

Teilprojekt B8: **Twisted Intramolecular Charge Transfer (TICT)-Prozesse in Multichromophor- und Cluster-Systemen**

Teilprojektleiter: **Prof. Dr. Wolfgang Rettig**

Dienstanschrift: **Institut für Chemie der Humboldt-Univ. Berlin,
Physikalische und Theoretische Chemie
Bunsenstr. 1, D-10117 Berlin**

Kommunikation: Fax (+49 30) 2093-5574 und 2093-5553
Tel (+49 30) 2093-5585 (Sekr 2093-5552)
E-mail: rettig@chemie.hu-berlin.de
Internet: http://www.chemie.hu-berlin.de/physch/phys_ag/wr/index.html

Fachgebiet und
Arbeitsrichtung: **Physikalische Chemie; Photochemische Reaktionen,
zeitaufgelöste Fluoreszenzspektroskopie, intramolekulare
Ladungstransferzustände**

Keywords: **Physical Chemistry; photochemical reactions, time-resolved
fluorescence, intramolecular charge transfer states**

Summary of results in the period 1995 - 1998

Intramolecular clusters in derivatives of dimethylaminobenzonitrile (DMABN):

According to one of the rivalling theories which is still discussed today, the dual fluorescence of DMABN derives from a 1:1 exciplex of the solute with a polar solvent molecule (see /1/ for a survey of various theories). This mechanistic hypothesis has been tested recently by gas phase experiments in supersonic jets, where such clusters are formed, but higher clusters are also present. An analysis of the cluster composition is possible using mass-selective techniques. It could be shown that, depending on the complexing solvent molecule, a single partner (e.g. acetonitrile) is sufficient, or several partners are necessary (e.g. water) to induce a charge transfer process /2/. However, these cluster-forming jet techniques are not suited to compare the same clusters in solution. The project tries a new approach in this respect by the synthesis of chemically bridged intramolecular clusters on the basis of ester derivatives of DMABN. By this way, the 1:1 complexes thus formed can be studied both in the jet and in solution, and the results can be compared.

The results (for details see below) support the view that intramolecular 1:1 clusters can be observed both in the jet and in solution, identified by their slightly different properties such as a redshift of the absorption in the jet and of the CT fluorescence in solution. This can be

understood as the result of a complexation at the carbonyl group of the ester which increases the acceptor strength. Nevertheless, no second fluorescence band can be observed in the gas phase, as would be expected if the excimer model was valid. On the other hand, a charge transfer component is seen in nonpolar solution, in contrast to the ester derivative without intramolecular complex formation. This result clearly points to the validity of a non-specific model such as that of Twisted Intramolecular Charge Transfer (TICT) /1/ states where bulk polarizability and not specific complexation is the important factor.

Resonant photoprocesses in N-(9-anthryl)-carbazole (C9A): It has been concluded from earlier investigations in solution /3/ and in the supersonic jet /4/ that C9A forms a charge transfer state in both conditions. This happens in solution in a few picoseconds /5/ whereas the observed time scale in the jet is a few nanoseconds, i.e. thousandfold slower /4/. Moreover, a "resonance behaviour" is observed in the jet, i.e. the photoreaction slows down if the excess energy exceeds a certain limit. This unusual behaviour has been modelled by quantum dynamical calculations on a femtosecond timescale in project C5 (J. Manz) /6,7/. According to this modelling, the photoreaction occurs in the picosecond range, and the corresponding wavepacket travels very often within the nanosecond lifetime between the two relevant states, a locally excited (LE) and a charge transfer (CT) state.

The resonant photoreaction could recently be reassessed using a new technique, the cavity-ring-down spectroscopy which allowed a quantification of the fluorescence losses and a characterisation of the mode-selectivity of the reaction (for details see below).

Übersicht über Ergebnisse aus den Jahren 1995 - 98

Intramolekulare Cluster in Derivaten von Dimethylaminobenzonitril: Die duale Fluoreszenz von Dimethylaminobenzonitril stammt nach einer der heute noch rivalisierenden Theorien aus einem 1:1 Exziplek mit dem polaren Lösungsmittel (siehe /1/ für eine Übersicht der Theorien). Diese mechanistische Hypothese wurde bis heute in vielen Düsenstrahlexperimenten in der Gasphase überprüft, wobei oftmals Schwierigkeiten in der Zuordnung der Clustergößen auftauchten. Diese konnten teilweise unter Einsatz von massenauflösenden Techniken behoben werden. Es zeigte sich, daß je nach komplexierendem Lösungsmittel-Molekül ein einziger Partner (z.B. bei Acetonitril) oder erst eine größere Anzahl

(z.B. bei Wasser) ausreichen, um den Ladungstransfer zu erzeugen /2/. Die Jet-Techniken sind in dieser Form jedoch nicht geeignet, um den Vergleich mit entsprechenden Clustern in Lösung zu machen. Das Projekt versuchte, hier mit chemisch verbrückten intramolekularen Clustern auf der Basis von Ester-Derivaten einen neuen Weg zu gehen: Damit lassen sich auch 1:1 Komplexe in Lösung untersuchen und mit den Ergebnissen im Düsenstrahl vergleichen.

