	-3.94852	-0.23175	-1.11565	4.10965	T4	-6.61017	-0.26489	-0.60087	6.64270
S5	-1.89289	-0.32044	-1.49624	2.43402	T5	0.28127	-0.25958	-1.88954	1.92792
S6	-0.89804	-0.24500	-1.57007	1.82527	T6	-1.54804	-0.27074	-1.60778	2.24826
S7	3.38199	-0.01793	-1.09124	3.55373	T7	-2.33905	-0.21471	-1.23477	2.65366
S8	-0.52801	-0.41112	-2.02834	2.13587	T8	2.77608	-0.07425	-1.06217	2.97327
S9	-0.23285	-0.58759	-1.92985	2.03072	T9	-0.06336	-0.60601	-2.00845	2.09884
S10	0.07336	-0.15391	-2.02789	2.03505	T10	-0.34907	-0.28366	-1.89191	1.94464

Tabelle 40: Dipolmomente in [a.u.] an der orthogonalen S_{MLCT1} Zustandsgeometrie

TMLCT1 _{ortho}									
Zustand	x	y	z	tot	Zustand	x	y	z	tot
GZ	-6.18409	-0.39924	-0.65036	6.2309971					
S1	0.04793	-0.55576	-1.77816	1.86361	T1	-0.06529	-0.55189	-1.74780	1.83402
S2	-1.77218	-0.48047	-1.36170	2.28598	T2	-1.73707	-0.51424	-1.42910	2.30742
S3	6.87122	-0.13699	-1.34921	7.00377	T3	6.79821	-0.13854	-1.34739	6.93183
S4	-2.73739	-0.45224	-1.18655	3.01757	T4	-6.49557	-0.38524	-0.56348	6.53134
S5	2.76837	-0.58998	-1.16487	3.06086	T5	0.55092	-0.62850	-1.68306	1.87915
S6	-1.41971	-0.50801	-1.44591	2.08909	T6	-1.95370	-0.49992	-1.34345	2.42316
S7	3.79425	-0.12892	-0.91145	3.90431	T7	-3.20375	-0.46629	-1.19296	3.45030
S8	-0.43162	-0.60114	-1.80255	1.94855	T8	3.72332	-0.14883	-0.89935	3.83329
S9	-0.18197	-0.88483	-1.70880	1.93288	T9	0.04380	-0.83956	-1.73350	1.92660
S10	0.27317	-0.60192	-1.86281	1.97661	T10	-0.19931	-0.32696	-1.87248	1.91124

Tabelle 41: Dipolmomente in [a.u.] an der orthogonalen T_{MLCT1} Zustandsgeometrie

SMLCT2 _{ortho}									
Zustand	x	y	z	tot	Zustand	x	y	z	tot
GZ	-6.25438	-0.23536	1.00465	6.33893					
S1	1.37400	-0.25173	1.95220	2.40049	T1	1.31299	-0.25137	1.94891	2.36334
S2	6.91019	-0.07646	1.32863	7.03717	T2	6.94919	-0.07518	1.32217	7.07425
S3	-1.47371	-0.22152	1.44577	2.07633	T3	-6.67433	-0.23261	0.93298	6.74324
S4	-4.63698	-0.24065	1.23971	4.80587	T4	-1.74790	-0.23737	1.46188	2.29098
S5	-0.89791	-0.32251	1.63111	1.88965	T5	1.12772	-0.32695	1.94451	2.27151
S6	4.35419	-0.10078	0.82871	4.43350	T6	-4.87621	-0.22308	1.18272	5.02255
S7	1.84734	-0.47440	1.99551	2.76040	T7	3.28256	-0.40709	1.32869	3.56459
S8	1.37903	-0.01014	2.09350	2.50690	T8	2.80156	-0.13329	1.60833	3.23315
S9	0.78622	-1.03500	2.13933	2.50322	T9	-5.15707	-0.27921	1.06168	5.27261
S10	-7.27164	-0.21345	0.87561	7.32728	T10	-0.76576	-0.12314	1.88950	2.04249

Tabelle 42: Dipolmomente in [a.u.] an der orthogonalen S_{MLCT2} Zustandsgeometrie

TMLCT2 _{ortho}									
Zustand	x	y	z	tot	Zustand	x	y	z	tot
GZ	-6.26032	-0.25785	0.98649	6.34281					
S1	1.40292	-0.30475	1.91312	2.39188	T1	1.33886	-0.30456	1.91022	2.35249
S2	6.86452	-0.12735	1.30997	6.98955	T2	6.90696	-0.12601	1.30257	7.02984
S3	-1.45541	-0.25323	1.41582	2.04619	T3	-6.66925	-0.24835	0.91882	6.73682
S4	-4.48882	-0.26814	1.23958	4.66454	T4	-1.73623	-0.26887	1.43088	2.26587
S5	-1.06154	-0.36968	1.57717	1.93675	T5	1.11467	-0.38876	1.90614	2.24210
S6	4.39548	-0.10544	0.78995	4.46715	T6	-4.88460	-0.25548	1.15832	5.02655
S7	1.82969	-0.52655	1.97081	2.74027	T7	4.32203	-0.15922	0.82206	4.40239
S8	1.33841	-0.09254	2.06037	2.45866	T8	1.79847	-0.43158	2.05205	2.76254
S9	0.76858	-1.07724	2.10071	2.48277	T9	-5.66829	-0.30931	0.98042	5.76076
S10	-7.28467	-0.22417	0.85778	7.33843	T10	-0.30846	-0.19797	1.92831	1.96283

Tabelle 43: Dipolmomente in [a.u.] an der orthogonalen T_{MLCT2} Zustandsgeometrie

6.2 Koordinaten

Tabelle 44: Koordinaten des Minimums für *GZ_Planar*-Geometrie

Atom	x	y	z
Cu	0.4518	-0.0091	0.0255
C	-1.4676	0.0129	0.0002
N	-2.1671	1.1141	-0.3351
N	-2.2030	-1.0722	0.3109
C	-3.6044	1.1898	-0.4874
C	-3.6454	-1.1101	0.4015
C	-4.3094	0.0456	-0.0586
O	-4.0708	2.2367	-0.9427
O	-4.1663	-2.1396	0.8348
C	-1.4568	2.3423	-0.5633
C	-0.8153	2.5600	-1.7960
C	-1.4670	3.3139	0.4569
C	-0.1359	3.7715	-1.9745
C	-0.7903	4.5165	0.2230
C	-0.1218	4.7428	-0.9778
H	0.3746	3.9688	-2.9219
H	-0.7860	5.2922	0.9953
H	0.4043	5.6882	-1.1424
C	-1.5312	-2.3167	0.5642
C	-1.5371	-3.2938	-0.4513
C	-0.9282	-2.5427	1.8147
C	-0.8959	-4.5106	-0.1928
C	-0.2813	-3.7683	2.0169
C	-0.2644	-4.7456	1.0263
H	-0.8901	-5.2912	-0.9602
H	0.2000	-3.9716	2.9783
H	0.2353	-5.7018	1.2093
C	4.4368	2.6692	0.9312
C	3.1950	3.2490	1.1495
C	4.4927	1.3483	0.4758
C	2.0498	2.4862	0.9119
C	3.2898	0.6635	0.2612
N	2.0955	1.2231	0.4849
C	5.7965	0.6901	0.2293
C	5.7838	-0.7770	-0.2560

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 44 – Fortsetzung von vorheriger Seite

Atom	x	y	z
C	4.4683	-1.4237	-0.4675
C	3.2776	-0.7257	-0.2284
H	5.3679	3.2152	1.1025
H	3.1016	4.2792	1.4996
H	1.0528	2.9098	1.0618
O	6.8552	1.2451	0.3939
O	6.8330	-1.3417	-0.4468
C	4.3886	-2.7463	-0.9139
N	2.0731	-1.2737	-0.4242
C	2.0047	-2.5390	-0.8416
C	3.1364	-3.3153	-1.0992
H	5.3102	-3.3022	-1.1039
H	1.0001	-2.9527	-0.9673
H	3.0245	-4.3467	-1.4402
C	-5.8055	0.0418	-0.0909
H	-6.1726	1.0246	-0.4245
H	-6.2008	-0.7291	-0.7798
H	-6.2341	-0.1758	0.9048
C	-1.0344	-1.5450	2.9537
H	-1.4473	-0.6096	2.5443
C	-2.2332	-3.0756	-1.7842
H	-2.6344	-2.0499	-1.7920
C	-2.2080	3.1069	1.7671
H	-2.6430	2.0951	1.7528
C	-0.9166	1.5703	-2.9424
H	-1.3447	0.6369	-2.5439
C	-3.4241	-4.0259	-1.9389
H	-4.1235	-3.8978	-1.0965
H	-3.9650	-3.8140	-2.8787
H	-3.0973	-5.0812	-1.9690
C	-2.0292	-2.0544	4.0024
H	-2.1734	-1.3023	4.7989
H	-3.0075	-2.2630	3.5371
H	-1.6681	-2.9856	4.4755
C	-1.8924	2.0970	-4.0006
H	-1.5134	3.0261	-4.4639
H	-2.0360	1.3510	-4.8029
H	-2.8734	2.3157	-3.5459

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 44 – Fortsetzung von vorheriger Seite

Atom	x	y	z
C	-3.3709	4.0947	1.8971
H	-3.0106	5.1382	1.9494
H	-4.0485	4.0005	1.0326
H	-3.9469	3.8914	2.8177
C	0.3206	-1.2041	3.5743
H	0.7895	-2.0810	4.0550
H	1.0208	-0.8188	2.8110
H	0.2009	-0.4267	4.3498
C	-1.2683	-3.1847	-2.9678
H	-1.8053	-3.0023	-3.9156
H	-0.4550	-2.4404	-2.8967
H	-0.8101	-4.1879	-3.0344
C	0.4419	1.2182	-3.5487
H	0.3230	0.4441	-4.3276
H	0.9244	2.0915	-4.0222
H	1.1302	0.8240	-2.7792
C	-1.2742	3.1733	2.9785
H	-0.4845	2.4028	2.9230
H	-0.7851	4.1601	3.0669
H	-1.8435	3.0012	3.9092

Tabelle 45: Koordinaten des Minimums für *GZ-Ortho*-Geometrie

Atom	x	y	z
Cu	-0.450802	-0.004850	0.034677
C	1.450989	0.007028	-0.030752
N	2.155202	1.157133	-0.045118
N	2.167248	-1.134848	-0.076983
C	3.593899	1.258101	-0.103504
C	3.604350	-1.208818	-0.139358
C	4.279082	0.027304	-0.154795
O	4.088665	2.390059	-0.103362
O	4.126958	-2.327555	-0.174019
C	1.423785	2.398672	0.021664
C	1.147442	2.960753	1.285011
C	1.019180	3.023969	-1.175720
C	0.432516	4.163151	1.325587

Continued on next page

Tabelle 45 – continued from previous page

Atom	x	y	z
C	0.305650	4.224015	-1.079217
C	0.012469	4.790443	0.157190
H	0.203575	4.622562	2.290890
H	-0.023290	4.730858	-1.990184
H	-0.544374	5.731164	0.210268
C	1.453128	-2.387496	-0.043400
C	1.196336	-2.993195	1.203676
C	1.046214	-2.979844	-1.256819
C	0.493974	-4.203618	1.212149
C	0.347765	-4.190839	-1.192334
C	0.070140	-4.798154	0.028228
H	0.278346	-4.695660	2.164412
H	0.017642	-4.673331	-2.115960
H	-0.477351	-5.745405	0.056409
C	-4.402593	0.037714	-2.811614
C	-3.159485	0.047823	-3.429727
C	-4.461494	0.012166	-1.415254
C	-2.017542	0.032798	-2.627434
C	-3.260310	-0.000923	-0.694918
N	-2.064934	0.009793	-1.294933
C	-5.767549	-0.000494	-0.715534
C	-5.757888	-0.035497	0.829198
C	-4.443099	-0.044214	1.512894
C	-3.250896	-0.027417	0.777933
H	-5.332388	0.048758	-3.385816
H	-3.064104	0.066946	-4.517491
H	-1.020546	0.039576	-3.074744
O	-6.824493	0.014677	-1.296562
O	-6.807302	-0.053832	1.423548
C	-4.368021	-0.069721	2.908242
N	-2.047775	-0.034606	1.363997
C	-1.985494	-0.058535	2.696446
C	-3.117789	-0.076903	3.511739
H	-5.291241	-0.083277	3.492946
H	-0.983667	-0.062894	3.132365
H	-3.010014	-0.096112	4.598293
C	5.773493	0.013857	-0.219308
H	6.153728	1.046516	-0.233136

Continued on next page

Tabelle 45 – continued from previous page

Atom	x	y	z
H	6.214652	-0.512027	0.648276
H	6.138816	-0.508757	-1.123326
C	1.392343	-2.372655	-2.605626
H	1.511794	-1.285092	-2.456139
C	1.706311	-2.405051	2.508073
H	1.865262	-1.325132	2.344969
C	1.383200	2.464918	-2.540487
H	1.526234	1.376313	-2.423054
C	1.649044	2.333038	2.574033
H	1.806329	1.258200	2.378675
C	3.061328	-3.019643	2.883422
H	3.788122	-2.908561	2.063031
H	3.466171	-2.535980	3.790943
H	2.945079	-4.098256	3.096654
C	2.732209	-2.918800	-3.117523
H	3.024155	-2.408486	-4.053295
H	3.530823	-2.786137	-2.370450
H	2.643072	-3.999385	-3.333434
C	3.003546	2.931341	2.976305
H	2.887034	4.000533	3.232434
H	3.405244	2.410695	3.864573
H	3.732138	2.853956	2.153612
C	2.712311	3.055082	-3.030832
H	2.601262	4.139911	-3.212743
H	3.511002	2.914960	-2.285309
H	3.017535	2.581108	-3.981348
C	0.305879	-2.582535	-3.661917
H	0.274048	-3.629533	-4.011299
H	-0.698785	-2.329954	-3.282171
H	0.511502	-1.955529	-4.547550
C	0.719629	-2.558642	3.667025
H	1.047205	-1.949269	4.527813
H	-0.300111	-2.244618	3.386812
H	0.659200	-3.604070	4.017416
C	0.656449	2.453343	3.731788
H	0.977902	1.816724	4.575011
H	0.597250	3.487511	4.114342
H	-0.362734	2.151130	3.436766

Continued on next page

Tabelle 45 – continued from previous page

Atom	x	y	z
C	0.295280	2.682454	-3.593959
H	-0.705373	2.402945	-3.222799
H	0.245525	3.737318	-3.916676
H	0.513099	2.081498	-4.494645

Tabelle 46: Koordinaten des Minimums für planare S_{LLCT} -Geometrie

Atom	x	y	z
Cu	-0.431494	0.001840	-0.002630
C	1.471920	0.018834	0.009909
N	2.173816	1.122979	0.368940
N	2.198947	-1.072228	-0.340633
C	3.581299	1.192573	0.511258
C	3.608304	-1.112686	-0.468846
C	4.318117	0.050727	0.017005
O	4.108951	2.174849	0.996821
O	4.165314	-2.086881	-0.935894
C	1.446931	2.345935	0.623682
C	0.791404	2.514544	1.855881
C	1.456847	3.336203	-0.378015
C	0.072617	3.700755	2.044261
C	0.730060	4.505802	-0.132348
C	0.033723	4.682791	1.059810
H	-0.456486	3.865790	2.987059
H	0.711850	5.298044	-0.886902
H	-0.532636	5.603130	1.229621
C	1.499138	-2.309949	-0.599538
C	1.521648	-3.299141	0.402808
C	0.855388	-2.491927	-1.836265
C	0.820606	-4.483417	0.152213
C	0.163108	-3.692878	-2.029615
C	0.137337	-4.675292	-1.045047
H	0.812101	-5.275197	0.907367
H	-0.355805	-3.869141	-2.975955
H	-0.408812	-5.607083	-1.218455
C	-4.377865	2.414806	-1.420604
C	-3.152650	2.981916	-1.714742

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 46 – Fortsetzung von vorheriger Seite

Atom	x	y	z
C	-4.433050	1.185926	-0.738350
C	-1.984151	2.305156	-1.328218
C	-3.203868	0.589041	-0.389188
N	-2.009581	1.140992	-0.694551
C	-5.732541	0.572417	-0.420645
C	-5.722204	-0.725101	0.289433
C	-4.413603	-1.299074	0.641614
C	-3.194197	-0.665473	0.324557
H	-5.319983	2.893328	-1.700075
H	-3.076739	3.937361	-2.239115
H	-0.999415	2.728676	-1.535879
O	-6.796493	1.124826	-0.745061
O	-6.777061	-1.309594	0.585978
C	-4.339522	-2.525432	1.326568
N	-1.992279	-1.180982	0.661931
C	-1.948676	-2.343096	1.298221
C	-3.106048	-3.054861	1.654257
H	-5.274040	-3.031823	1.581412
H	-0.957575	-2.736167	1.533520
H	-3.015354	-4.007257	2.181793
C	5.791687	0.047943	0.032865
H	6.184004	1.046248	0.268573
H	6.159338	-0.665161	0.796679
H	6.186455	-0.310477	-0.933179
C	0.953027	-1.484021	-2.968424
H	1.383348	-0.553228	-2.563750
C	2.309119	-3.153271	1.696775
H	2.766929	-2.151090	1.715064
C	2.259480	3.207559	-1.664439
H	2.731052	2.211792	-1.681859
C	0.900638	1.509138	2.989107
H	1.378391	0.597208	2.594861
C	3.451440	-4.173841	1.749588
H	4.099421	-4.092202	0.860969
H	4.071259	-4.007757	2.648385
H	3.062056	-5.206348	1.795924
C	1.915268	-1.995363	-4.047268
H	2.037580	-1.240261	-4.844095

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 46 – Fortsetzung von vorheriger Seite

Atom	x	y	z
H	2.909947	-2.216720	-3.623958
H	1.530732	-2.920503	-4.512711
C	1.813223	2.055591	4.093330
H	1.379708	2.962056	4.552300
H	1.946538	1.302818	4.890550
H	2.808128	2.319126	3.695524
C	3.388152	4.244018	-1.699791
H	2.984690	5.271023	-1.747609
H	4.025766	4.168792	-0.803187
H	4.021839	4.089132	-2.590922
C	-0.409709	-1.123260	-3.561590
H	-0.884918	-1.987168	-4.058103
H	-1.100947	-0.754102	-2.783751
H	-0.294604	-0.329421	-4.320494
C	1.429484	-3.246191	2.946432
H	2.052870	-3.164815	3.853993
H	0.684103	-2.432955	2.982162
H	0.891199	-4.208922	2.998846
C	-0.462347	1.094473	3.545618
H	-0.336871	0.307633	4.310183
H	-0.985636	1.940219	4.024902
H	-1.115994	0.696000	2.749881
C	1.393206	3.294047	-2.923778
H	0.660352	2.470247	-2.972721
H	0.841623	4.249076	-2.977984
H	2.028626	3.226569	-3.824106

Tabelle 47: Koordinaten des Minimums für orthogonale SLLCT-Geometrie

Atom	x	y	z
Cu	-0.450153	-0.002852	0.030985
C	1.429715	0.004809	-0.033640
N	2.136671	1.167018	-0.040215
N	2.144732	-1.152160	-0.082151
C	3.546518	1.268524	-0.086899
C	3.554102	-1.238400	-0.134991
C	4.269524	0.018241	-0.139918

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 47 – Fortsetzung von vorheriger Seite

Atom	x	y	z
O	4.094418	2.354939	-0.081542
O	4.116985	-2.315686	-0.173349
C	1.414153	2.423398	0.015750
C	1.166048	3.005072	1.275219
C	1.040665	3.045395	-1.192964
C	0.499389	4.234959	1.298453
C	0.376734	4.273898	-1.107766
C	0.107349	4.863979	0.122280
H	0.285897	4.713844	2.257267
H	0.066479	4.783329	-2.023188
H	-0.412059	5.825838	0.164241
C	1.433055	-2.415673	-0.070475
C	1.192673	-3.044241	1.167775
C	1.062839	-2.997461	-1.300056
C	0.537353	-4.280266	1.148253
C	0.410041	-4.234111	-1.257661
C	0.148625	-4.870296	-0.049037
H	0.330265	-4.795043	2.089728
H	0.102635	-4.713405	-2.190149
H	-0.361866	-5.837790	-0.040722
C	-4.409086	0.035468	-2.706454
C	-3.193290	0.048482	-3.364063
C	-4.444441	0.012277	-1.300714
C	-2.013812	0.038017	-2.601845
C	-3.205345	0.002796	-0.627710
N	-2.020594	0.015841	-1.276327
C	-5.733026	-0.001748	-0.589625
C	-5.699426	-0.024157	0.889751
C	-4.379810	-0.035237	1.541998
C	-3.172299	-0.021945	0.813626
H	-5.359131	0.042725	-3.246721
H	-3.133827	0.066385	-4.454799
H	-1.035710	0.047795	-3.088237
O	-6.806605	0.006154	-1.213142
O	-6.743654	-0.034439	1.561135
C	-4.280840	-0.059739	2.944649
N	-1.959035	-0.031704	1.407700
C	-1.892581	-0.055061	2.731745