Die Resultate (siehe unten detailliert) sprechen dafür, daß sich sowohl unter Düsenstrahlbedingungen als auch in Lösung intramolekulare 1:1 Cluster bilden, die leicht veränderte Eigenschaften haben. Das zeigt sich zum Beispiel in einer leichten Rotverschiebung der Absorption im Jet sowie der Charge-Transfer Fluoreszenz in Lösung. Daraus kann man schließen, daß die Komplexierung an der Carbonylgruppe des Esters dessen Akzeptorstärke erhöht. Trotzdem wird in der Gasphase keine zweite Fluoreszenzbande beobachtet, wie sie bei Gültigkeit der Exciplex-Theorie zu erwarten wäre. Dagegen tritt in unpolaren Alkanen eine schwache Charge-Transfer Fluoreszenz auf, was auf die Polarisierbarkeit des Mediums zurückzuführen ist. Beide Befunde sprechen für die Gültigkeit eines nicht-spezifischen Mechanismus, wie er im Modell der Twisted Intramolecular Charge Transfer (TICT) Zustände /1/ postuliert wurde.

Resonante Photoprozesse in N-(9-Anthryl)-Carbazol: Aus früheren Untersuchungen von N-(9-Anthryl)-Carbazol (C9A) sowohl in Lösung /3/ als auch im Düsenstrahl /4/ geht hervor, daß dieses Molekül unter beiden Bedingungen einen Charge Transfer Zustand ausbildet. In Lösung geschieht das hocheffizient innerhalb weniger Picosekunden /5/, während die beobachteten Reaktionszeiten im Düsenstrahl einige Nanosekunden betragen, also ca tausendmal langsamer sind /4/. Überdies wird im Düsenstrahl ein "Resonanzverhalten" beobachtet, d.h. bei erhöhter Überschußenergie tritt die Photoreaktion wieder in den Hintergrund. Dieses Verhalten wurde durch quantendynamische Modellierung mit Femtosekunden Zeitauflösung im TP C5 (AG Manz) simuliert und die Spektren befriedigend wiedergegeben /6,7/. Danach geschieht die Photoreaktion im Pikosekunden-Bereich, und das entsprechende Wellenpaket wechselt innerhalb der Nanosekunden Lebensdauer viele Male zwischen den zwei beteiligten Zuständen, einem lokal angeregten (LE) und einem Ladungstransferzustand (CT), hin und her. Die beobachtete Fluoreszenz-Lebensdauer wird

danach durch unterschiedlich starke Kopplung des LE- und CT-Zustands an IVR-Schwingungsfreiheitsgrade verkürzt.

Die quantendynamische Modellierung liefert auch das Absorptionsspektrum. Dieses konnte kürzlich unter Einsatz einer neuen Technik, der "Cavity-Ring-Down"-Spektroskopie, unabhängig überprüft werden. Damit läßt sich die resonante Photoreaktion weiter charakterisieren, z.B. hinsichtlich ihres modenselektiven Verhaltens (detaillierte Ergebnisse siehe weiter unten).

Einzelberichte aus dem letzten Berichtszeitraum (01.01.1995 - 31.12.1998)

1. Untersuchungen in der Gasphase und in Lösung intramolekularer Komplexe von Esterderivaten des DMABN

(B. Bliß, C. Monte, W. Rettig, Zusammenarbeit mit Universität Frankfurt (B. Brutschy))

Um ein besseres Verständnis über den Einfluß von Lösungsmittel-Komplexen auf die Elektronen Transfer Reaktion in

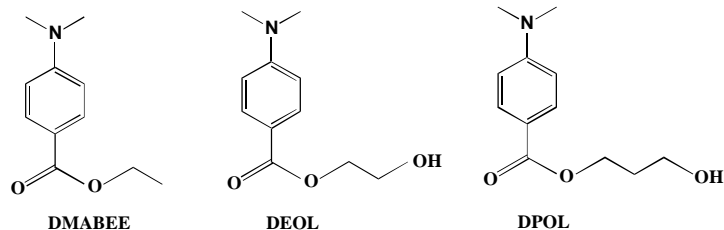


Abb. 1: Untersuchte Moleküle

Elektronen Transfer Reaktion in DMABN und seinen Derivaten zu bekommen [1], wurden im Rahmen des Projektes die neuen Verbindungen DEOL und DPOL synthetisiert und mit dem Ausgangsmolekül DMABEE

verglichen (Abb. 1). DEOL und DPOL besitzen die Möglichkeit, einen intramolekularen 1:1 Cluster mit einem alkoholischen Lösungsmittelmolekül zu simulieren [RDJ95]. So konnte hier gezielt in der Gasphase aber auch in verschiedenen Lösungsmitteln der Einfluß eines einzelnen komplexierenden Alkoholmoleküls an DMABEE untersucht werden.