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 47 – Fortsetzung von vorheriger Seite

Atom	x	y	z
C	-3.036376	-0.069995	3.546332
H	-5.205176	-0.070210	3.527918
H	-0.893630	-0.062068	3.173625
H	-2.927604	-0.089120	4.633217
C	5.742933	0.008727	-0.198094
H	6.140841	1.031875	-0.203231
H	6.156738	-0.549091	0.662097
H	6.085871	-0.532164	-1.098991
C	1.388722	-2.363500	-2.642751
H	1.500717	-1.276177	-2.482795
C	1.656787	-2.462361	2.492922
H	1.804631	-1.376992	2.352160
C	1.373188	2.462125	-2.556888
H	1.494094	1.370793	-2.435262
C	1.633571	2.380861	2.579623
H	1.791924	1.302645	2.400673
C	3.000759	-3.068685	2.920432
H	3.778604	-2.942967	2.151079
H	3.353517	-2.598376	3.855647
H	2.887441	-4.151536	3.107828
C	2.717040	-2.896975	-3.197867
H	2.968518	-2.388553	-4.145758
H	3.552735	-2.757258	-2.494753
H	2.634280	-3.978914	-3.405199
C	2.971121	2.984385	3.030279
H	2.847748	4.059388	3.253172
H	3.325827	2.486237	3.950162
H	3.751512	2.890772	2.259009
C	2.697453	3.025703	-3.091470
H	2.606850	4.113927	-3.258677
H	3.534239	2.865710	-2.394068
H	2.952370	2.554721	-4.057617
C	0.282234	-2.561914	-3.681550
H	0.254038	-3.602031	-4.049992
H	-0.714764	-2.322969	-3.276349
H	0.466530	-1.916131	-4.557849
C	0.629066	-2.641047	3.613221
H	0.914210	-2.032268	4.489007

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 47 – Fortsetzung von vorheriger Seite

Atom	x	y	z
H	-0.383524	-2.342724	3.295878
H	0.577438	-3.689940	3.953201
C	0.602921	2.510203	3.703958
H	0.892066	1.872463	4.557553
H	0.542226	3.545562	4.081766
H	-0.406767	2.215296	3.374456
C	0.265857	2.687831	-3.589214
H	-0.729584	2.428223	-3.193022
H	0.230410	3.739648	-3.922106
H	0.455164	2.073470	-4.486801

Tabelle 48: Koordinaten des Minimums für planare T_{LLCT} -Geometrie

Atom	x	y	z
Cu	-0.431633	-0.000048	-0.005577
C	1.471491	0.018037	0.008882
N	2.172583	1.122843	0.368059
N	2.199673	-1.072943	-0.340183
C	3.579661	1.193090	0.512433
C	3.608960	-1.112322	-0.468114
C	4.317771	0.051614	0.018638
O	4.106606	2.175188	0.998790
O	4.167252	-2.085511	-0.935518
C	1.445347	2.345974	0.621468
C	0.788844	2.515579	1.853014
C	1.456746	3.335690	-0.380767
C	0.070588	3.702312	2.040066
C	0.730803	4.506035	-0.136212
C	0.033436	4.684006	1.055201
H	-0.459685	3.868012	2.982092
H	0.713874	5.297848	-0.891245
H	-0.532607	5.604716	1.224031
C	1.501421	-2.311458	-0.599794
C	1.523601	-3.300396	0.402856
C	0.860756	-2.494893	-1.837867
C	0.825149	-4.485953	0.151154
C	0.170687	-3.696961	-2.032223

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 48 – Fortsetzung von vorheriger Seite

Atom	x	y	z
C	0.144566	-4.679158	-1.047454
H	0.816574	-5.277648	0.906443
H	-0.346093	-3.874265	-2.979558
H	-0.399681	-5.611893	-1.221765
C	-4.379142	2.423887	-1.403119
C	-3.153877	2.990313	-1.698690
C	-4.434402	1.191499	-0.727529
C	-1.985236	2.308668	-1.321216
C	-3.204842	0.591188	-0.384504
N	-2.010257	1.142630	-0.691163
C	-5.733937	0.579589	-0.407283
C	-5.723516	-0.719868	0.299315
C	-4.414699	-1.297333	0.644449
C	-3.195020	-0.664909	0.324706
H	-5.321325	2.905867	-1.676427
H	-3.078223	3.948639	-2.217763
H	-1.000540	2.729871	-1.533786
O	-6.798218	1.136167	-0.724011
O	-6.778568	-1.304459	0.595706
C	-4.339986	-2.527649	1.321925
N	-1.992503	-1.184501	0.654780
C	-1.948904	-2.349161	1.286278
C	-3.106176	-3.061477	1.641507
H	-5.274398	-3.033925	1.577457
H	-0.957724	-2.744012	1.518420
H	-3.015221	-4.017363	2.162614
C	5.791206	0.050029	0.035580
H	6.183014	1.048387	0.271890
H	6.158648	-0.663295	0.799244
H	6.186696	-0.307951	-0.930245
C	0.958530	-1.487132	-2.970134
H	1.390936	-0.557031	-2.566150
C	2.308390	-3.152941	1.698214
H	2.764207	-2.149829	1.717176
C	2.259649	3.205232	-1.666839
H	2.729550	2.208658	-1.683591
C	0.895564	1.510254	2.986538
H	1.372924	0.597792	2.593094

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 48 – Fortsetzung von vorheriger Seite

Atom	x	y	z
C	3.452526	-4.171337	1.753126
H	4.102371	-4.088096	0.865994
H	4.070055	-4.004510	2.653371
H	3.064934	-5.204567	1.797899
C	1.918342	-1.999581	-4.050552
H	2.040043	-1.244617	-4.847583
H	2.913518	-2.221773	-3.628828
H	1.532286	-2.924343	-4.515457
C	1.807171	2.055761	4.092023
H	1.374241	2.962860	4.550268
H	1.938374	1.302946	4.889557
H	2.802996	2.317905	3.695584
C	3.389938	4.239900	-1.702385
H	2.988089	5.267497	-1.750864
H	4.027215	4.164248	-0.805554
H	4.023651	4.083626	-2.593262
C	-0.404763	-1.124453	-3.560899
H	-0.882588	-1.988175	-4.055254
H	-1.093664	-0.753205	-2.781945
H	-0.289921	-0.331630	-4.320910
C	1.426608	-3.247170	2.946260
H	2.048200	-3.163785	3.854880
H	0.679280	-2.435635	2.980083
H	0.890500	-4.211110	2.998256
C	-0.468764	1.097158	3.540917
H	-0.345491	0.310446	4.305975
H	-0.991955	1.943676	4.018954
H	-1.121495	0.699182	2.744163
C	1.393700	3.292353	-2.926369
H	0.658196	2.470814	-2.973871
H	0.845172	4.249041	-2.982122
H	2.028892	3.221433	-3.826609

Tabelle 49: Koordinaten des Minimums für orthogonale T_{LLCT} -Geometrie

Atom	x	y	z
Cu	-0.450390	-0.003017	0.031690
C	1.429531	0.004787	-0.033386
N	2.136668	1.166934	-0.038652
N	2.144543	-1.152176	-0.080555
C	3.546632	1.268313	-0.083008
C	3.554152	-1.238675	-0.127447
C	4.269717	0.017855	-0.129528
O	4.094557	2.354780	-0.081353
O	4.117022	-2.316081	-0.162678
C	1.413928	2.423399	0.011995
C	1.162775	3.008906	1.269042
C	1.043393	3.041699	-1.199485
C	0.495948	4.238814	1.286897
C	0.378895	4.270239	-1.119742
C	0.106440	4.864040	0.107845
H	0.280305	4.720733	2.243700
H	0.070849	4.776802	-2.037517
H	-0.413212	5.825943	0.145586
C	1.432678	-2.415629	-0.074653
C	1.187970	-3.048076	1.160718
C	1.067019	-2.993767	-1.307336
C	0.533739	-4.284577	1.134922
C	0.414764	-4.230829	-1.271222
C	0.149704	-4.871118	-0.065561
H	0.323779	-4.802529	2.074013
H	0.110580	-4.707096	-2.206344
H	-0.360209	-5.838948	-0.062082
C	-4.419117	0.032115	-2.691392
C	-3.205747	0.045094	-3.353478
C	-4.449304	0.009919	-1.285567
C	-2.023447	0.035587	-2.595609
C	-3.207693	0.001377	-0.617035
N	-2.025256	0.014343	-1.270046
C	-5.735295	-0.004208	-0.569822
C	-5.696350	-0.025373	0.909518
C	-4.374348	-0.035464	1.556934
C	-3.169497	-0.022221	0.824073

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 49 – Fortsetzung von vorheriger Seite

Atom	x	y	z
H	-5.371135	0.038641	-3.228191
H	-3.150357	0.062213	-4.444435
H	-1.047199	0.045711	-3.085668
O	-6.811166	0.003200	-1.189344
O	-6.738168	-0.036086	1.584575
C	-4.270161	-0.058774	2.959216
N	-1.954056	-0.031054	1.413782
C	-1.882701	-0.053354	2.737558
C	-3.023482	-0.068015	3.556369
H	-5.192332	-0.069154	3.545903
H	-0.882090	-0.059961	3.175754
H	-2.910709	-0.086238	4.642858
C	5.743400	0.008029	-0.180937
H	6.141835	1.030972	-0.174998
H	6.152751	-0.558941	0.675175
H	6.090404	-0.523775	-1.085894
C	1.396104	-2.354857	-2.646836
H	1.506345	-1.267972	-2.482841
C	1.646417	-2.469910	2.489419
H	1.794810	-1.384135	2.352356
C	1.380716	2.455041	-2.560749
H	1.503672	1.364363	-2.435603
C	1.627805	2.388745	2.576253
H	1.784090	1.309550	2.401204
C	2.988640	-3.077329	2.920765
H	3.769545	-2.949094	2.154917
H	3.337501	-2.609695	3.858776
H	2.874697	-4.160750	3.104455
C	2.726577	-2.884767	-3.200126
H	2.979765	-2.372682	-4.145576
H	3.560163	-2.746477	-2.494239
H	2.645805	-3.966033	-3.411627
C	2.966300	2.990939	3.025946
H	2.845000	4.066791	3.245791
H	3.319501	2.494829	3.947500
H	3.747138	2.893833	2.255535
C	2.705257	3.020071	-3.093113
H	2.612399	4.107500	-3.264317

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 49 – Fortsetzung von vorheriger Seite

Atom	x	y	z
H	3.539989	2.864667	-2.392199
H	2.964625	2.546371	-4.056771
C	0.292827	-2.550840	-3.689485
H	0.266829	-3.589627	-4.061850
H	-0.705603	-2.314707	-3.286215
H	0.478910	-1.901555	-4.562815
C	0.613741	-2.652062	3.604597
H	0.895233	-2.046654	4.483905
H	-0.397371	-2.352216	3.283918
H	0.560312	-3.702115	3.940661
C	0.596418	2.524455	3.699242
H	0.883227	1.889072	4.555378
H	0.537953	3.561282	4.073368
H	-0.413717	2.230783	3.369953
C	0.275660	2.675187	-3.596688
H	-0.720183	2.414412	-3.202277
H	0.238525	3.725967	-3.932666
H	0.468856	2.058691	-4.491993

Tabelle 50: Koordinaten des Minimums für planare S_{MLCT_1} -Geometrie

Atom	x	y	z
Cu	-0.419201	-0.458758	0.209753
C	1.464870	0.049766	0.007490
N	2.142493	1.157678	0.289974
N	2.150990	-1.026817	-0.369390
C	3.602767	1.200468	0.368683
C	3.586673	-1.089943	-0.566092
C	4.275371	0.059965	-0.129463
O	4.104872	2.215091	0.834923
O	4.034626	-2.130636	-1.040356
C	1.449144	2.384518	0.583954
C	0.773237	2.520842	1.809714
C	1.495069	3.416273	-0.376645
C	0.067634	3.709806	2.030638
C	0.788473	4.590264	-0.095457
C	0.067445	4.731619	1.086967

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 50 – Fortsetzung von vorheriger Seite

Atom	x	y	z
H	-0.476684	3.847741	2.968975
H	0.800569	5.412375	-0.817234
H	-0.486540	5.654458	1.282015
C	1.390151	-2.235833	-0.553007
C	1.424748	-3.204608	0.475714
C	0.675961	-2.426968	-1.760374
C	0.693384	-4.379057	0.276379
C	-0.058682	-3.610639	-1.889150
C	-0.047635	-4.575767	-0.886178
H	0.705407	-5.159542	1.042838
H	-0.630232	-3.795265	-2.801870
H	-0.617453	-5.499966	-1.017419
C	-3.971343	2.317018	-1.427255
C	-2.689920	2.812973	-1.569641
C	-4.180097	1.077624	-0.795806
C	-1.612174	2.055637	-1.079636
C	-3.037776	0.390468	-0.338320
N	-1.787294	0.886643	-0.488519
C	-5.541364	0.545412	-0.620146
C	-5.686926	-0.752850	0.089280
C	-4.457415	-1.419725	0.545905
C	-3.177716	-0.871406	0.328335
H	-4.844858	2.865892	-1.788659
H	-2.497656	3.776561	-2.046407
H	-0.587080	2.422195	-1.155040
O	-6.527777	1.163258	-1.038858
O	-6.799762	-1.255810	0.287891
C	-4.518204	-2.648575	1.226614
N	-2.045850	-1.491872	0.735172
C	-2.125269	-2.644847	1.383593
C	-3.356578	-3.263744	1.653531
H	-5.502015	-3.090360	1.405910
H	-1.185459	-3.103808	1.698042
H	-3.375691	-4.215476	2.188243
C	5.770405	0.088800	-0.180429
H	6.142427	0.763917	-0.974651
H	6.190198	0.455487	0.772322
H	6.161316	-0.920517	-0.381478

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 50 – Fortsetzung von vorheriger Seite

Atom	x	y	z
C	0.784737	-1.457107	-2.924031
H	1.118405	-0.482556	-2.530001
C	2.258647	-3.028814	1.733026
H	2.725385	-2.031260	1.699539
C	2.295665	3.314800	-1.666802
H	2.720565	2.300057	-1.730637
C	0.871094	1.485434	2.917179
H	1.291402	0.559509	2.490338
C	3.395864	-4.054800	1.768781
H	4.015268	-3.973927	0.860722
H	4.039261	-3.876667	2.648112
H	3.005805	-5.085916	1.838747
C	1.873692	-1.947731	-3.887913
H	2.023784	-1.215632	-4.700874
H	2.831713	-2.093525	-3.361520
H	1.581972	-2.910789	-4.343882
C	1.865413	1.964836	3.981360
H	1.502185	2.885386	4.472260
H	2.002255	1.193411	4.759948
H	2.847232	2.183210	3.528076
C	3.471177	4.297558	-1.645383
H	3.116215	5.343602	-1.620777
H	4.105357	4.118368	-0.762726
H	4.088775	4.172608	-2.552589
C	-0.538725	-1.223370	-3.652143
H	-0.887263	-2.128680	-4.178319
H	-1.339547	-0.903481	-2.962025
H	-0.411799	-0.434422	-4.413322
C	1.412872	-3.085042	3.007694
H	2.054872	-2.942190	3.894039
H	0.643243	-2.291954	3.026494
H	0.903552	-4.058292	3.122010
C	-0.481899	1.126408	3.533192
H	-0.362513	0.306244	4.262715
H	-0.930771	1.979518	4.070406
H	-1.208808	0.799706	2.766985
C	1.437803	3.516712	-2.919701
H	0.642646	2.755802	-3.008220

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 50 – Fortsetzung von vorheriger Seite

Atom	x	y	z
H	0.959689	4.512047	-2.935336
H	2.068144	3.439171	-3.822657

Tabelle 51: Koordinaten des Minimums für orthogonale S_{MLCT_1} -Geometrie

Atom	x	y	z
Cu	-0.467497	-0.161189	-0.387175
C	1.422435	0.028266	0.019824
N	2.099435	1.169920	0.140031
N	2.090644	-1.124889	0.052309
C	3.554655	1.223289	0.144904
C	3.520189	-1.250505	0.254073
C	4.210628	-0.019940	0.291858
O	4.082181	2.324374	0.024137
O	3.979360	-2.388104	0.326097
C	1.385803	2.426680	0.097356
C	1.239736	3.177199	1.283751
C	0.873846	2.870073	-1.140380
C	0.509123	4.368038	1.207273
C	0.144041	4.064444	-1.153564
C	-0.044925	4.803587	0.008384
H	0.370492	4.970576	2.108586
H	-0.271434	4.432907	-2.094717
H	-0.617983	5.734968	-0.022857
C	1.342836	-2.314120	-0.289531
C	0.658132	-3.029012	0.716093
C	1.321776	-2.704589	-1.646441
C	-0.109098	-4.127184	0.313708
C	0.539095	-3.813058	-1.989520
C	-0.177258	-4.510305	-1.023220
H	-0.661388	-4.701526	1.061365
H	0.499353	-4.144857	-3.030831
H	-0.786681	-5.371640	-1.311784
C	-4.799107	-0.931097	-2.143557
C	-3.698963	-1.089144	-3.016272
C	-4.549697	-0.568822	-0.824017
C	-2.426028	-0.882046	-2.538405

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 51 – Fortsetzung von vorheriger Seite

Atom	x	y	z
C	-3.227916	-0.365842	-0.402731
N	-2.176812	-0.520701	-1.248850
C	-5.651318	-0.399747	0.151227
C	-5.299749	-0.027188	1.598105
C	-3.872922	0.163341	1.951722
C	-2.897487	0.007942	0.954605
H	-5.826828	-1.089247	-2.475061
H	-3.843068	-1.378747	-4.059189
H	-1.553925	-1.008379	-3.184575
O	-6.814809	-0.550900	-0.152431
O	-6.189730	0.102083	2.409395
C	-3.481731	0.493920	3.243067
N	-1.580954	0.187818	1.221775
C	-1.202089	0.501388	2.481658
C	-2.105698	0.660555	3.509869
H	-4.238013	0.613518	4.021278
H	-0.128140	0.617998	2.643135
H	-1.751619	0.912737	4.511605
C	5.703156	-0.015069	0.393819
H	6.047189	0.567309	1.268151
H	6.076993	-1.045595	0.489712
H	6.166525	0.446955	-0.497451
C	2.186269	-2.033599	-2.701303
H	2.588905	-1.099739	-2.275365
C	0.798546	-2.686985	2.188555
H	1.061914	-1.617627	2.261276
C	1.185910	2.169827	-2.453958
H	1.430356	1.115162	-2.238401
C	1.883115	2.786089	2.605918
H	2.115956	1.706845	2.564077
C	1.960240	-3.483320	2.799105
H	2.894182	-3.317082	2.238319
H	2.116563	-3.186288	3.851523
H	1.734329	-4.564909	2.779824
C	3.388418	-2.928055	-3.029979
H	4.057697	-2.420651	-3.747237
H	3.961957	-3.158104	-2.117325
H	3.058569	-3.878948	-3.485722

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 51 – Fortsetzung von vorheriger Seite

Atom	x	y	z
C	3.207746	3.535959	2.810001
H	3.020785	4.622726	2.884645
H	3.686018	3.209607	3.751013
H	3.901476	3.356653	1.975263
C	2.438705	2.793430	-3.082974
H	2.245894	3.845603	-3.359904
H	3.286708	2.777037	-2.378178
H	2.726201	2.246187	-3.998660
C	1.418370	-1.658541	-3.969021
H	1.015208	-2.545602	-4.487610
H	0.574930	-0.979587	-3.752520
H	2.088373	-1.140258	-4.676826
C	-0.483350	-2.905791	2.992063
H	-0.361430	-2.498232	4.010363
H	-1.353732	-2.410849	2.528538
H	-0.718790	-3.978938	3.099893
C	0.979207	3.032035	3.818525
H	1.411383	2.548513	4.711871
H	0.896506	4.109239	4.045229
H	-0.043182	2.646458	3.675554
C	0.019512	2.166968	-3.442371
H	-0.906753	1.770107	-2.989166
H	-0.201785	3.179183	-3.822048
H	0.269353	1.543403	-4.318188

Tabelle 52: Koordinaten des Minimums für planare S_{MLCT2} -Geometrie

Atom	x	y	z
Cu	-0.445510	0.319490	-0.119607
C	1.477412	-0.006439	0.035243
N	2.167338	1.102715	0.340510
N	2.179127	-1.109590	-0.246417
C	3.590228	1.176742	0.531995
C	3.623535	-1.155987	-0.305270
C	4.304986	0.000601	0.174136
O	4.067197	2.222940	0.949565
O	4.154459	-2.175101	-0.718440

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 52 – Fortsetzung von vorheriger Seite

Atom	x	y	z
C	1.431544	2.327001	0.540259
C	0.781421	2.545644	1.773450
C	1.461537	3.293639	-0.487551
C	0.106113	3.760943	1.937418
C	0.787740	4.496399	-0.259613
C	0.110958	4.726625	0.936694
H	-0.413340	3.966214	2.877361
H	0.793337	5.272722	-1.030514
H	-0.410882	5.675014	1.093278
C	1.511047	-2.356264	-0.527810
C	1.558605	-3.364613	0.456015
C	0.897993	-2.544123	-1.778292
C	0.932086	-4.580604	0.163295
C	0.264376	-3.771423	-2.008471
C	0.279943	-4.779797	-1.050656
H	0.949146	-5.387120	0.902352
H	-0.232579	-3.950034	-2.966295
H	-0.212193	-5.734883	-1.256006
C	-4.527428	2.631196	-1.029345
C	-3.343819	3.292235	-1.296909
C	-4.501683	1.320075	-0.521721
C	-2.130689	2.631646	-1.046843
C	-3.235422	0.737376	-0.307753
N	-2.083132	1.396593	-0.565927
C	-5.758090	0.610754	-0.234249
C	-5.659159	-0.771577	0.291485
C	-4.311894	-1.331834	0.486576
C	-3.137207	-0.605559	0.200132
H	-5.500926	3.097578	-1.201604
H	-3.333218	4.310185	-1.692460
H	-1.174482	3.125555	-1.235481
O	-6.856880	1.151924	-0.426378
O	-6.672019	-1.435712	0.554257
C	-4.153146	-2.642701	0.971158
N	-1.900330	-1.123391	0.375251
C	-1.776071	-2.359964	0.827905
C	-2.885473	-3.163312	1.142472
H	-5.052266	-3.221328	1.198353

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 52 – Fortsetzung von vorheriger Seite

Atom	x	y	z
H	-0.760125	-2.743919	0.938851
H	-2.728849	-4.179720	1.510751
C	5.790408	0.005426	0.219449
H	6.144997	0.707192	0.990811
H	6.175463	-1.007360	0.418402
H	6.223254	0.334006	-0.746087
C	0.969965	-1.515273	-2.893377
H	1.419478	-0.594731	-2.485618
C	2.266075	-3.188845	1.790890
H	2.685471	-2.170421	1.829640
C	2.217370	3.082894	-1.788184
H	2.655095	2.071546	-1.770759
C	0.867498	1.566838	2.931063
H	1.312172	0.629566	2.558528
C	3.438252	-4.165794	1.923254
H	4.139206	-4.051570	1.080174
H	3.987769	-3.976706	2.862319
H	3.087784	-5.213097	1.944691
C	1.903580	-2.007009	-4.005154
H	2.015289	-1.233563	-4.785586
H	2.904091	-2.243149	-3.604234
H	1.504667	-2.918178	-4.485345
C	1.812706	2.112902	4.007978
H	1.414735	3.044278	4.448663
H	1.933829	1.376294	4.821748
H	2.807769	2.332742	3.585573
C	3.378567	4.074536	-1.910821
H	3.012338	5.114138	-1.981813
H	4.048435	4.001918	-1.038242
H	3.966630	3.861817	-2.820867
C	-0.408057	-1.139982	-3.441499
H	-0.906910	-1.999210	-3.922438
H	-1.076873	-0.771868	-2.642144
H	-0.313981	-0.343892	-4.200760
C	1.305370	-3.312468	2.977679
H	1.855239	-3.176388	3.925420
H	0.507891	-2.549669	2.942149
H	0.824829	-4.306300	3.011743

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 52 – Fortsetzung von vorheriger Seite

Atom	x	y	z
C	-0.503043	1.215184	3.512426
H	-0.395549	0.448197	4.299005
H	-0.993932	2.091282	3.970461
H	-1.182481	0.814362	2.738819
C	1.294773	3.146419	-3.008532
H	0.498038	2.382527	-2.959158
H	0.812398	4.135111	-3.105474
H	1.873022	2.967678	-3.931801

Tabelle 53: Koordinaten des Minimums für orthogonale S_{MLCT_2} -Geometrie

Atom	x	y	z
Cu	-0.440010	-0.108500	0.333470
C	1.437951	0.019297	-0.089185
N	2.113385	1.169781	-0.181324
N	2.111686	-1.134228	-0.172400
C	3.544550	1.238806	-0.347202
C	3.519182	-1.242582	-0.442713
C	4.209282	-0.003455	-0.556895
O	4.083806	2.335615	-0.302056
O	4.010587	-2.359920	-0.532180
C	1.406587	2.419265	0.017767
C	1.118425	2.818417	1.340047
C	1.060450	3.206680	-1.100256
C	0.413787	4.014334	1.518657
C	0.364520	4.396101	-0.858975
C	0.034148	4.793371	0.432109
H	0.169661	4.351043	2.529195
H	0.074411	5.028419	-1.701680
H	-0.515464	5.725366	0.593115
C	1.387148	-2.347441	0.145135
C	1.427031	-2.803733	1.479802
C	0.683554	-3.030677	-0.869712
C	0.680576	-3.943433	1.797330
C	-0.045987	-4.163044	-0.492337
C	-0.057657	-4.609843	0.825913
H	0.686875	-4.324136	2.822420

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 53 – Fortsetzung von vorheriger Seite

Atom	x	y	z
H	-0.612853	-4.714519	-1.245803
H	-0.638238	-5.497150	1.094382
C	-3.783021	0.383756	-3.138386
C	-2.467354	0.485843	-3.547994
C	-4.083012	0.146991	-1.784307
C	-1.451131	0.352154	-2.586497
C	-2.992650	0.029847	-0.896637
N	-1.710450	0.138327	-1.308577
C	-5.481399	0.029396	-1.342134
C	-5.725584	-0.230682	0.097487
C	-4.551204	-0.359743	0.975508
C	-3.229990	-0.229677	0.499955
H	-4.614428	0.478020	-3.841665
H	-2.205861	0.665969	-4.593171
H	-0.397594	0.415746	-2.872595
O	-6.418267	0.142889	-2.144936
O	-6.874441	-0.342137	0.547435
C	-4.717303	-0.629540	2.345216
N	-2.154852	-0.357063	1.312966
C	-2.335287	-0.618376	2.601355
C	-3.612188	-0.762717	3.164703
H	-5.735357	-0.732610	2.729753
H	-1.439386	-0.723190	3.219443
H	-3.712069	-0.977498	4.230526
C	5.681412	-0.005174	-0.770614
H	5.985473	0.861986	-1.379557
H	6.231072	0.068474	0.188195
H	5.994565	-0.940605	-1.259679
C	0.764895	-2.624926	-2.330734
H	0.966235	-1.540021	-2.367200
C	2.306882	-2.164308	2.540433
H	2.689447	-1.209808	2.142896
C	1.453206	2.852956	-2.525530
H	1.661315	1.768362	-2.560200
C	1.631499	2.065665	2.556921
H	1.859339	1.029567	2.254414
C	3.523937	-3.054967	2.819445
H	4.084681	-3.256377	1.892076

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 53 – Fortsetzung von vorheriger Seite

Atom	x	y	z
H	4.201995	-2.562332	3.538745
H	3.212384	-4.021753	3.253590
C	1.944112	-3.332369	-3.013854
H	2.042739	-2.987995	-4.058670
H	2.893133	-3.144111	-2.487383
H	1.775882	-4.424248	-3.029536
C	2.944872	2.694560	3.041448
H	2.769290	3.725464	3.397778
H	3.366612	2.111609	3.879682
H	3.692567	2.738689	2.232440
C	2.737967	3.584952	-2.939829
H	2.568255	4.676789	-2.942880
H	3.570486	3.369780	-2.253195
H	3.032363	3.285081	-3.961455
C	-0.525383	-2.886601	-3.108370
H	-0.688281	-3.966021	-3.272222
H	-1.412892	-2.484238	-2.591939
H	-0.465200	-2.416281	-4.104935
C	1.553501	-1.843862	3.831693
H	2.222394	-1.329888	4.543616
H	0.689621	-1.182454	3.645608
H	1.181110	-2.756125	4.328889
C	0.615277	1.986977	3.696596
H	0.995769	1.328683	4.496316
H	0.429727	2.974692	4.152306
H	-0.356207	1.589296	3.354129
C	0.350006	3.158242	-3.543918
H	-0.639677	2.800128	-3.216531
H	0.265388	4.242990	-3.729861
H	0.588701	2.684341	-4.512089

Tabelle 54: Koordinaten des Minimums für planare T_{MLCT_1} -Geometrie

Atom	x	y	z
Cu	-0.417977	-0.471661	0.191104
C	1.464538	0.046488	-0.002651
N	2.137127	1.155647	0.287066

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 54 – Fortsetzung von vorheriger Seite

Atom	x	y	z
N	2.155989	-1.026916	-0.378927
C	3.596781	1.201894	0.373966
C	3.592704	-1.084767	-0.570156
C	4.275331	0.066148	-0.126919
O	4.094003	2.215190	0.848572
O	4.045690	-2.122240	-1.046780
C	1.437349	2.379071	0.580583
C	0.751295	2.508145	1.801634
C	1.485223	3.414168	-0.376210
C	0.037879	3.692686	2.020839
C	0.769914	4.583414	-0.096981
C	0.039074	4.717337	1.080188
H	-0.514365	3.824842	2.955309
H	0.783276	5.407638	-0.816297
H	-0.521619	5.636443	1.273793
C	1.399400	-2.238114	-0.565449
C	1.433960	-3.207140	0.463122
C	0.687961	-2.430667	-1.774113
C	0.705355	-4.383086	0.262336
C	-0.043652	-3.616177	-1.904673
C	-0.032581	-4.581418	-0.901910
H	0.717208	-5.163429	1.028938
H	-0.612618	-3.801876	-2.818778
H	-0.599964	-5.506924	-1.034455
C	-3.968875	2.323748	-1.410633
C	-2.684059	2.802159	-1.584969
C	-4.180266	1.093144	-0.764847
C	-1.606816	2.038098	-1.105832
C	-3.036643	0.391953	-0.329063
N	-1.783058	0.873732	-0.506159
C	-5.543633	0.577163	-0.560748
C	-5.689458	-0.721931	0.150640
C	-4.458572	-1.402050	0.582196
C	-3.176941	-0.866187	0.339091
H	-4.842475	2.880915	-1.759047
H	-2.489564	3.757796	-2.076253
H	-0.579855	2.395814	-1.197102
O	-6.531678	1.202423	-0.962845

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 54 – Fortsetzung von vorheriger Seite

Atom	x	y	z
O	-6.804085	-1.210292	0.371510
C	-4.518566	-2.627756	1.267149
N	-2.043289	-1.496947	0.728155
C	-2.123045	-2.650009	1.376187
C	-3.354974	-3.254847	1.672460
H	-5.503145	-3.058670	1.467755
H	-1.182029	-3.121132	1.668992
H	-3.373757	-4.204585	2.210582
C	5.770532	0.100766	-0.169859
H	6.143092	0.798920	-0.943377
H	6.185157	0.442599	0.794527
H	6.165905	-0.901537	-0.396084
C	0.797571	-1.460793	-2.937683
H	1.128107	-0.485514	-2.542808
C	2.265109	-3.029681	1.721952
H	2.730576	-2.031549	1.688569
C	2.297658	3.322133	-1.659697
H	2.725086	2.308582	-1.726312
C	0.847320	1.470250	2.907036
H	1.263420	0.543484	2.477736
C	3.403830	-4.053998	1.760343
H	4.024518	-3.973161	0.853134
H	4.045718	-3.874127	2.640444
H	3.015301	-5.085629	1.830665
C	1.890301	-1.949151	-3.898441
H	2.040351	-1.217198	-4.711539
H	2.847420	-2.091686	-3.369505
H	1.602543	-2.913376	-4.354438
C	1.845729	1.944504	3.969896
H	1.485972	2.865170	4.463205
H	1.981942	1.171255	4.746811
H	2.827155	2.161339	3.515019
C	3.471014	4.307127	-1.620847
H	3.113423	5.352222	-1.593458
H	4.097098	4.124179	-0.733212
H	4.097613	4.188877	-2.522745
C	-0.524547	-1.230285	-3.669296
H	-0.868659	-2.136048	-4.197609

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 54 – Fortsetzung von vorheriger Seite

Atom	x	y	z
H	-1.328327	-0.913816	-2.981046
H	-0.397838	-0.440004	-4.429121
C	1.416785	-3.085797	2.994917
H	2.056621	-2.941336	3.882524
H	0.646625	-2.293209	3.010972
H	0.907791	-4.059252	3.109098
C	-0.505201	1.114804	3.525933
H	-0.386457	0.292165	4.252718
H	-0.948927	1.967751	4.067635
H	-1.235649	0.792981	2.761186
C	1.451536	3.531468	-2.919273
H	0.657208	2.771206	-3.020312
H	0.973631	4.526980	-2.933202
H	2.090394	3.459333	-3.816685

Tabelle 55: Koordinaten des Minimums für orthogonale T_{MLCT1} -Geometrie

Atom	x	y	z
Cu	-0.452225	-0.242578	-0.366382
C	1.437314	0.020969	0.034576
N	2.113390	1.162876	0.156337
N	2.114338	-1.128374	0.034526
C	3.567438	1.218992	0.124287
C	3.543513	-1.255921	0.219292
C	4.232738	-0.023470	0.251653
O	4.090225	2.321079	-0.002886
O	4.003992	-2.393374	0.284100
C	1.397774	2.418697	0.162160
C	1.294061	3.145279	1.368198
C	0.840611	2.884118	-1.046524
C	0.556564	4.333891	1.342277
C	0.107074	4.075628	-1.009636
C	-0.042764	4.790364	0.173090
H	0.449608	4.918674	2.259550
H	-0.342744	4.461292	-1.928082
H	-0.620042	5.719643	0.181361
C	1.354485	-2.309492	-0.304465

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 55 – Fortsetzung von vorheriger Seite

Atom	x	y	z
C	0.650072	-3.003081	0.703989
C	1.332594	-2.708314	-1.659121
C	-0.134537	-4.090372	0.305878
C	0.534042	-3.806975	-1.996773
C	-0.199592	-4.483616	-1.028478
H	-0.702049	-4.648427	1.054354
H	0.494340	-4.146995	-3.035506
H	-0.821627	-5.336935	-1.313620
C	-4.729612	-1.151644	-2.184156
C	-3.605225	-1.397797	-2.997269
C	-4.523074	-0.664868	-0.896104
C	-2.344740	-1.145510	-2.501260
C	-3.213821	-0.431793	-0.454343
N	-2.138226	-0.662859	-1.246597
C	-5.654604	-0.395782	0.020457
C	-5.347649	0.108143	1.432568
C	-3.931859	0.305025	1.819834
C	-2.924114	0.050928	0.878844
H	-5.747022	-1.335937	-2.533964
H	-3.716663	-1.785427	-4.012116
H	-1.452628	-1.327427	-3.105082
O	-6.809249	-0.567315	-0.311817
O	-6.263215	0.334122	2.196349
C	-3.577231	0.738802	3.094186
N	-1.614374	0.224247	1.174899
C	-1.270788	0.634840	2.418415
C	-2.209571	0.899620	3.393234
H	-4.356390	0.937885	3.832245
H	-0.200696	0.737256	2.608870
H	-1.885578	1.226427	4.383898
C	5.726264	-0.014096	0.326459
H	6.082663	0.585942	1.183525
H	6.104559	-1.041631	0.434505
H	6.174193	0.431167	-0.581163
C	2.206947	-2.052698	-2.715311
H	2.639841	-1.135126	-2.283926
C	0.791765	-2.648328	2.173546
H	1.063235	-1.580382	2.237348

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 55 – Fortsetzung von vorheriger Seite

Atom	x	y	z
C	1.105503	2.211414	-2.384382
H	1.403983	1.165708	-2.196762
C	1.991996	2.732348	2.656306
H	2.232763	1.656602	2.582894
C	1.948469	-3.448095	2.789081
H	2.883101	-3.294408	2.225437
H	2.109644	-3.142886	3.838356
H	1.714689	-4.528077	2.779707
C	3.379039	-2.978607	-3.063924
H	4.058315	-2.482256	-3.779404
H	3.952081	-3.235829	-2.158219
H	3.019083	-3.913913	-3.528998
C	3.315368	3.493397	2.825557
H	3.119259	4.575814	2.932698
H	3.834024	3.151577	3.739247
H	3.978844	3.342182	1.961232
C	2.295232	2.891838	-3.073649
H	2.050240	3.940543	-3.320707
H	3.182289	2.893813	-2.418388
H	2.549740	2.369643	-4.013424
C	1.437368	-1.640326	-3.970718
H	0.984010	-2.506481	-4.483413
H	0.632211	-0.920259	-3.741010
H	2.120128	-1.153372	-4.688453
C	-0.491956	-2.846817	2.978896
H	-0.363790	-2.434262	3.994452
H	-1.355356	-2.341901	2.512894
H	-0.742001	-3.915896	3.093467
C	1.137421	2.941631	3.910763
H	1.618188	2.452876	4.775822
H	1.042503	4.013222	4.158216
H	0.117792	2.537383	3.808135
C	-0.115855	2.171465	-3.303487
H	-0.992448	1.719135	-2.805370
H	-0.408937	3.179045	-3.645050
H	0.110366	1.578762	-4.206916

Tabelle 56: Koordinaten des Minimums für planare T_{MLCT2} -Geometrie

Atom	x	y	z
Cu	-0.449059	0.324319	-0.092136
C	1.475911	-0.002419	0.040500
N	2.171451	1.106453	0.335775
N	2.173723	-1.107196	-0.245731
C	3.596508	1.178529	0.511969
C	3.617078	-1.156959	-0.318164
C	4.305773	0.000307	0.149358
O	4.079921	2.224519	0.922182
O	4.142632	-2.178835	-0.731309
C	1.442496	2.332889	0.546449
C	0.807525	2.551164	1.787431
C	1.468301	3.303919	-0.477309
C	0.142837	3.770714	1.964110
C	0.807628	4.511395	-0.236180
C	0.145656	4.741505	0.968521
H	-0.365461	3.975165	2.910347
H	0.811093	5.291188	-1.003558
H	-0.366474	5.693454	1.135216
C	1.502912	-2.354874	-0.515700
C	1.555012	-3.356368	0.474702
C	0.886657	-2.551905	-1.763062
C	0.930463	-4.575721	0.191858
C	0.255347	-3.782176	-1.983538
C	0.276062	-4.784404	-1.019311
H	0.951210	-5.377274	0.936198
H	-0.243768	-3.968111	-2.938825
H	-0.213907	-5.742124	-1.217468
C	-4.525269	2.632230	-1.032332
C	-3.339864	3.307514	-1.254023
C	-4.503205	1.311948	-0.549989
C	-2.128977	2.650301	-0.985850
C	-3.238172	0.733488	-0.314337
N	-2.084099	1.404868	-0.532278
C	-5.760993	0.587792	-0.311084
C	-5.664983	-0.803399	0.193432
C	-4.318999	-1.355687	0.417376
C	-3.142743	-0.615678	0.172668

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 56 – Fortsetzung von vorheriger Seite

Atom	x	y	z
H	-5.497302	3.095121	-1.221580
H	-3.326645	4.333540	-1.628025
H	-1.171787	3.155182	-1.137165
O	-6.858829	1.122649	-0.524256
O	-6.679457	-1.478444	0.418860
C	-4.162440	-2.669561	0.893387
N	-1.906213	-1.126214	0.374238
C	-1.784783	-2.366704	0.816790
C	-2.895383	-3.181042	1.096079
H	-5.062358	-3.258064	1.090058
H	-0.769324	-2.745320	0.948382
H	-2.740292	-4.198979	1.460649
C	5.791433	0.002157	0.178602
H	6.155938	0.716102	0.933824
H	6.176473	-1.008128	0.390343
H	6.213990	0.312319	-0.797492
C	0.952847	-1.529387	-2.884243
H	1.399067	-0.604640	-2.482433
C	2.264766	-3.168934	1.806707
H	2.686113	-2.150962	1.834577
C	2.204097	3.091206	-1.789033
H	2.637898	2.078102	-1.778690
C	0.897939	1.567398	2.940476
H	1.345695	0.633401	2.563515
C	3.435462	-4.146211	1.948156
H	4.136192	-4.041581	1.103578
H	3.985817	-3.948483	2.884929
H	3.083843	-5.192811	1.980427
C	1.886759	-2.024031	-3.994536
H	1.994164	-1.254728	-4.779648
H	2.888729	-2.254173	-3.593764
H	1.490467	-2.939511	-4.468729
C	1.841553	2.111104	4.019812
H	1.441137	3.038868	4.465822
H	1.965416	1.370652	4.829643
H	2.835833	2.336036	3.598140
C	3.367073	4.078092	-1.930013
H	3.004225	5.119081	-1.997893