1.1 Untersuchungen in der Gasphase

Abbildung 2 zeigt die Fluoreszenz Anregungsspektren der drei Moleküle im

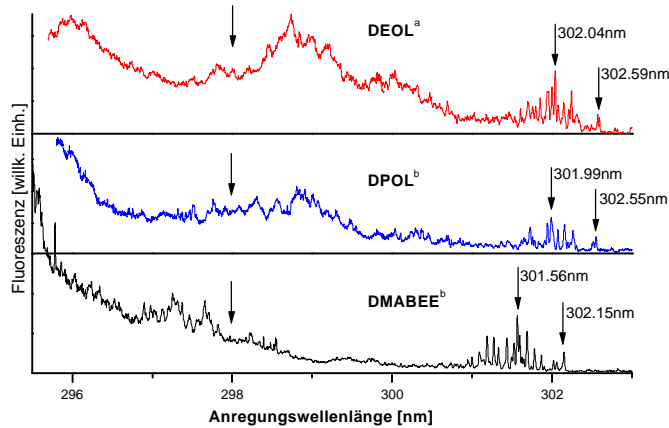


Abb. 2: Fluoreszenz Anregungsspektren von DEOL, DPOL und DMABEE im Überschalldüsenstrahl mit 5 bar Helium als Trägergas. a) Das DEOL-Spektrum wurde bei 307 nm aufgezeichnet und b) das von DPOL und DMABEE bei 309 nm.

Überschalldüsenstrahl. DEOL und DPOL zeigen in ihrem Ursprung eine Rotverschiebung gegenüber DMABEE von 48 cm^{-1} bzw. 43 cm^{-1} . Diese Rotverschiebung deutet darauf hin, daß sich im Jet wirklich intramolekulare Komplexe gebildet haben. Mit Hilfe von quantenchemischen Rechnungen (AM1) und dem Vergleich der IR-

Absorptionsbande der Carbonyl-Streckschwingung der drei Moleküle wurde ermittelt, daß die Strukturen dieser Komplexe eine Wasserstoffbrückenbindung vom OH zum Carbonyl-Sauerstoff aufweisen. Wie jedoch in den Spektren zu sehen ist, besteht der Ursprung nicht aus einer Einzelbande und auch das Schwingungsmuster ist recht komplex, worauf auf mehrere gleichzeitig vorhandene Konformere geschlossen werden kann. Die entsprechenden Fluoreszenzspektren, jeweils angeregt an den drei Wellenlängen, die in Abb. 2 mit Pfeilen gekennzeichnet sind, unterscheiden sich weder innerhalb eines Moleküls noch im Vergleich der drei Moleküle und weisen keine rotverschobene Fluoreszenzbande auf. Aus diesen Messungen kann geschlossen werden, daß zwar durch die H-Brücke die Akzeptorstärke erhöht wird, dieses aber noch nicht ausreicht, um in der Gasphase einen intramolekularen Ladungstransfer in den Molekülen zu induzieren, wie er in polarer Lösung erreicht wird.

1.2 Untersuchungen in der flüssigen Phase

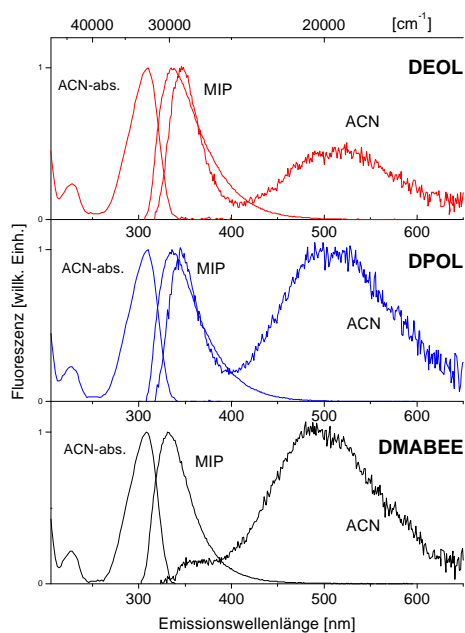


Abb. 3: Normierte Absorptions- und Fluoreszenzspektren von DEOL, DPOL und DMABEE in Acetonitril (ACN) und Methylcyclohexan/Isopentan 3:1 (MIP).