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 56 – Fortsetzung von vorheriger Seite

Atom	x	y	z
H	4.049111	4.004324	-1.066984
H	3.941242	3.861261	-2.847939
C	-0.427390	-1.162791	-3.432556
H	-0.923493	-2.026817	-3.907760
H	-1.096041	-0.792257	-2.634402
H	-0.337148	-0.371103	-4.196846
C	1.304390	-3.278370	2.995198
H	1.854473	-3.132143	3.941313
H	0.507482	-2.515330	2.950901
H	0.822870	-4.271303	3.040283
C	-0.471688	1.208673	3.519877
H	-0.362065	0.440625	4.305182
H	-0.966805	2.082086	3.978546
H	-1.148651	0.806412	2.744697
C	1.262176	3.158139	-2.994470
H	0.462395	2.398474	-2.931024
H	0.783295	4.149206	-3.084478
H	1.824456	2.975476	-3.926805

Tabelle 57: Koordinaten des Minimums für orthogonale T_{MLCT2} -Geometrie

Atom	x	y	z
Cu	-0.440555	-0.115731	0.327148
C	1.438186	0.016871	-0.090538
N	2.112563	1.168495	-0.179844
N	2.114666	-1.135517	-0.173120
C	3.543614	1.240241	-0.342376
C	3.522731	-1.241243	-0.439750
C	4.211470	-0.000822	-0.550851
O	4.081209	2.337753	-0.296047
O	4.016783	-2.357381	-0.528972
C	1.403999	2.417030	0.018444
C	1.117414	2.818110	1.340314
C	1.054765	3.201562	-1.100567
C	0.411621	4.013521	1.517772
C	0.357021	4.390157	-0.860639
C	0.028704	4.789695	0.430327

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 57 – Fortsetzung von vorheriger Seite

Atom	x	y	z
H	0.168841	4.351880	2.528111
H	0.064356	5.020405	-1.704011
H	-0.521957	5.721229	0.590447
C	1.391789	-2.350258	0.142354
C	1.430250	-2.807179	1.476829
C	0.690614	-3.033820	-0.873898
C	0.684665	-3.947936	1.792687
C	-0.038145	-4.167248	-0.498211
C	-0.051274	-4.614728	0.819804
H	0.689771	-4.329091	2.817636
H	-0.603345	-4.718953	-1.252776
H	-0.631327	-5.502769	1.086968
C	-3.791693	0.394053	-3.135559
C	-2.476338	0.481925	-3.550527
C	-4.088897	0.162043	-1.780474
C	-1.458235	0.340974	-2.592403
C	-2.996250	0.032707	-0.896549
N	-1.714237	0.128968	-1.313468
C	-5.486739	0.058208	-1.333007
C	-5.728046	-0.202153	0.107676
C	-4.551647	-0.344605	0.980465
C	-3.230736	-0.226274	0.499498
H	-4.624636	0.496134	-3.835958
H	-2.217109	0.657100	-4.597102
H	-0.405216	0.397505	-2.882036
O	-6.425698	0.180791	-2.131727
O	-6.876404	-0.302202	0.561219
C	-4.714790	-0.614211	2.350299
N	-2.153454	-0.362694	1.308813
C	-2.331841	-0.625559	2.597162
C	-3.607617	-0.759038	3.165407
H	-5.732238	-0.707894	2.738882
H	-1.434575	-0.740544	3.211457
H	-3.705111	-0.974255	4.231360
C	5.683872	0.000249	-0.761437
H	5.987595	0.869071	-1.368149
H	6.231074	0.073253	0.198841
H	5.999684	-0.933877	-1.251264

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 57 – Fortsetzung von vorheriger Seite

Atom	x	y	z
C	0.773758	-2.626878	-2.334527
H	0.971707	-1.541269	-2.369631
C	2.307689	-2.167154	2.539144
H	2.690408	-1.212386	2.142449
C	1.447035	2.845028	-2.525177
H	1.654322	1.760215	-2.557530
C	1.631666	2.067432	2.557941
H	1.864864	1.032554	2.255436
C	3.524672	-3.057120	2.820638
H	4.087450	-3.258309	1.894441
H	4.201099	-2.564123	3.541229
H	3.212789	-4.024043	3.254232
C	1.956734	-3.329955	-3.015582
H	2.056287	-2.984721	-4.060010
H	2.904064	-3.138835	-2.487158
H	1.792168	-4.422373	-3.032154
C	2.941035	2.702043	3.045791
H	2.760438	3.732268	3.401600
H	3.363104	2.120918	3.885141
H	3.690666	2.748964	2.238726
C	2.732499	3.575082	-2.940661
H	2.562682	4.666872	-2.949284
H	3.563714	3.363520	-2.251236
H	3.029067	3.270205	-3.960168
C	-0.513821	-2.892352	-3.115343
H	-0.671768	-3.972148	-3.281523
H	-1.404170	-2.494726	-2.600140
H	-0.453379	-2.420093	-4.110991
C	1.551646	-1.846918	3.828900
H	2.219058	-1.333096	4.542336
H	0.688380	-1.185218	3.641053
H	1.178114	-2.759227	4.325171
C	0.612929	1.983604	3.695037
H	0.994982	1.327998	4.496247
H	0.420219	2.970569	4.149437
H	-0.355154	1.579930	3.350050
C	0.343705	3.148334	-3.543760
H	-0.645571	2.790196	-3.215025

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 57 – Fortsetzung von vorheriger Seite

Atom	x	y	z
H	0.258585	4.232759	-3.731450
H	0.582221	2.672866	-4.511205

Tabelle 58: Koordinaten des Minimums für T_{npi} -Geometrie

Atom	x	y	z
Cu	-0.445479	-0.007135	-0.016528
C	1.474537	0.014673	0.005121
N	2.174311	1.115056	0.339718
N	2.207197	-1.070161	-0.310074
C	3.612162	1.190308	0.486162
C	3.648812	-1.107625	-0.408850
C	4.315016	0.047576	0.049552
O	4.080138	2.235706	0.943104
O	4.166912	-2.136129	-0.847880
C	1.461560	2.341413	0.571302
C	0.819486	2.553813	1.804815
C	1.465217	3.313782	-0.448214
C	0.134107	3.761573	1.985476
C	0.781238	4.511640	-0.212450
C	0.112869	4.733170	0.989442
H	-0.376612	3.955047	2.933590
H	0.770638	5.287978	-0.984143
H	-0.419175	5.675040	1.154782
C	1.530507	-2.312332	-0.562085
C	1.537342	-3.291041	0.451727
C	0.919401	-2.532852	-1.809867
C	0.886955	-4.503171	0.195153
C	0.265210	-3.754663	-2.010614
C	0.247162	-4.732561	-1.020788
H	0.880646	-5.284892	0.961386
H	-0.222149	-3.954049	-2.969733
H	-0.259570	-5.685390	-1.201964
C	-4.448853	2.623563	-0.993106
C	-3.217189	3.209910	-1.214701
C	-4.493882	1.302330	-0.506971
C	-2.054540	2.469947	-0.956029

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 58 – Fortsetzung von vorheriger Seite

Atom	x	y	z
C	-3.276453	0.644109	-0.273418
N	-2.085798	1.222246	-0.505105
C	-5.788874	0.669768	-0.266309
C	-5.775488	-0.775121	0.251666
C	-4.468614	-1.387927	0.478508
C	-3.263853	-0.709855	0.236291
H	-5.379067	3.162884	-1.184554
H	-3.140272	4.234161	-1.586077
H	-1.064767	2.908017	-1.111216
O	-6.851317	1.244800	-0.465666
O	-6.826913	-1.366604	0.460965
C	-4.398503	-2.710155	0.958818
N	-2.062508	-1.269814	0.456581
C	-2.007429	-2.519036	0.901017
C	-3.155920	-3.278506	1.165933
H	-5.318525	-3.264541	1.156450
H	-1.009356	-2.941764	1.045540
H	-3.059848	-4.303282	1.531378
C	5.811390	0.044822	0.071323
H	6.179723	1.025010	0.411482
H	6.212057	-0.732358	0.749804
H	6.233676	-0.162528	-0.929300
C	1.025800	-1.534191	-2.948089
H	1.438900	-0.599093	-2.537940
C	2.246711	-3.080924	1.779075
H	2.646833	-2.054743	1.789441
C	2.209243	3.114364	-1.757944
H	2.642739	2.101821	-1.749440
C	0.924827	1.562547	2.949539
H	1.361493	0.633270	2.550652
C	3.440208	-4.031209	1.913826
H	4.130222	-3.897256	1.064670
H	3.991385	-3.825384	2.848975
H	3.113886	-5.086825	1.940370
C	2.020597	-2.042950	-3.997075
H	2.165158	-1.290227	-4.792933
H	2.998698	-2.252542	-3.531761
H	1.658985	-2.973620	-4.470891

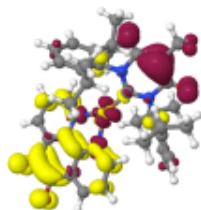
Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 58 – Fortsetzung von vorheriger Seite

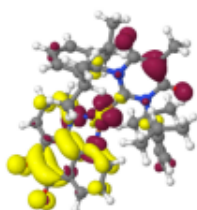
Atom	x	y	z
C	1.892679	2.094144	4.012447
H	1.505861	3.020266	4.475208
H	2.037206	1.347926	4.814426
H	2.874464	2.319502	3.562554
C	3.374065	4.101672	-1.875874
H	3.014737	5.145859	-1.920776
H	4.048247	3.999396	-1.009651
H	3.953054	3.905200	-2.796083
C	-0.328681	-1.192256	-3.569301
H	-0.796005	-2.067744	-4.054010
H	-1.030891	-0.810248	-2.806171
H	-0.208236	-0.412176	-4.341935
C	1.296335	-3.199761	2.973409
H	1.845416	-3.025098	3.915693
H	0.482063	-2.455314	2.919021
H	0.839327	-4.203654	3.037781
C	-0.433376	1.198960	3.549996
H	-0.311540	0.424695	4.328203
H	-0.924360	2.067939	4.022882
H	-1.115958	0.800900	2.777375
C	1.281072	3.191754	-2.972928
H	0.491536	2.420400	-2.929111
H	0.791695	4.179001	-3.054607
H	1.855238	3.028938	-3.902327

6.3 Differenzdichten

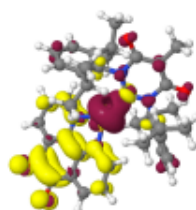
Singulett(S1-S10):



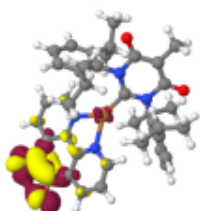
S1(LLCT pi->pi*)



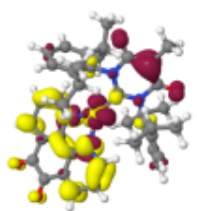
S2(MLCT xz->pi*)



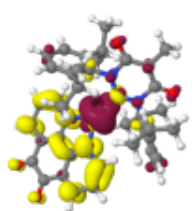
S3(MLCT z2->pi*)



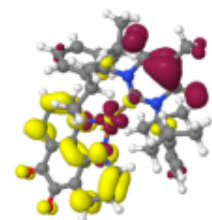
S4(LC n->pi*)



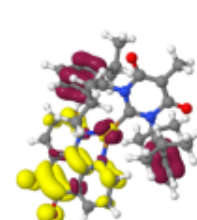
S5(LLCT+MLCT pi->pi*; xz->pi*)



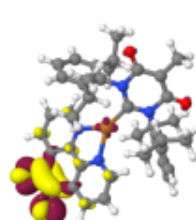
S6(MLCT z2->pi*)



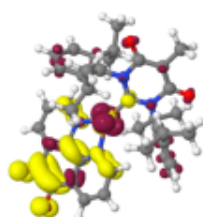
S7(LLCT pi->pi*)



S8(LLCT Ph pi->pi*)



S9(LC n->pi*)



S10(MLCT x2-y2->pi*)

Abbildung 25: Differenzdichten an der planaren Grundzustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Singulett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.

Triplet(T1-T10):

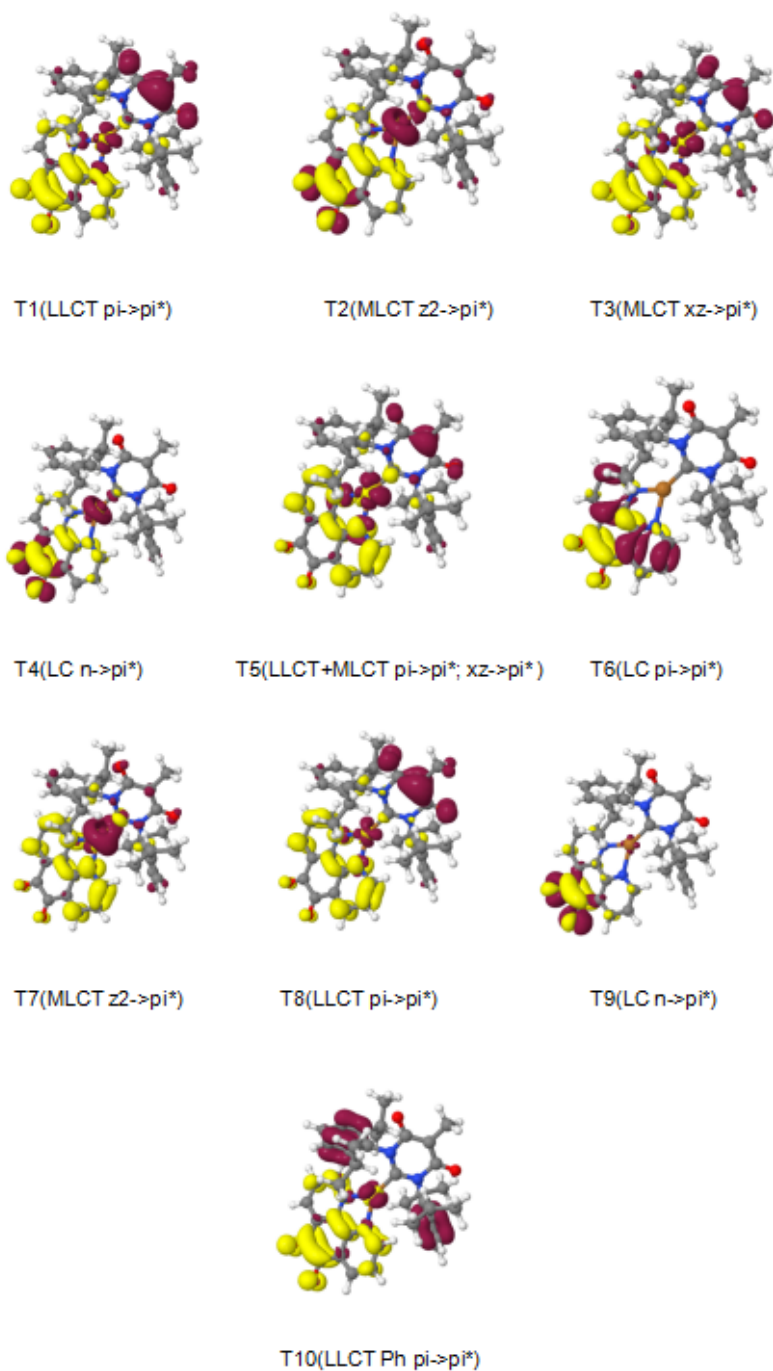


Abbildung 26: Differenzdichten an der planaren Grundzustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Triplet angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.

Singulett(S1-S10):

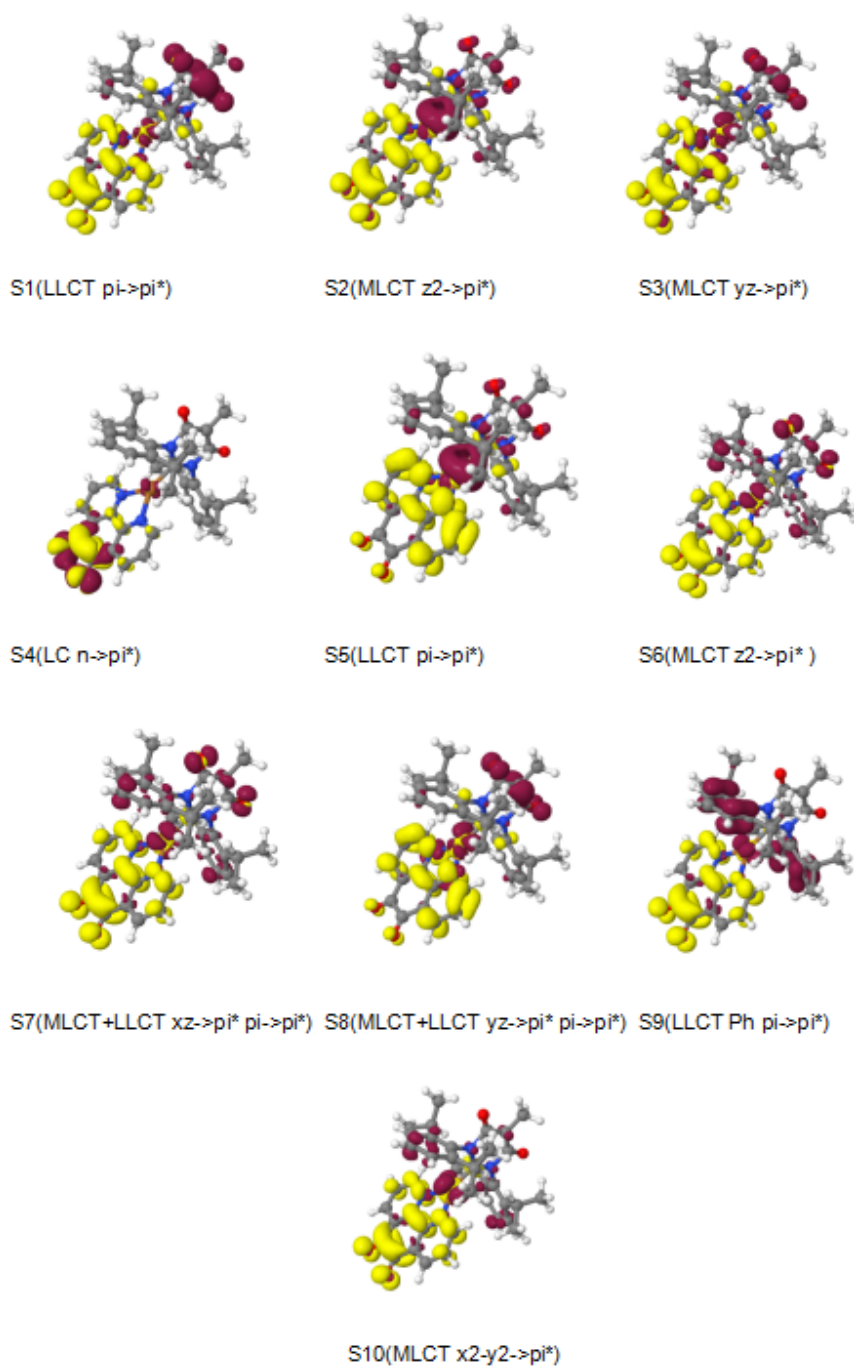


Abbildung 27: Differenzdichten an der orthogonalen Grundzustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Singulett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.

Triplet(S1-S10):

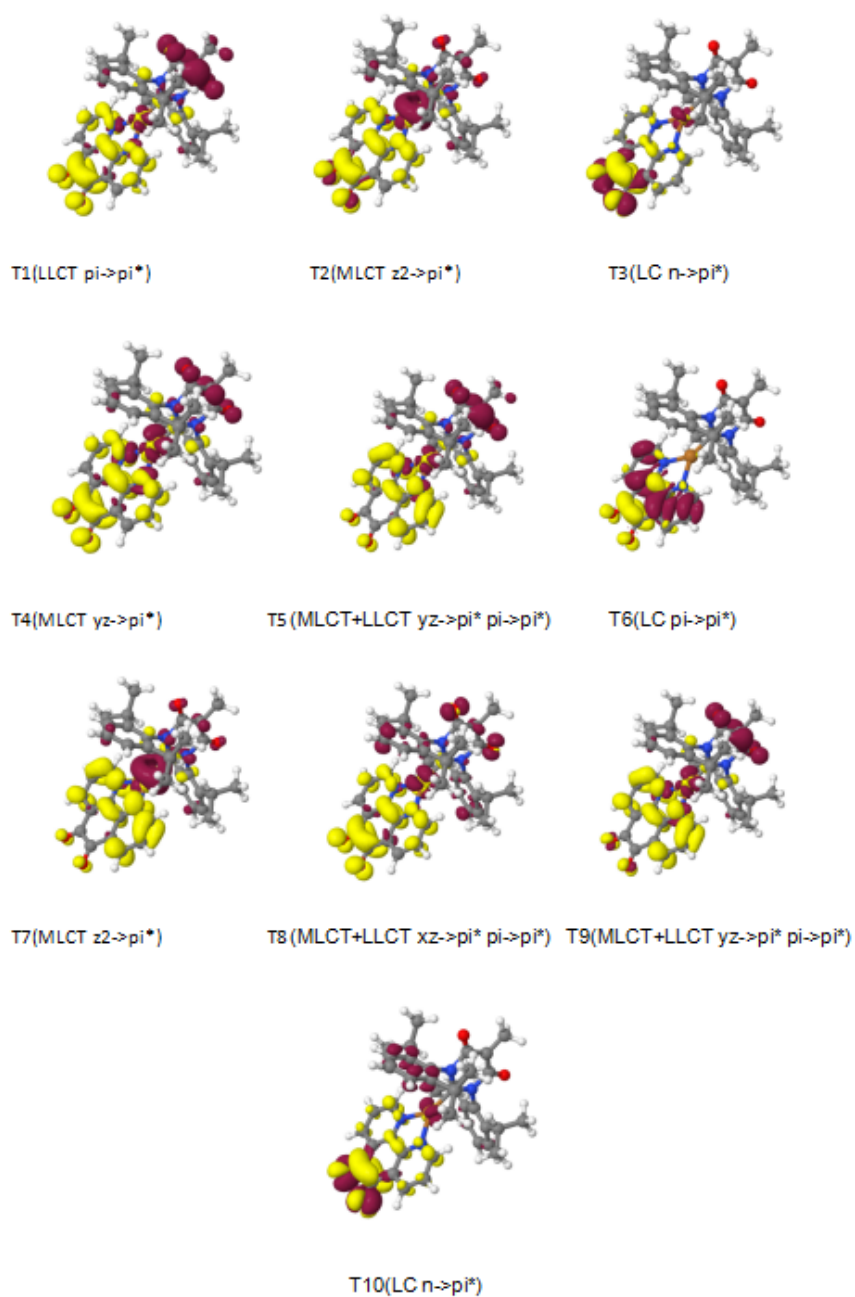
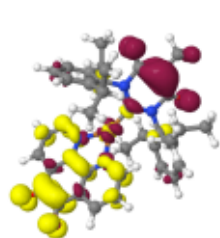
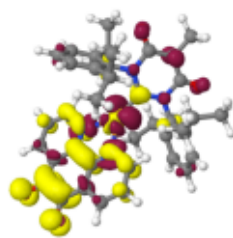


Abbildung 28: Differenzdichten an der orthogonalen Grundzustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Triplet angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.

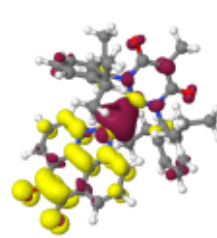
Singulett(S1-S10):



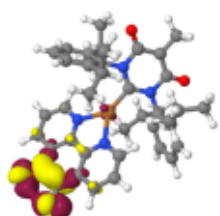
S1(LLCT pi->pi*)



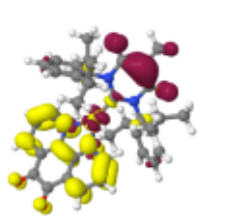
S2(MLCT xz->pi*)



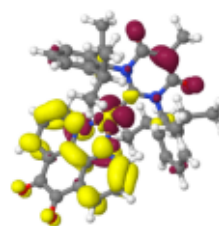
S3(MLCT z2->pi*)



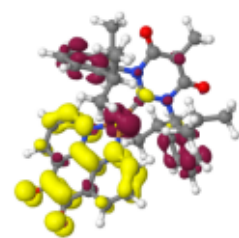
S4(LC n->pi*)



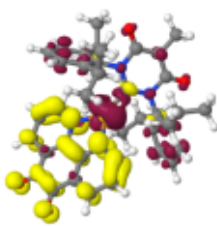
S5(LLCT pi->pi*)



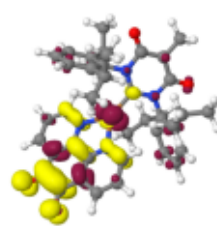
S6(MLCT xz->pi*)



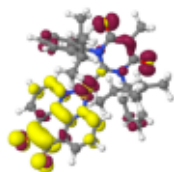
S7(LLCT Ph pi->pi*)



S8(MLCT z2->pi*)



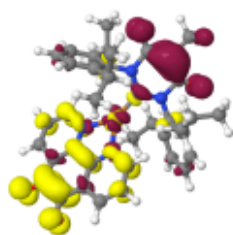
S9(MLCT x2-y2->pi*)



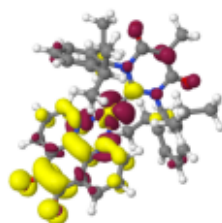
S10(MLCT yz->pi*)

Abbildung 29: Differenzdichten an der planaren S_{LLCT} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Singulett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.

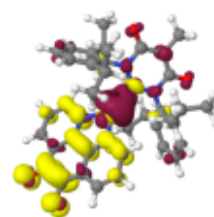
Triplett(T1-T10):



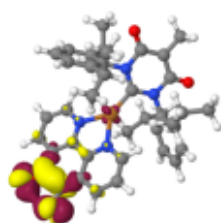
T1(LLCT pi->pi*)



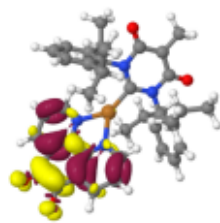
T2(MLCT xz->pi*)



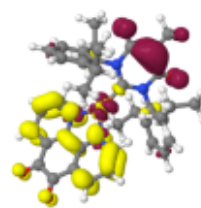
T3(MLCT z2->pi*)



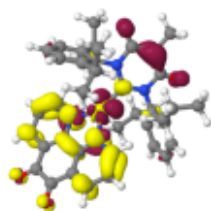
T4(LC n->pi*)



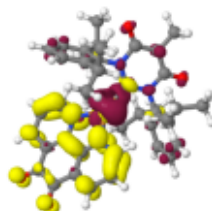
T5(LC pi->pi*)



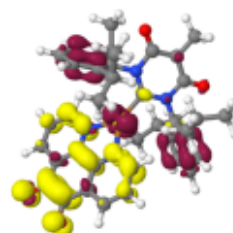
T6(LLCT pi->pi*)



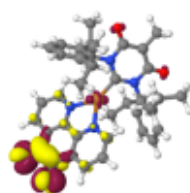
T7(MLCT xz->pi*)



T8(MLCT z2->pi*)



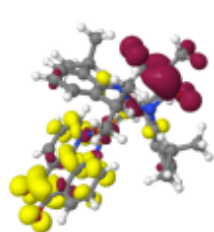
T9(LLCT Ph pi->pi*)



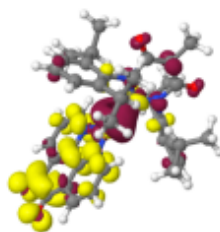
T10(LC n->pi*)

Abbildung 30: Differenzdichten an der planaren S_{LLCT} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Triplet angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.

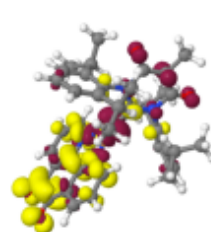
Singulett(S1-S10):



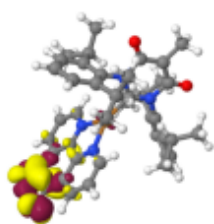
S1(LLCT pi->pi*)



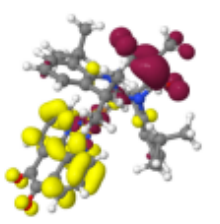
S2(MLCT z2->pi*)



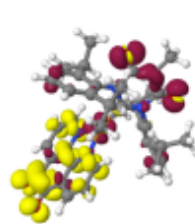
S3(MLCT yz->pi*)



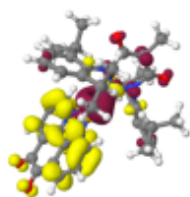
S4(LC n->pi*)



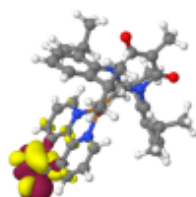
S5(LLCT pi->pi*)



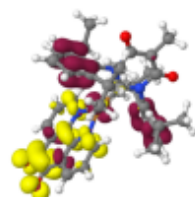
S6(MLCT+LLCT xz->pi* pi->pi*)



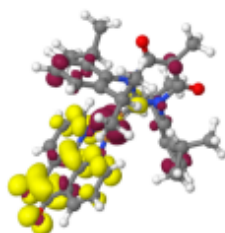
S7(MLCT z2->pi*)



S8(LC n->pi*)



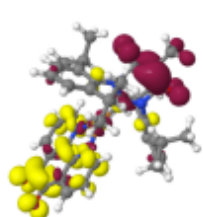
S9(LLCT Ph pi->pi*)



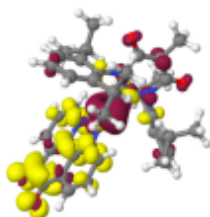
S10(MLCT x2-y2 ->pi*)

Abbildung 31: Differenzdichten an der orthogonalen S_{LLCT} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Singulett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronendichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.

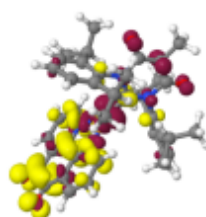
Triplett(T1-T10):



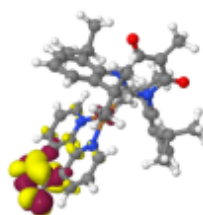
T1(LLCT pi->pi*)



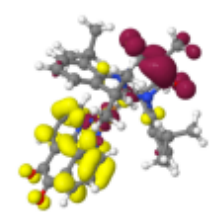
T2(MLCT z2->pi*)



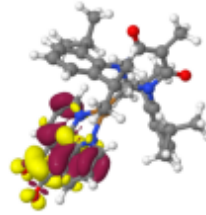
T3(MLCT yz->pi*)



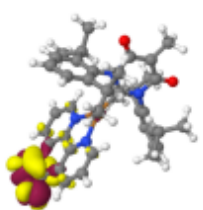
T4(LC n->pi*)



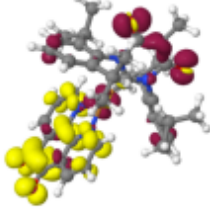
T5(LLCT pi->pi*)



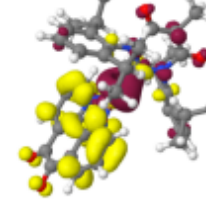
T6(LC pi->pi*)



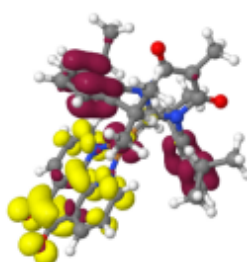
T7(LC n->pi*)



T8(MLCT+LLCT xz->pi* pi->pi*)



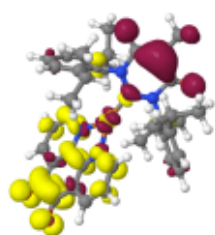
T9(MLCT z2->pi*)



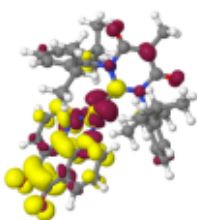
T10(LLCT Ph pi->pi*)

Abbildung 32: Differenzdichten an der orthogonalen S_{LLCT} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Triplett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.

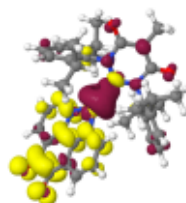
Singulett(S1-S10):



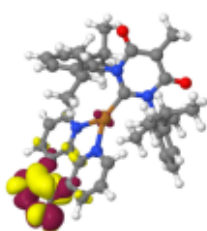
S1(LLCT pi->pi*)



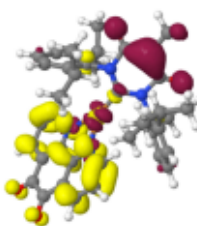
S2(MLCT xz->pi*)



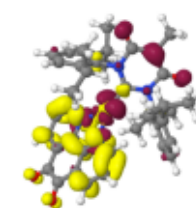
S3(MLCT z2->pi*)



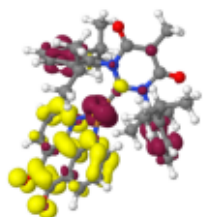
S4(LC n->pi*)



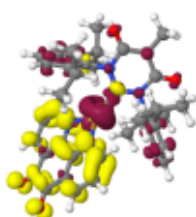
S5(LLCT pi->pi*)



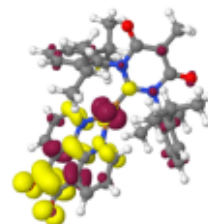
S6(MLCT xz->pi*)



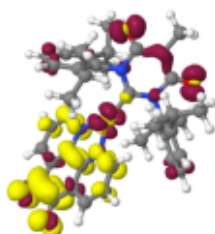
S7(LLCT Ph pi->pi*)



S8(MLCT z2->pi*)



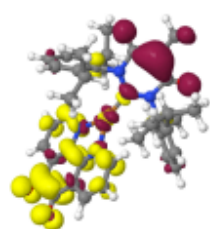
S9(MLCT x2-y2 ->pi*)



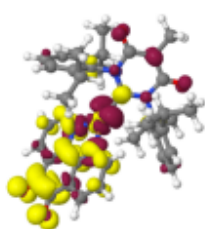
S10(MLCT yz->pi*)

Abbildung 33: Differenzdichten an der planaren T_{LLCT} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Singulett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.

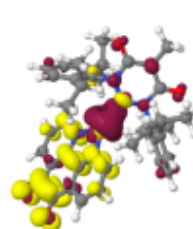
Triplett(T1-T10):



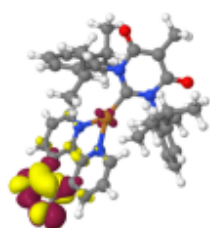
T1(LLCT pi->pi*)



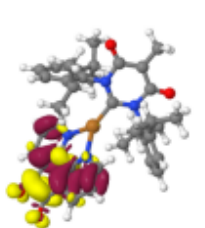
T2(MLCT xz->pi*)



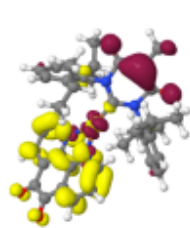
T3(MLCT z2->pi*)



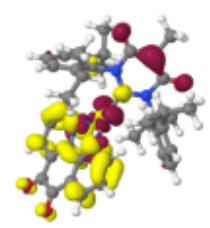
T4(LC n->pi*)



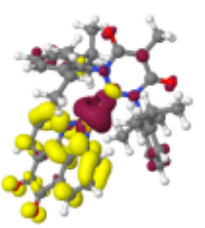
T5(LC Ph pi->pi*)



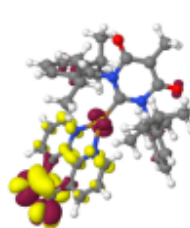
T6(LLCT pi->pi*)



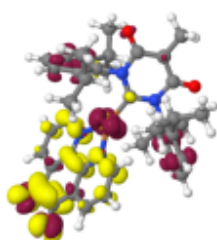
T7(MLCT xz->pi*)



T8(MLCT z2->pi*)



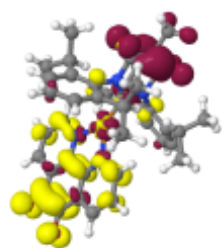
T9(MLCT x2-y2->pi*)



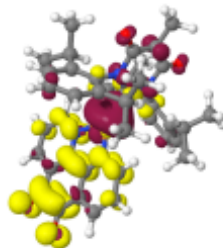
T10(LLCT Ph pi->pi*)

Abbildung 34: Differenzdichten an der planaren T_{LLCT} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Triplett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.

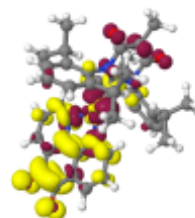
Singulett(S1-S10):



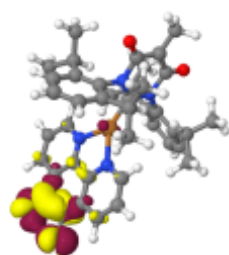
S1(LLCT pi->pi*)



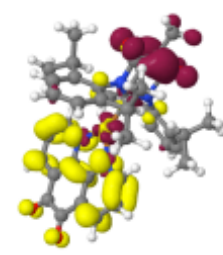
S2(MLCT z2->pi*)



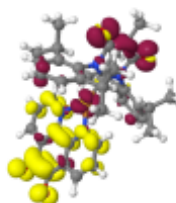
S3(MLCT yz->pi*)



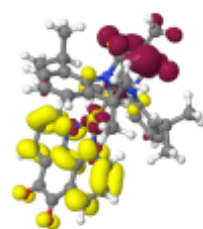
S4(LC n->pi*)



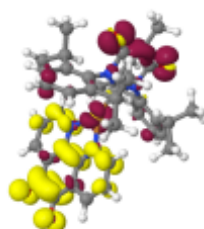
S5(LLCT pi->pi*)



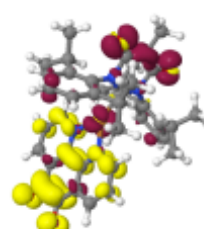
S6(MLCT+LLCT xz->pi* pi->pi*)



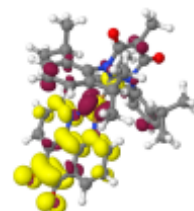
S7(MLCT z2->pi*)



S8(LC n->pi*)



S9(LLCT Ph pi->pi*)



S10(MLCT x2-y2->pi*)

Abbildung 35: Differenzdichten an der orthogonalen T_{LLCT} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Singulett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.

Triplett(S1-S10):

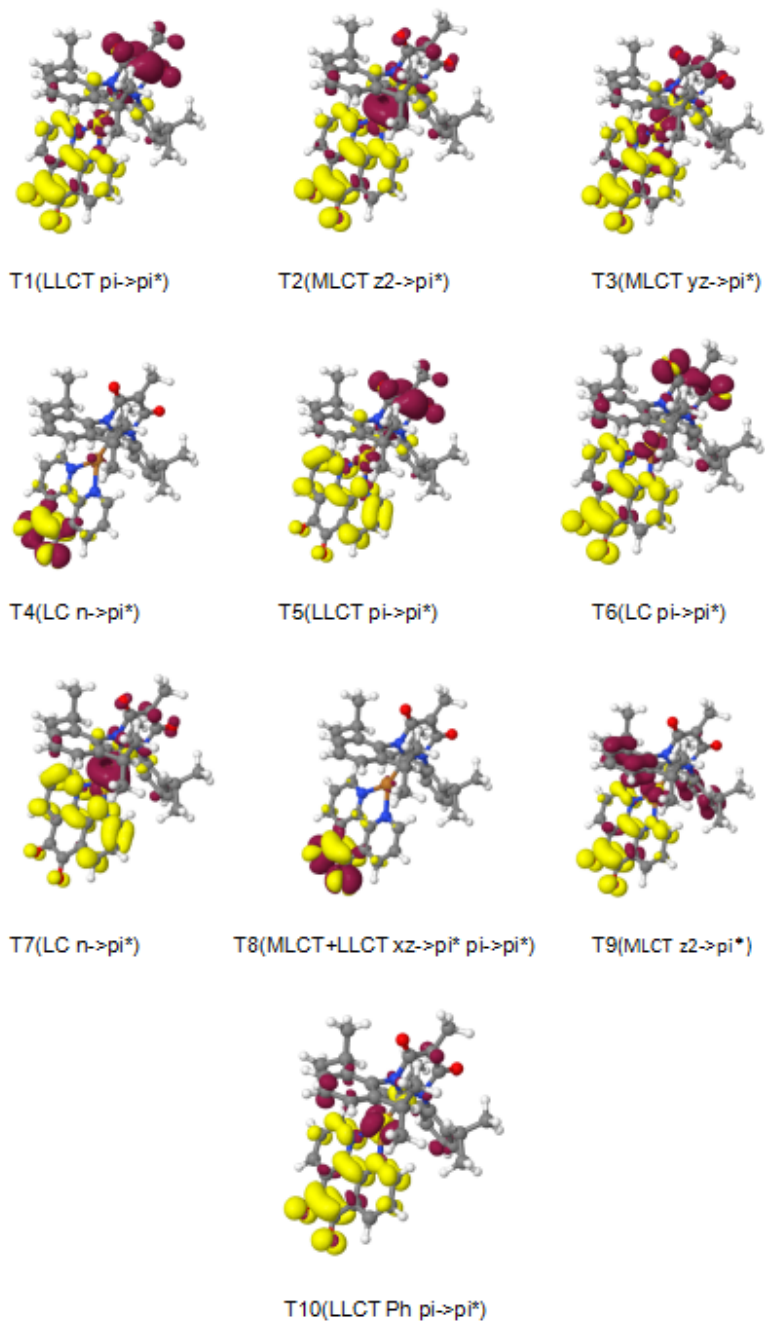


Abbildung 36: Differenzdichten an der orthogonalen T_{LLCT} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Triplet angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.

Singulett(S1-S10):

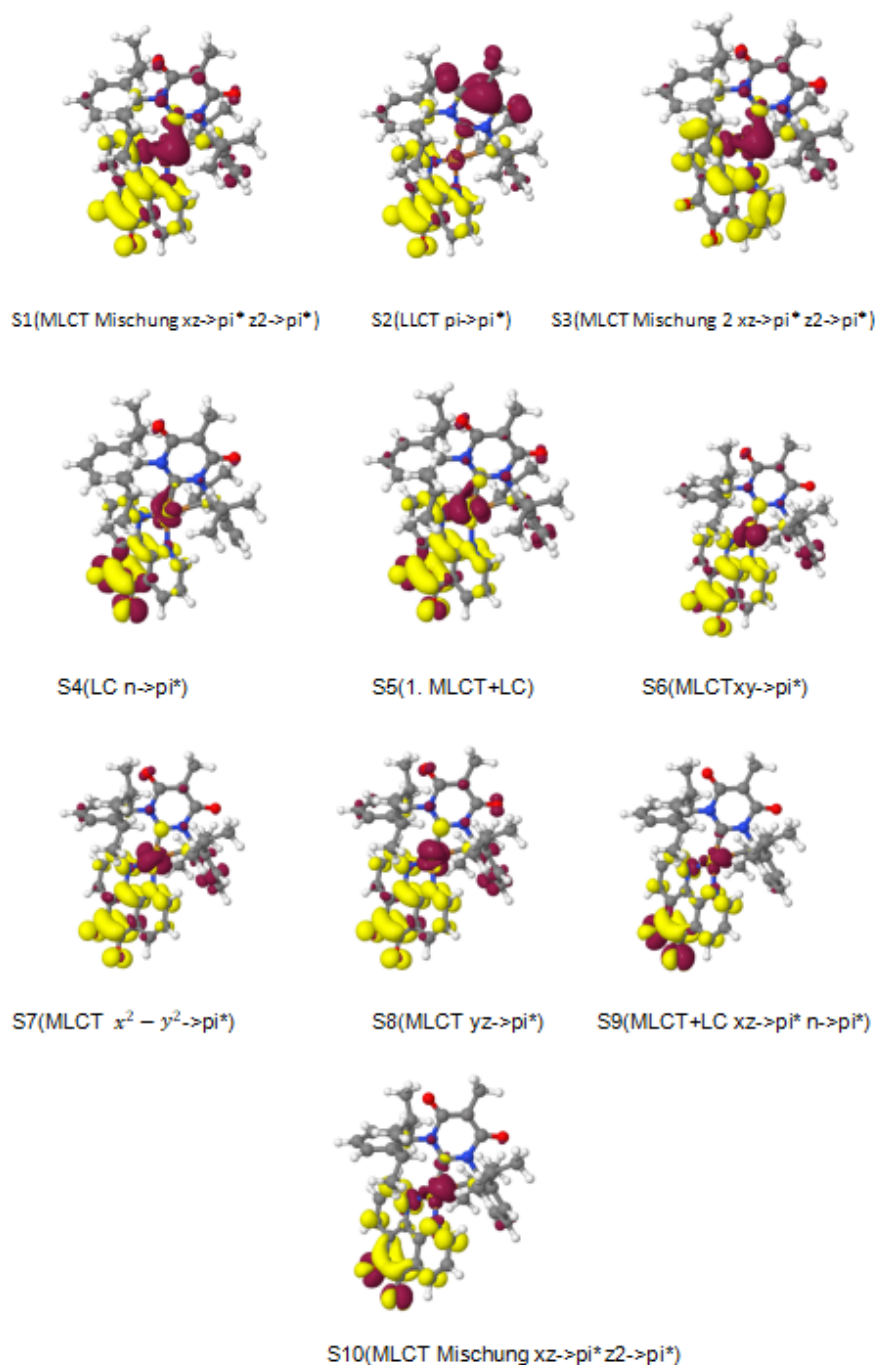
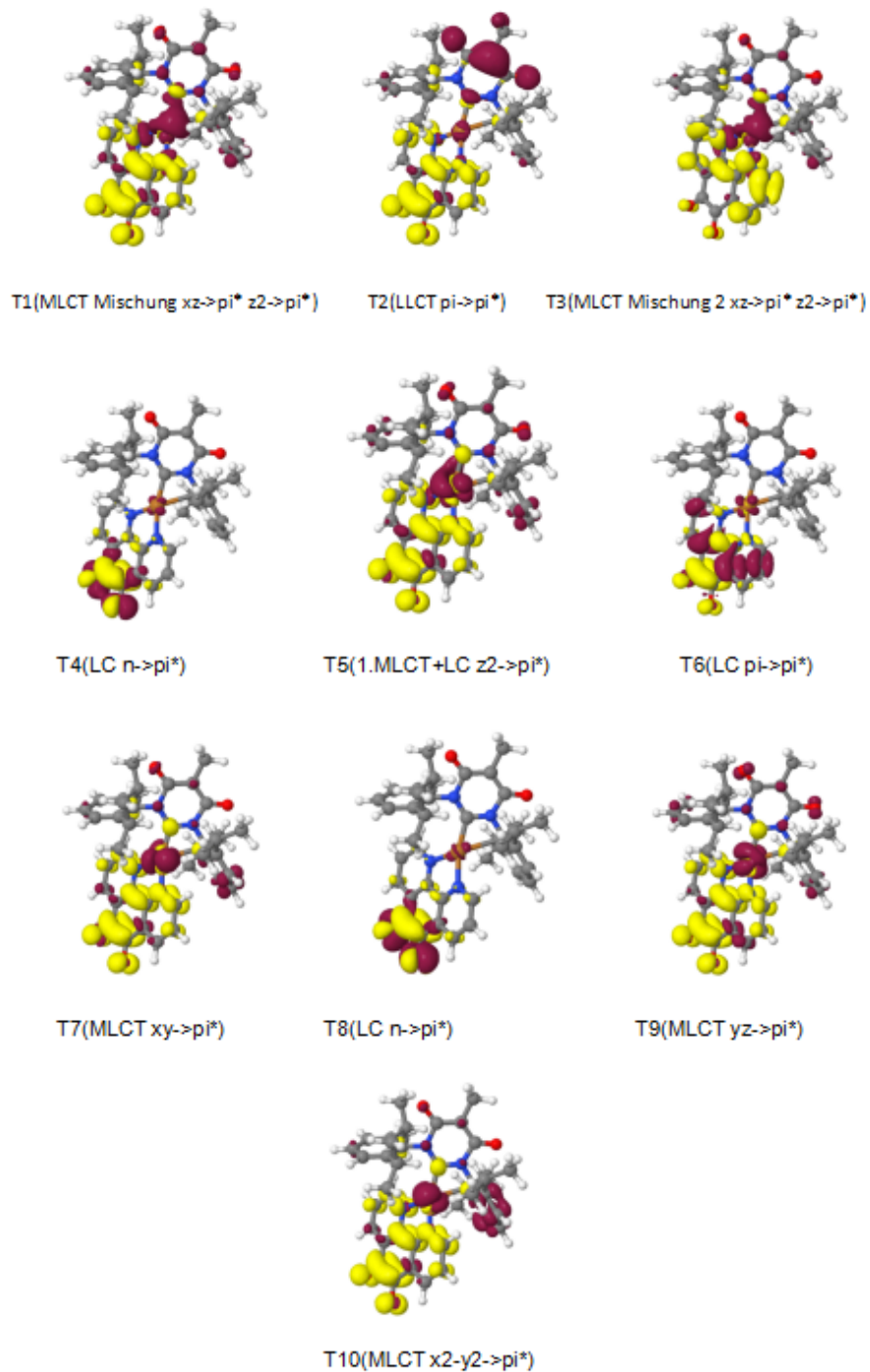


Abbildung 37: Differenzdichten an der planaren S_{MLCT1} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Singulett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.¹¹³

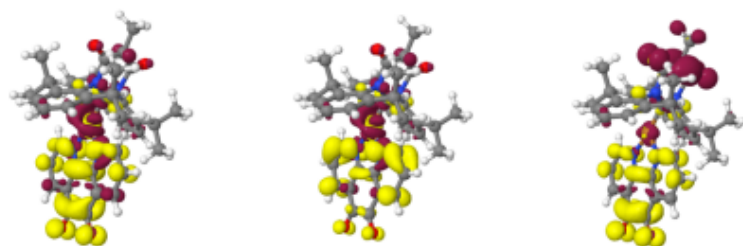
Triplet(T1-T10):



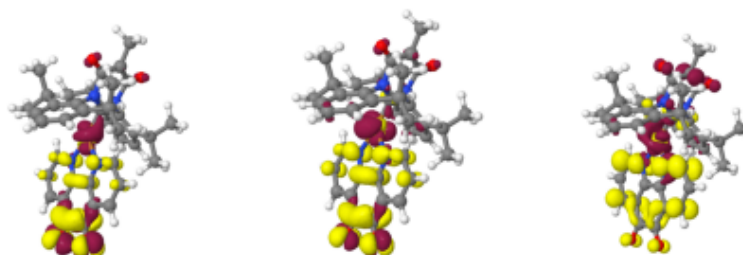
1

Abbildung 38: Differenzdichten an der planaren S_{MLCT_1} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Triplet angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.

Singulett(S1-S10):



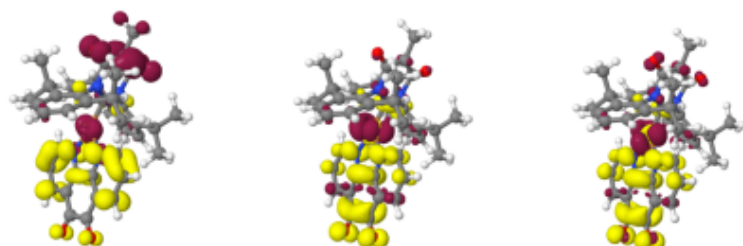
S1(MLCT Mischung yz->pi* z2->pi*) S2(MLCT Mischung yz->pi* z2->pi*) S3(LLCT pi->pi*)



S4(LC n->pi*)

S5(LC+MLCT1 Mischung)

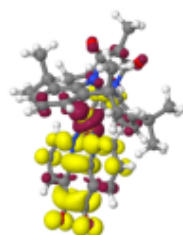
S6(MLCT Mischung yz->pi* z2->pi*)



S7(LLCT pi->pi*)

S8(MLCT xy->pi*)

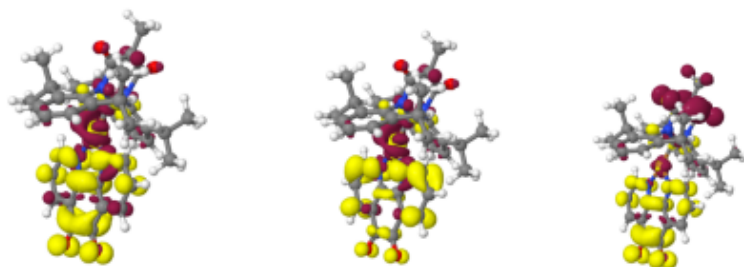
S9(MLCT2)



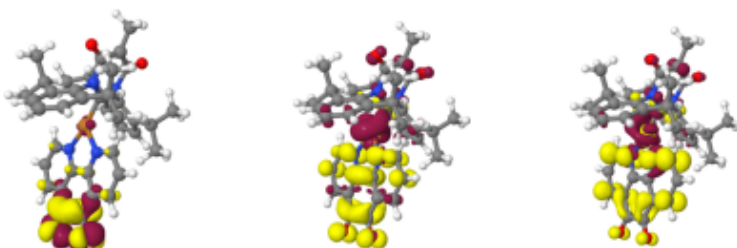
S10(MLCT3)

Abbildung 39: Differenzdichten an der orthogonalen S_{MLCT1} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Singulett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.

Triplett(T1-T10):



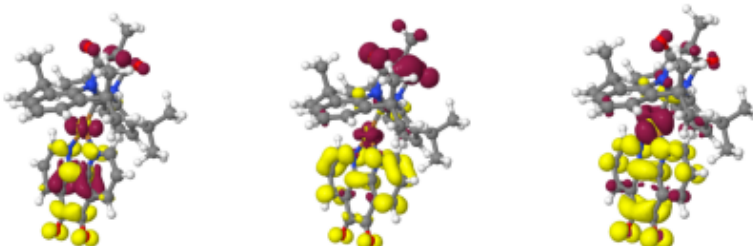
T1(MLCT Mischung yz->pi* z2->pi*) T2(MLCT Mischung yz->pi* z2->pi*) T3(LLCT pi->pi*)



T4(LC n->pi*)

T5(LC+MLCT1 Mischung)

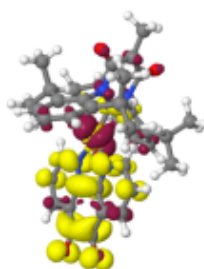
T6(MLCT Mischung yz->pi* z2->pi*)



T7(MLCT+LC+LLCT)

T8(LLCT pi->pi*)

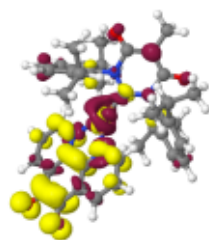
T9(MLCT2)



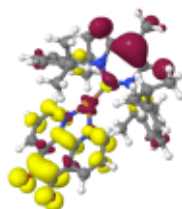
T10(MLCT3)

Abbildung 40: Differenzdichten an der orthogonalen S_{MLCT1} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Triplett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.

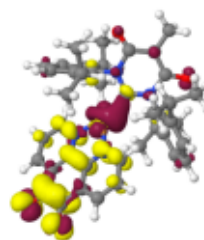
Singulett(S1-S10):



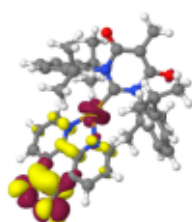
S1(MLCT Mischung $xz \rightarrow \pi^*$ $z2 \rightarrow \pi^*$)



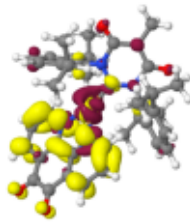
S2(LLCT $\pi i \rightarrow \pi^*$)



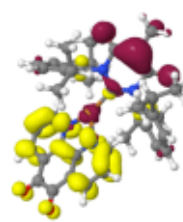
S3(2. MLCT+LC)



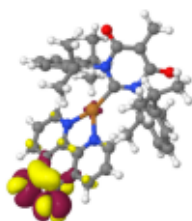
S4(LC $n \rightarrow \pi^*$)



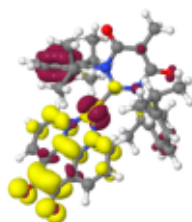
S5(MLCT Mischung 2 $xz \rightarrow \pi^*$ $z2 \rightarrow \pi^*$)



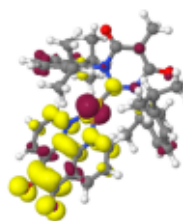
S6(LLCT $\pi i \rightarrow \pi^*$)



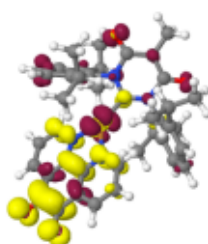
S7(LC $n \rightarrow \pi^*$)



S8(LLCT Ph $\pi i \rightarrow \pi^*$)



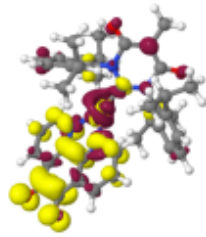
S9(MLCT $x2-y2 \rightarrow \pi^*$)



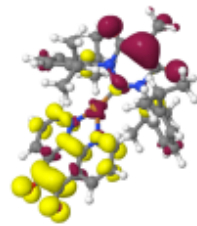
S10(MLCT $yz \rightarrow \pi^*$)

Abbildung 41: Differenzdichten an der planaren S_{MLCT2} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Singulett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.

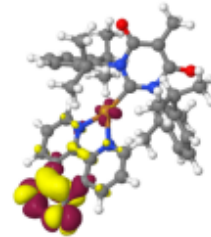
Triplett(T1-T10):



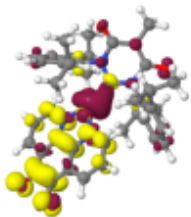
T1(MLCT Mischung xz->pi* z2->pi*)



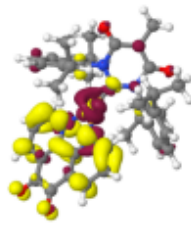
T2(LLCT pi->pi*)



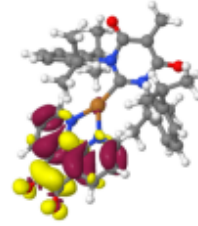
T3(LC n->pi*)



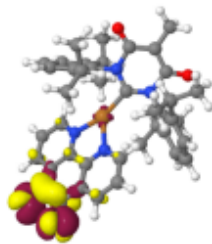
T4(2. MLCT+LC)



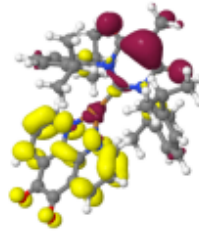
T5(MLCT Mischung 2 xz->pi* z2->pi*)



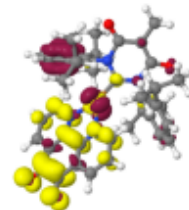
T6(LC pi->pi*)



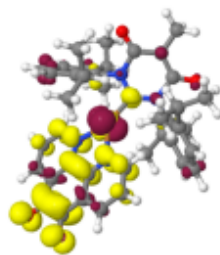
T7(LC n->pi*)



T8(LLCT pi->pi*)



T9(Ph pi->pi*)



T10(MLCT x2-y2 ->pi*)

Abbildung 42: Differenzdichten an der planaren S_{MLCT_2} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Triplett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.¹¹⁸

Triplet(T1-T10):

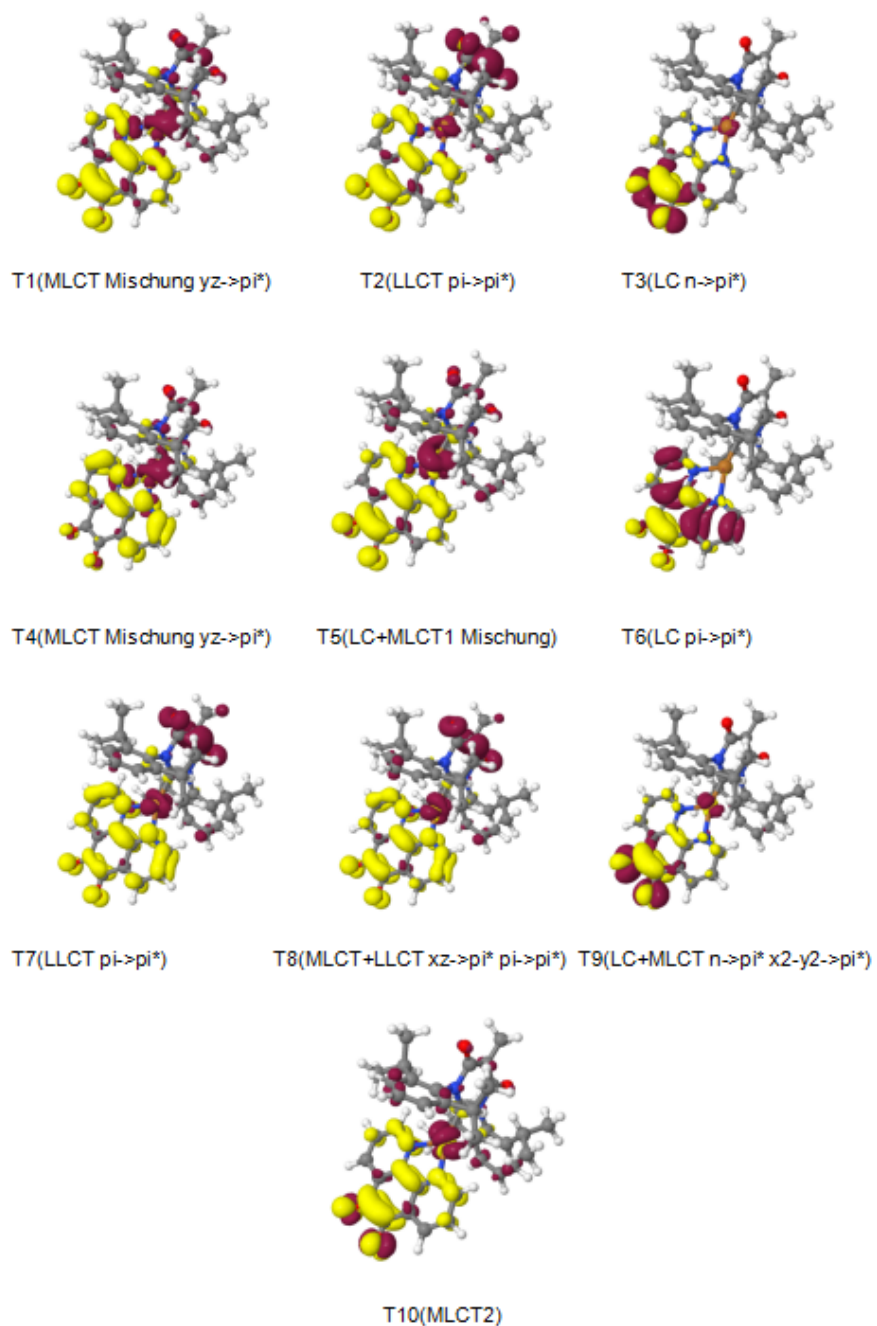


Abbildung 43: Differenzdichten an der orthogonalen S_{MLCT2} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Singulett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.

Triplett(T1-T10):

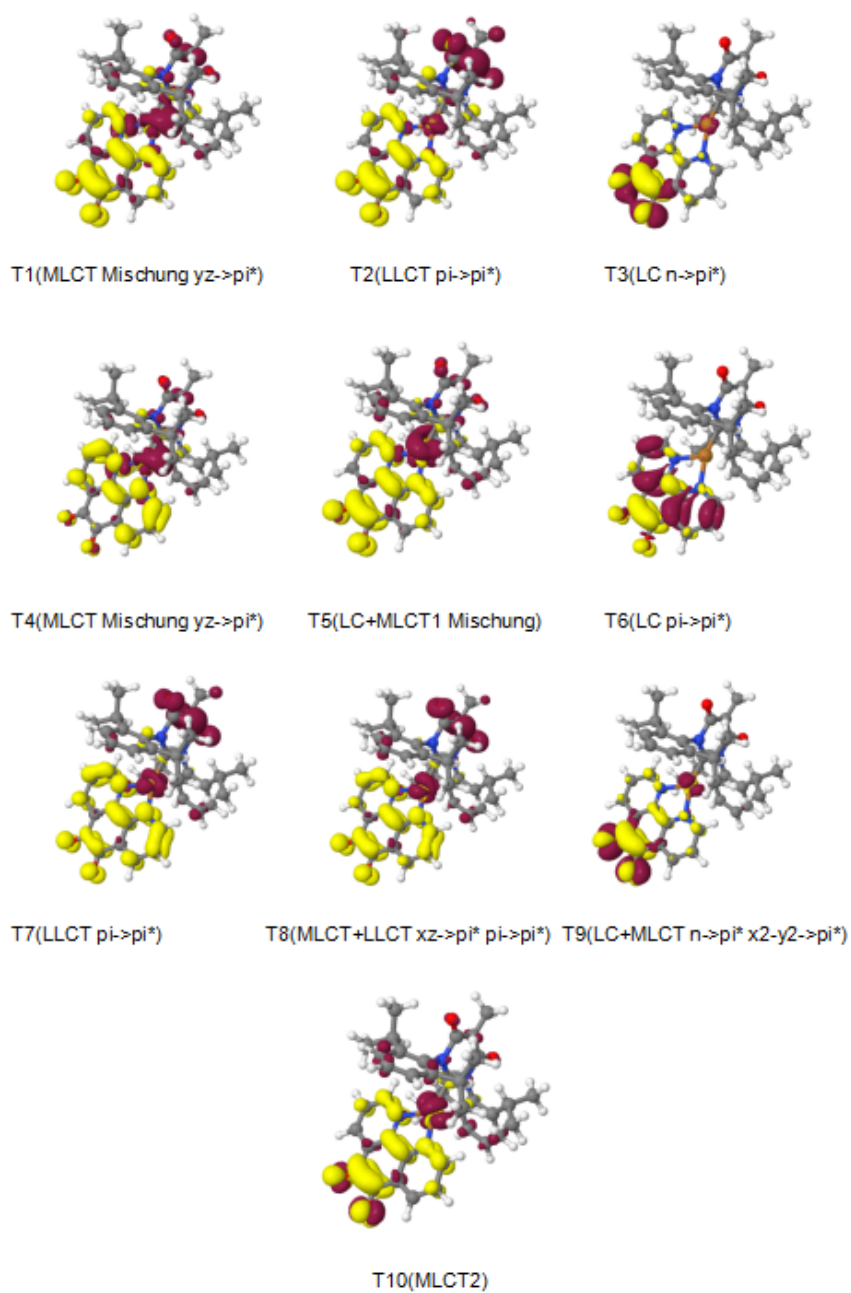
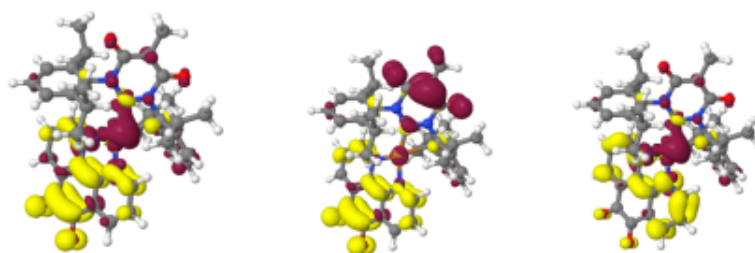
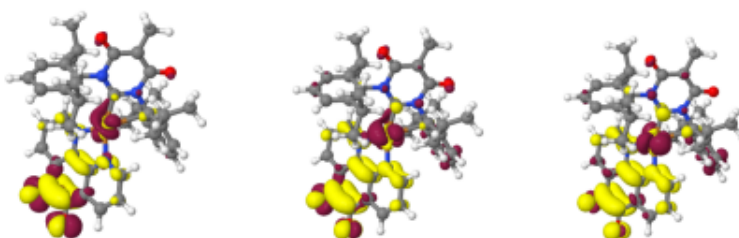


Abbildung 44: Differenzdichten an der orthogonalen S_{MLCT2} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Triplett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.

Singulett(S1-S10):



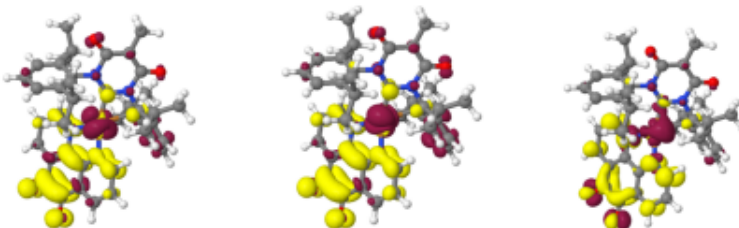
S1(MLCT_Mischung xz->pi* z2->pi*) S2(LLCT pi->pi*) S3(MLCT_Mischung2 xz->pi* z2->pi*)



S4(LC n->pi*)

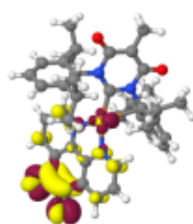
S5(1. MLCT+LC)

S6(MLCT xy ->pi*)



S7(MLCT x2-y2->pi*)

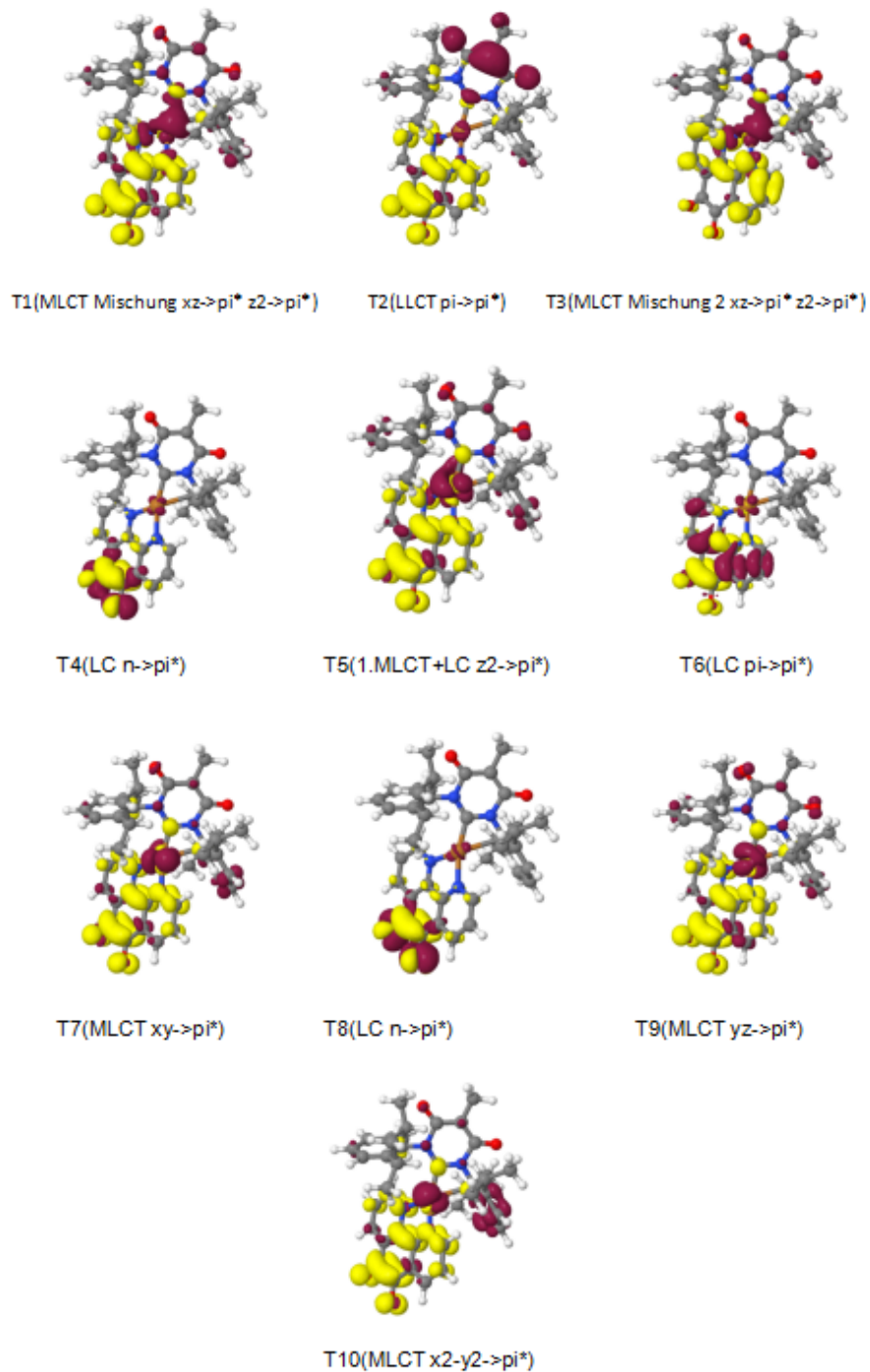
S8(MLCT yz->pi*) S9(MLCT_Mischung xz->pi* z2->pi*)



S10(MLCT+LC xz->pi* n->pi*)

Abbildung 45: Differenzdichten an der planaren T_{MLCT1} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Singulett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.

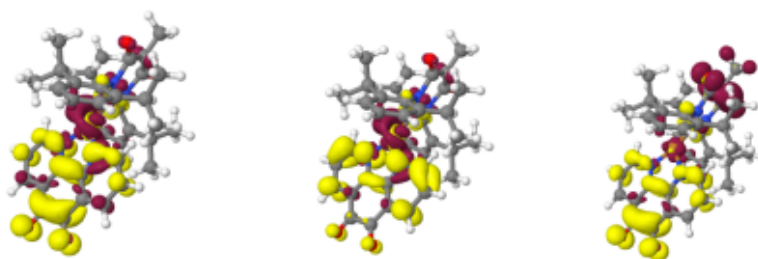
Triplet(T1-T10):



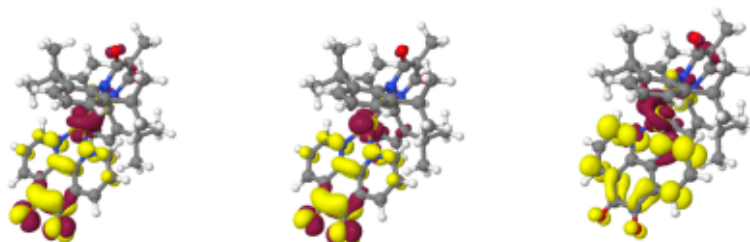
1

Abbildung 46: Differenzdichten an der planaren T_{MLCT1} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Triplet angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronendichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.

Singulett(S1-S10):



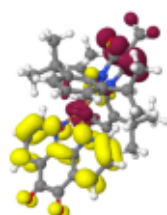
S1(MLCT Mischung yz->pi* z2->pi*) S2(MLCT Mischung yz->pi* z2->pi*) S3(LLCT pi->pi*)



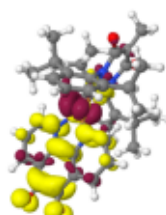
S4(LC n->pi*)

S5(LC+MLCT1 Mischung)

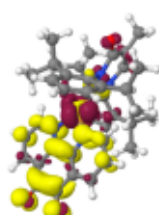
S6(MLCT Mischung yz->pi* z2->pi*)



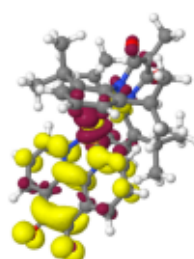
S7(LLCT pi->pi*)



S8(MLCT xy->pi*)



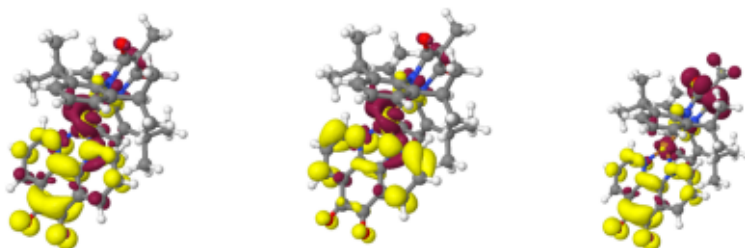
S9(MLCT2)



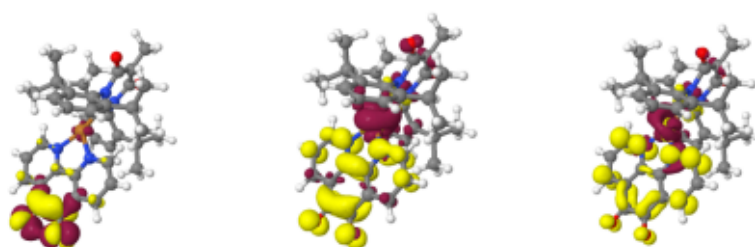
S10(MLCT x2-y2->pi*)

Abbildung 47: Differenzdichten an der orthogonalen T_{MLCT1} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Singulett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.

Triplett(T1-T10):

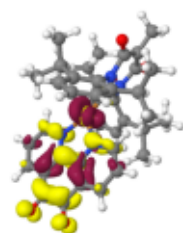


T1(MLCT Mischung yz->pi* z2->pi*) T2(MLCT Mischung yz->pi* z2->pi*) T3(LLCT pi->pi*)

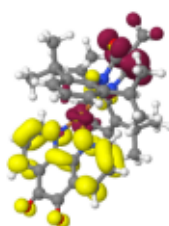


T4(LC n->pi*)

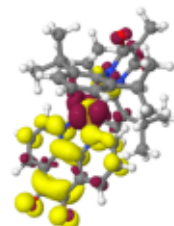
T5(MLCT1 Mischung) T6(MLCT Mischung yz->pi* z2->pi*)



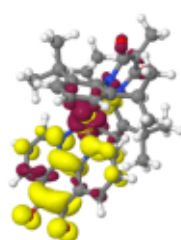
T7(MLCT+LC)



T8(LLCT pi->pi*)



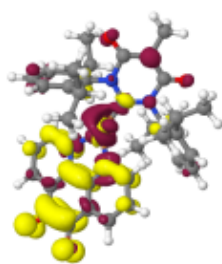
T9(MLCT2)



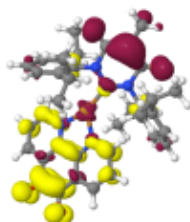
T10(MLCT3)

Abbildung 48: Differenzdichten an der orthogonalen T_{MLCT1} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Triplett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.

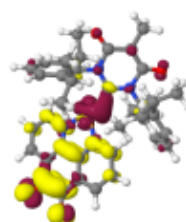
Singulett(S1-S10):



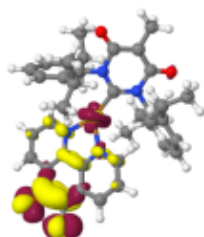
S1(MLCT Mischung xz->pi* z2->pi*)



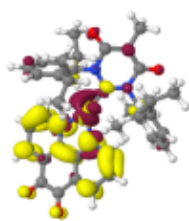
S2(LLCT pi->pi*)



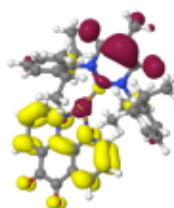
S3(2. MLCT+LC)



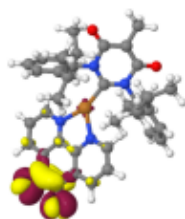
S4(LC n->pi*)



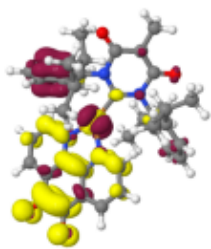
S5(MLCT Mischung xz->pi* z2->pi*)



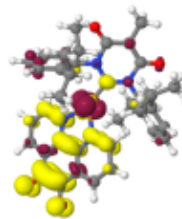
S6(LLCT pi->pi*)



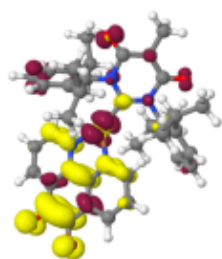
S7(LC n->pi*)



S8(LLCT Ph pi->pi*)



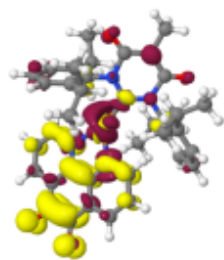
S9(MLCT x2-y2 ->pi*)



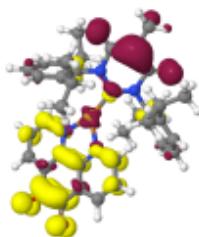
S10(MLCT yz->pi*)

Abbildung 49: Differenzdichten an der planaren T_{MLCT2} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Singulett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.

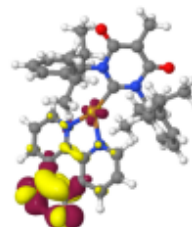
Triplet(T1-T10):



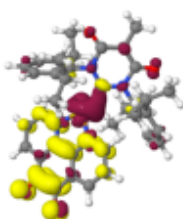
T1(MLCT Mischung xz->pi* z2->pi*)



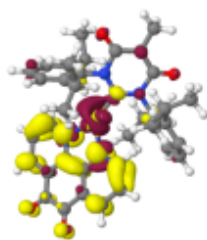
T2(LLCT pi->pi*)



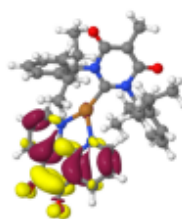
T3(LC n->pi*)



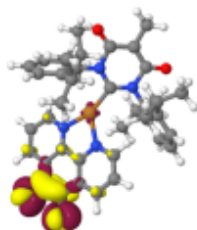
T3(2. MLCT+LC)



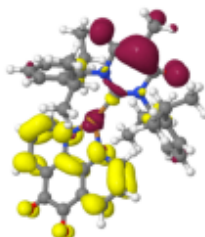
T5(MLCT Mischung xy->pi* z2->pi*)



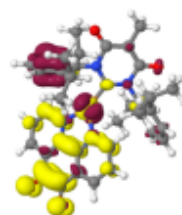
T6(LC pi->pi*)



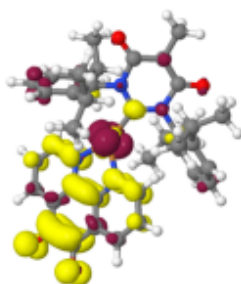
T7(LC n->pi*)



T8(LLCT pi->pi*)



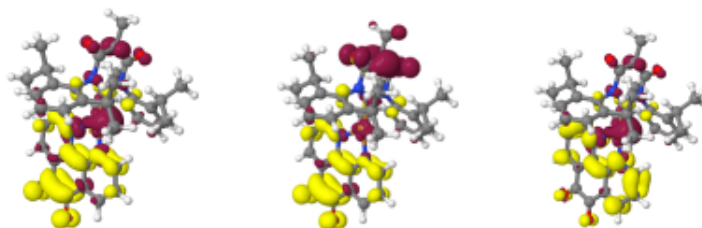
T9(LLCT Ph pi->pi*)



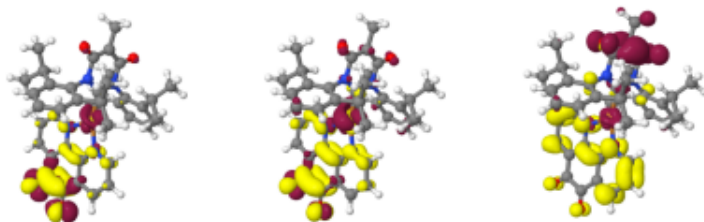
T10(MLCT x2-y2 ->pi*)

Abbildung 50: Differenzdichten an der planaren T_{MLCT2} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Triplet angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.¹²⁶

Singulett(S1-S10):



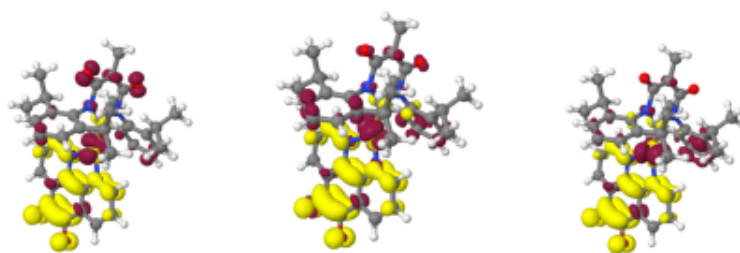
S1(MLCT Mischung yz->pi* z2->pi*) S2(LLCT pi->pi*) S3(MLCT Mischung yz->pi* z2->pi*)



S4(LC n->pi*)

S5(LC+MLCT1 Mischung)

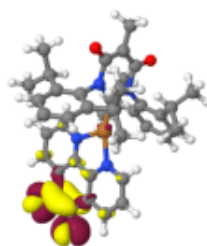
S6(LLCT pi->pi*)



S7(MLCT+LLCT xz->pi* pi->pi*)

S8(MLCT2)

S9(LLCT+MLCT Ph pi->pi* xy->pi*)



S10(LC n->pi*)

Abbildung 51: Differenzdichten an der orthogonalen T_{MLCT2} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Singulett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.

Triplett(T1-T10):

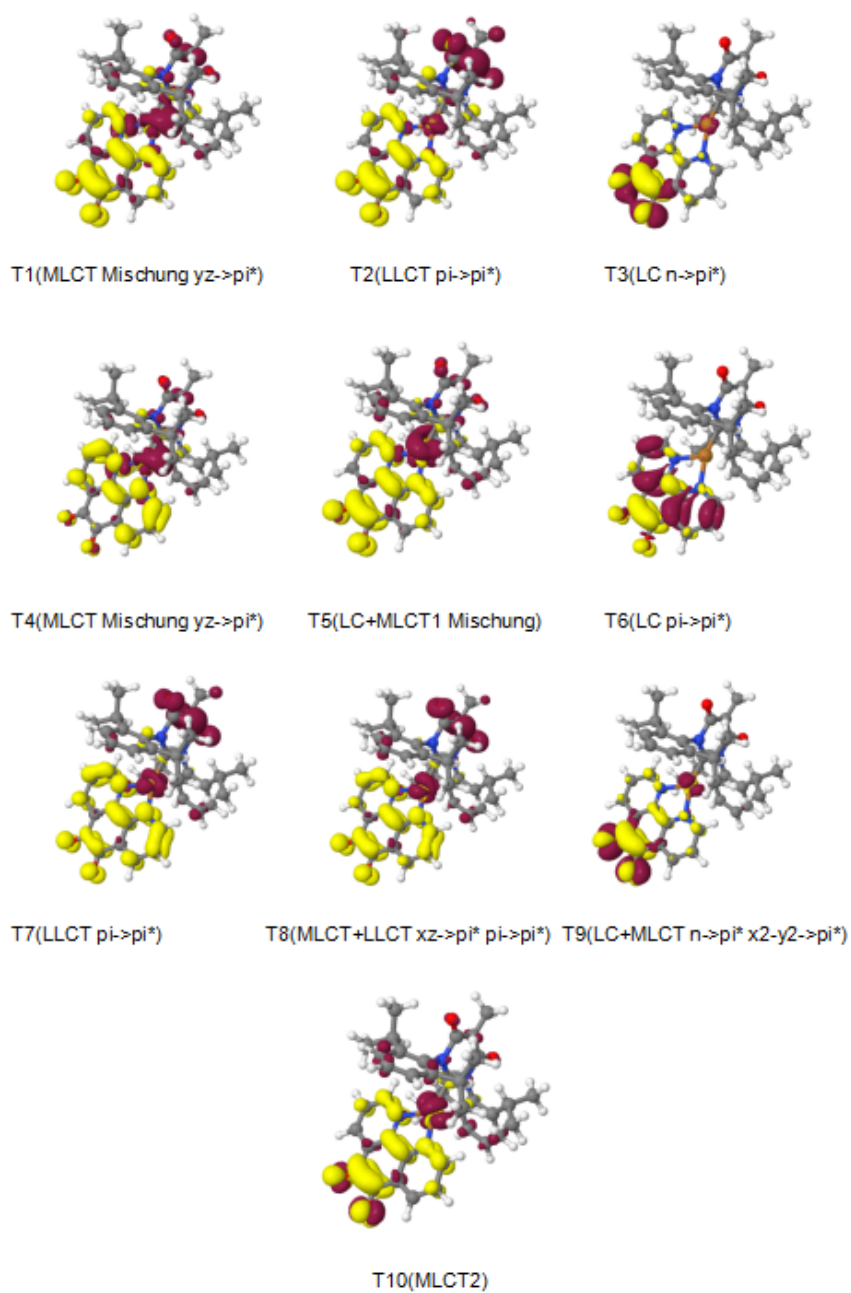
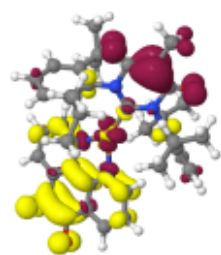
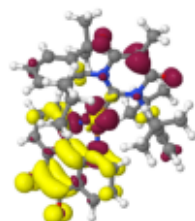


Abbildung 52: Differenzdichten an der orthogonalen T_{MLCT2} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Triplett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.

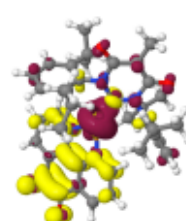
Singulett(S1-S10):



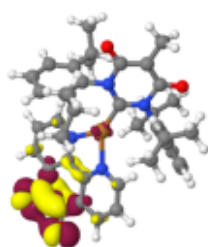
S1(LLCT pi->pi*)



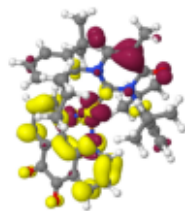
S2(MLCT xz->pi*)



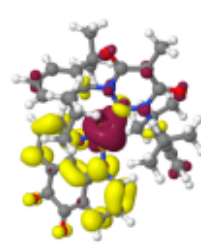
S3(MLCT z2->pi*)



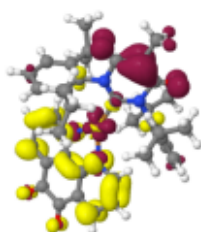
S4(LC n->pi*)



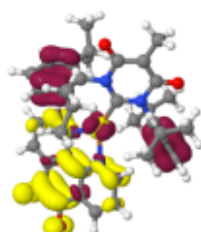
S5(LLCT+MLCT pi->pi* xz->pi*)



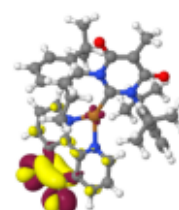
S6(MLCT z2->pi*)



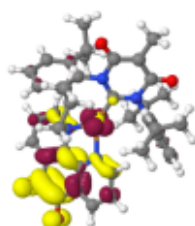
S7(LLCT pi->pi*)



S8(LLCT Ph pi->pi*)



S9(LC n->pi*)



S10(MLCT x2-y2 ->pi*)

Abbildung 53: Differenzdichten an der planaren T_{npi} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Singulett angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.

Triplet(T1-T10):

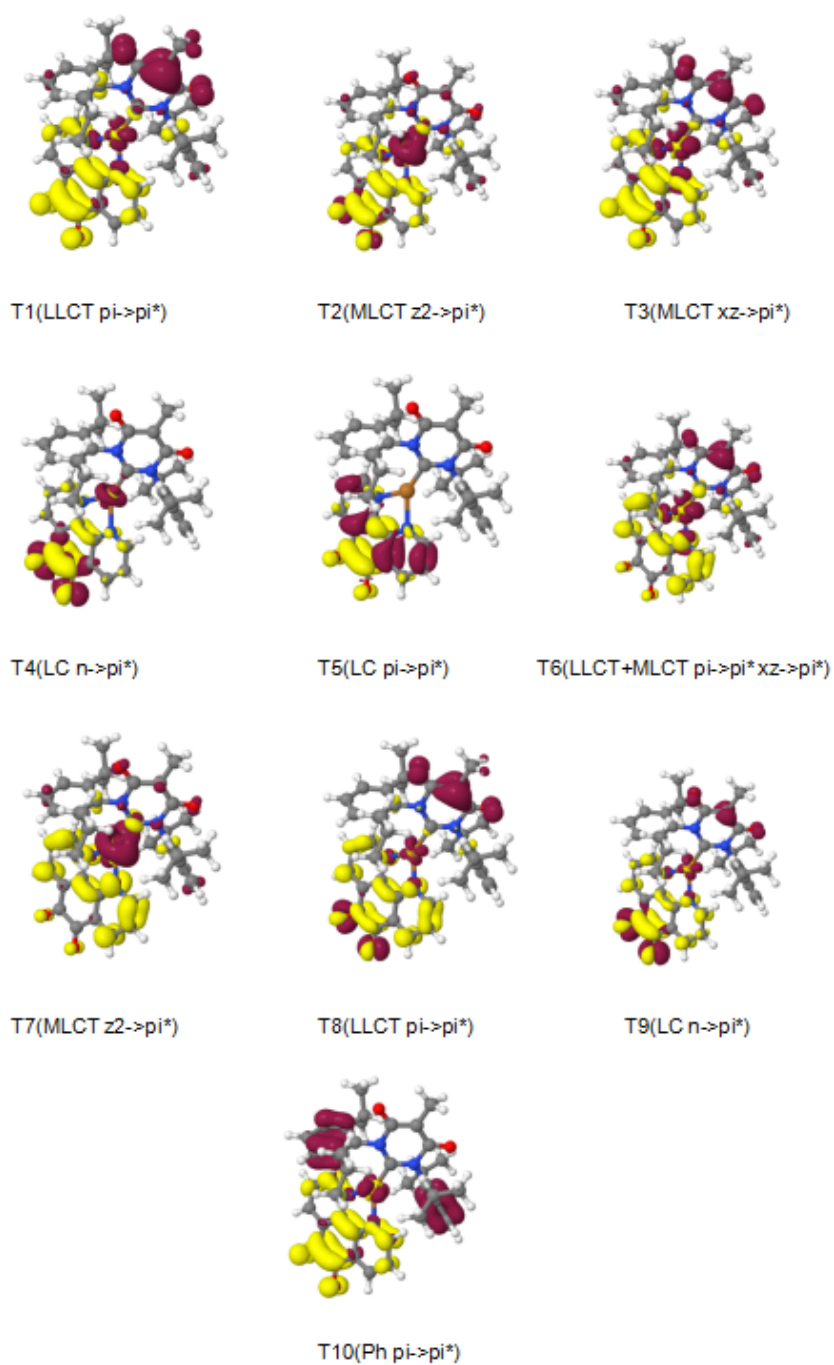


Abbildung 54: Differenzdichten an der planaren T_{npi} Zustandsgeometrie für die 10 energetisch niedrigsten Triplet angeregten Zustände (Isoflächen $\pm 0,001$). Ein Verlust von Elektronen dichte gegenüber dem Grundzustand wird durch rote Bereiche, ein Gewinn durch gelbe Bereiche gekennzeichnet.

Literatur

- [1] C. W. Tang and S. A. VanSlyke. Organic electroluminescent diodes. *Applied Physics Letters*, 51(12):913–915, 1987.
- [2] Joe Cox. LG reveals world’s first curved OLED TV for 2013, 1 2013.
- [3] Masashi Mamada, Ko Inada, Takeshi Komino, William J. Potscavage Jr., Hajime Nakanotani, and Chihaya Adachi. Highly efficient thermally activated delayed fluorescence from an excited-state intramolecular proton transfer system. *ACS Central Science*, 3(7):769–777, 2017.
- [4] Zhipeng Qiu, Wentao Xie, Zhiwen Yang, Ji-Hua Tan, Zhanxiang Yuan, Longjiang Xing, Shaomin Ji, Wen-Cheng Chen, Yanping Huo, and Shi jian Su. Nanosecond-time-scale delayed fluorescence towards fast triplet-singlet spin conversion for efficient orange-red oleds with negligible efficiency roll-off. *Chemical Engineering Journal*, 415:128949, 2021.
- [5] P. K. Samanta, D. Kim, V. Coropceanu, and J. L. Bredas. Up-conversion intersystem crossing rates in organic emitters for thermally activated delayed fluorescence: Impact of the nature of singlet vs triplet excited states. *Journal of the American Chemical Society*, 139:4042–4051, 2017.
- [6] J. L. Bredas, D. Beljonne, V. Coropceanu, and J. Cornil. Charge-transfer and energy-transfer processes in pi-conjugated oligomers and polymers: a molecular picture. *Chemical Reviews*, 104:4971–5003, 2004.
- [7] MA El-Sayed. Spin—orbit coupling and the radiationless processes in nitrogen heterocyclics. *The Journal of Chemical Physics*, 38(12):2834–2838, 1963.
- [8] M. Hopkinson, C. Richter, and M. Schedler et al. An overview of n-heterocyclic carbenes. *Nature*, 510:485–496, 2014.
- [9] Jasper Guhl. Photophysical properties of linear cu(i)-nhc complexes: A quantum chemical study. Masterarbeit, Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, 2021.
- [10] Nora Lüdtke, Jelena Föllner, and Christel M. Marian. Understanding the luminescence properties of cu(i) complexes: a quantum chemical perusal. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 22:23530–23544, 2020.
- [11] P Schmeinck, D Sretenovic, J Guhl, R Kühnemuth, CAM Seidel, CM Marian, et al. Luminescent copper(i)-complexes with an anionic nhc obtained via a coordination polymer as versatile precursor. *ChemRxiv*, 2023.

- [12] Zhiyong Yang, Zhu Mao, Zongliang Xie, Yi Zhang, Siwei Liu, Juan Zhao, Jiarui Xu, Zhenguo Chi, and Matthew P. Aldred. Recent advances in organic thermally activated delayed fluorescence materials. *Chem. Soc. Rev.*, 46:915–1016, 2017.
- [13] Oliver Weingart. *Angewandte Quantenchemie: Molekülspezifikation und Geometrieoptimierung*, 2022. Vorlesungsskript, Heinrich-Heine Universität Düsseldorf, Institut für Theoretische Chemie und Computerchemie.
- [14] Hartmut Stadie and Christian Autermann. *Numerische Methoden und Algorithmen in der Physik*, 2008. Vorlesungsskript, Universität Hamburg.
- [15] Christel Marian, Oliver Weingart, and Tu Viet Chu. *Praktikumsskript Angewandte Quantenchemie und Computerchemie (AnQCCC)*, 2022. Heinrich-Heine Universität Düsseldorf, Institut für Theoretische Chemie und Computerchemie.
- [16] Bernd Hartke. *Einführung in die Computerchemie*, 2 edition, 2016. Vorlesungsskript, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Institut für Physikalische Chemie.
- [17] Jurg Hutter. Dichtefunktionaltheorie. Physikalisch Chemisches Institut, Universität Zürich, 5 2004. Vorlesungsskript.
- [18] John F. Stanton. A chemist’s guide to density functional theory by wolfram koch (german chemical society, frankfurt am main) and max c. holthausen (humbolt university berlin). wiley-vch: weinheim. 2000. xiv + 294 pp. \$79.95. isbn 3-527-29918-1. *Journal of the American Chemical Society*, 123(11):2701–2701, 2001.
- [19] Oliver Weingart. *Angewandte Quantenchemie und Dichtefunktionaltheorie*, 2022. Vorlesungsskript, Heinrich-Heine Universität Düsseldorf, Institut für Theoretische Chemie und Computerchemie.
- [20] L. H. Thomas. The calculation of atomic fields. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 23:542 – 548, 1927.
- [21] W. Kohn and L. J. Sham. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*, 140(4A):A1133–A1138, 1965.
- [22] Benedetta Mennucci. Polarizable continuum model. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, 2(3):386–404, 2012.

- [23] Andreas Klamt. Conductor-like screening model for real solvents: a new approach to the quantitative calculation of solvation phenomena. *The Journal of Physical Chemistry*, 99(7):2224–2235, 1995.
- [24] Oliver Weingart. *Angewandte Quantenchemie und Dichtefunktionaltheorie*, 2022. Vorlesungsskript, Heinrich-Heine Universität Düsseldorf, Institut für Theoretische Chemie und Computerchemie.
- [25] Stefan Grimme; Mirko Waletzke. A combination of kohn–sham density functional theory and multi-reference configuration interaction methods. *The Journal of Chemical Physics*, 111(13):5645–5655, 1999.
- [26] Florian Andreas Bischoff. *Explizit korrelierte quasirelativistische Wellenfunktionen*. Bantam, London, 2009. Universitätsverlag Karlsruhe, Dissertation, Universität Karlsruhe (TH), Fakultät für Chemie und Biowissenschaften, ISBN: 978-3-86644-399-0.
- [27] *Pseudopotentials of the Stuttgart/Cologne group*, 2014. Introduction, Institute for Theoretical Chemistry, University of Cologne.
- [28] Marcus D. Hanwell, Donald E. Curtis, David C. Lonie, Tim Vandermeersch, Eva Zurek, and Geoffrey R. Hutchison. Avogadro: an advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform. *Journal of Cheminformatics*, 4(1):17, 2012.
- [29] Chemcraft - graphical software for visualization of quantum chemistry computations. <https://www.chemcraftprog.com/description.html>, 2020. Version 1.8, build 682. <https://www.chemcraftprog.com>.
- [30] M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, X. Li, M. Caricato, A. V. Marenich, J. Bloino, B. G. Janesko, R. Gomperts, B. Mennucci, H. P. Hratchian, J. V. Ortiz, A. F. Izmaylov, J. L. Sonnenberg, D. Williams-Young, F. Ding, F. Lipparini, F. Egidi, J. Goings, B. Peng, A. Petrone, T. Henderson, D. Ranasinghe, V. G. Zakrzewski, J. Gao, N. Rega, G. Zheng, W. Liang, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, K. Throssell, J. A. Montgomery, Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. J. Bearpark, J. J. Heyd, E. N. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, T. A. Keith, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. P. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, J. M. Millam, M. Klene, C. Adamo, R. Cammi, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, O. Farkas, J. B. Foresman, and D. J. Fox. Gaussian~16 Revision C.01, 2016. Gaussian Inc. Wallingford CT.

- [31] Daniel Escudero, Adèle D. Laurent, and Denis Jacquemin. *Time-Dependent Density Functional Theory: A Tool to Explore Excited States*, pages 1–35. Springer Netherlands, Dordrecht, 2016.
- [32] Romain Schira and Camille Latouche. Dft vs. tddft vs. tda to simulate phosphorescence spectra of pt- and ir-based complexes. *Dalton Transactions*, 50(2):746–753, 2021.
- [33] Sree Ganesh Balasubramani, Guo P Chen, Sonia Coriani, Michael Diedenhofen, Marius S Frank, Yannick J Franzke, Philipp Furche, Robin Grotjahn, Michael E Harding, Christof Hättig, et al. Turbomole: Modular program suite for ab initio quantum-chemical and condensed-matter simulations. *The Journal of chemical physics*, 152(18), 2020.
- [34] C. Lee, W.T. Yang, and R.G. Parr. Development of the colle-salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density. *Physical Review B*, 37:785–789, 1988.
- [35] Basis sets. <https://gaussian.com/basissets/>, 2021. Last updated on: 17 May 2021. [G16 Rev. C.01].
- [36] D. Figgen, G. Rauhut, M. Dolg, and H. Stoll. Energy-consistent pseudopotentials for group 11 and 12 atoms: adjustment to multi-configuration dirac–hartree–fock data. *Chemical Physics*, 311(1-2):227–244, 2005.
- [37] Dennis R. Dombrowski, Timo Schulz, Martin Kleinschmidt, and Christel M. Marian. R2022: A dft/mrci ansatz with improved performance for double excitations. *J. Phys. Chem. A*, 127(8):2011–2025, 2023. Publication Date: February 17, 2023.
- [38] Jmol development team. Jmol. Version 14.6.4, 2016-10-07.
- [39] Theodore: A toolbox for a detailed and automated analysis of electronic excited state computations. *The Journal of chemical physics*, 152(8), 2020.