In Abb. 3 sind die Absorptions- und Fluoreszenzspektren der drei Moleküle in dem unpolaren Lösungsmittel MIP (Methylcyclohexan /Isopentan 3:1) und dem polaren ACN (Acetonitril) dargestellt. In ACN zeigen alle drei Moleküle eine zweite rote Ladungstransferbande, deren Maximum von DMABEE zu DEOL hin ins Rote verschoben ist. Dies weist auch hier auf eine Komplexbildung hin, die die Akzeptorstärke erhöht. In dem unpolaren MIP ist keine eindeutige zweite Bande zu erkennen, jedoch sind die Halbwertsbreiten der beiden komplexierten Moleküle etwas größer. (HWB: DMABEE = 3891 cm^{-1} , DPOL = 4346 cm^{-1} , DEOL = 4466 cm^{-1}). Dieses sowie die

Ergebnisse der zeitaufgelösten Messungen im unpolaren Lösungsmittel mit längeren Lebensdauern von DEOL und DPOL gegenüber DMABEE, zeigen an, daß durch die intramolekulare Komplexbildung in DEOL und DPOL auch im unpolaren Lösungsmittel MIP ein gewisser Anteil von Ladungstransfer-Fluoreszenz entsteht. Der unpolare Lösungsmittelkäfig der Alkans MIP wirkt also gegenüber der Gasphase bereits stark stabilisierend auf den Ladungstransferzustand.

In ACN ist noch ein markanter Unterschied der drei Fluoreszenzbanden zu erkennen: Die Quantenausbeute der LE-Bande nimmt von DMABEE zu DEOL hin zu, wogegen sie für die CT-Bande abnimmt. Dieses und die von DMABEE zu DEOL stark zunehmenden nichtstrahlenden Geschwindigkeitskonstanten deuten auf einen zusätzlichen nichtstrahlenden Desaktivierungskanal hin, der wahrscheinlich von der intramolekularen H-Brücke in den Komplexen herrührt.

2. Identifizierung von strahlungslosen modenselektiven Photoreaktionen im Molekularstrahl durch die Kombination von Fluoreszenzanregungs- und Cavity-Ring-Down Spektroskopie

(C. Monte, W. Rettig, Zusammenarbeit mit TP C5 (J. Manz) und mit der TU-Berlin (F. Evers, P. Zimmermann))

Am Molekül C9A (siehe Abb. 4) wurden bei fluoreszenzspektroskopischen Untersuchungen im Molekularstrahl in der Vergangenheit Hinweise auf eine strahlungslose Photoreaktion gefunden. Diese konnte durch einen Vergleich von Fluoreszenzanregungsspektren und die Bestimmung von Fluoreszenzabklingzeiten bei verschiedenen Anregungsenergien identifiziert werden. Quantenchemische Simulationen dieser Ergebnisse mit fs-Zeitauflösung (TP C5, Manz) konnten diese Photoreaktion durch eine resonante Kopplung mit einem zweiten schwach oder nicht emittierenden Zustand zurückführen.

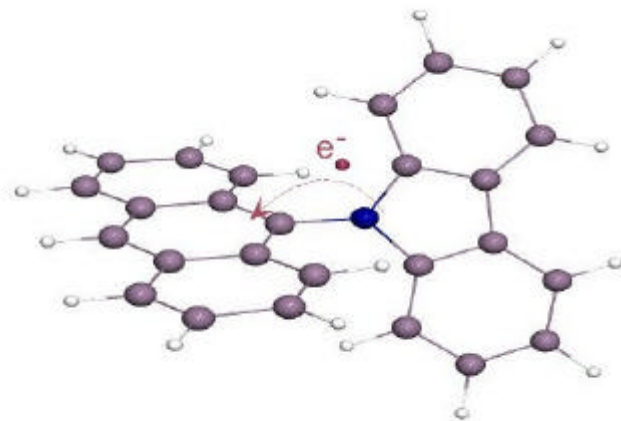


Abb. 4: Das Molekül 9-(N-Carbazolyl)-Anthracen C9A mit der schematisch ange deuteten Photoreaktion

Durch die in den letzten Jahren entwickelte Methode der Cavity-Ring-Down Spektroskopie ist es nun möglich geworden, im Molekularstrahl auch Absorptionsspektroskopie zu betreiben. Mit dem speziell bei uns realisierten Aufbau ist es möglich, gleichzeitig Absorptionsspektren nach dem Cavity-Ring-Down Verfahren und Fluoreszenzanregungsspektren zu bestimmen. Durch den Vergleich werden Änderungen in der Fluoreszenzquantenausbeute direkter zugänglich (Abb.5), und es konnte sogar die Modenselektivität dieser Photoreaktionen

eindeutig mit hoher energetischer Auflösung (0.2 cm^{-1}) identifiziert werden. Die gemessenen Ergebnisse bestätigen die Existenz der „resonanten“ strahlungslosen Photoreaktion beim C9A (vergl Abb. 5).

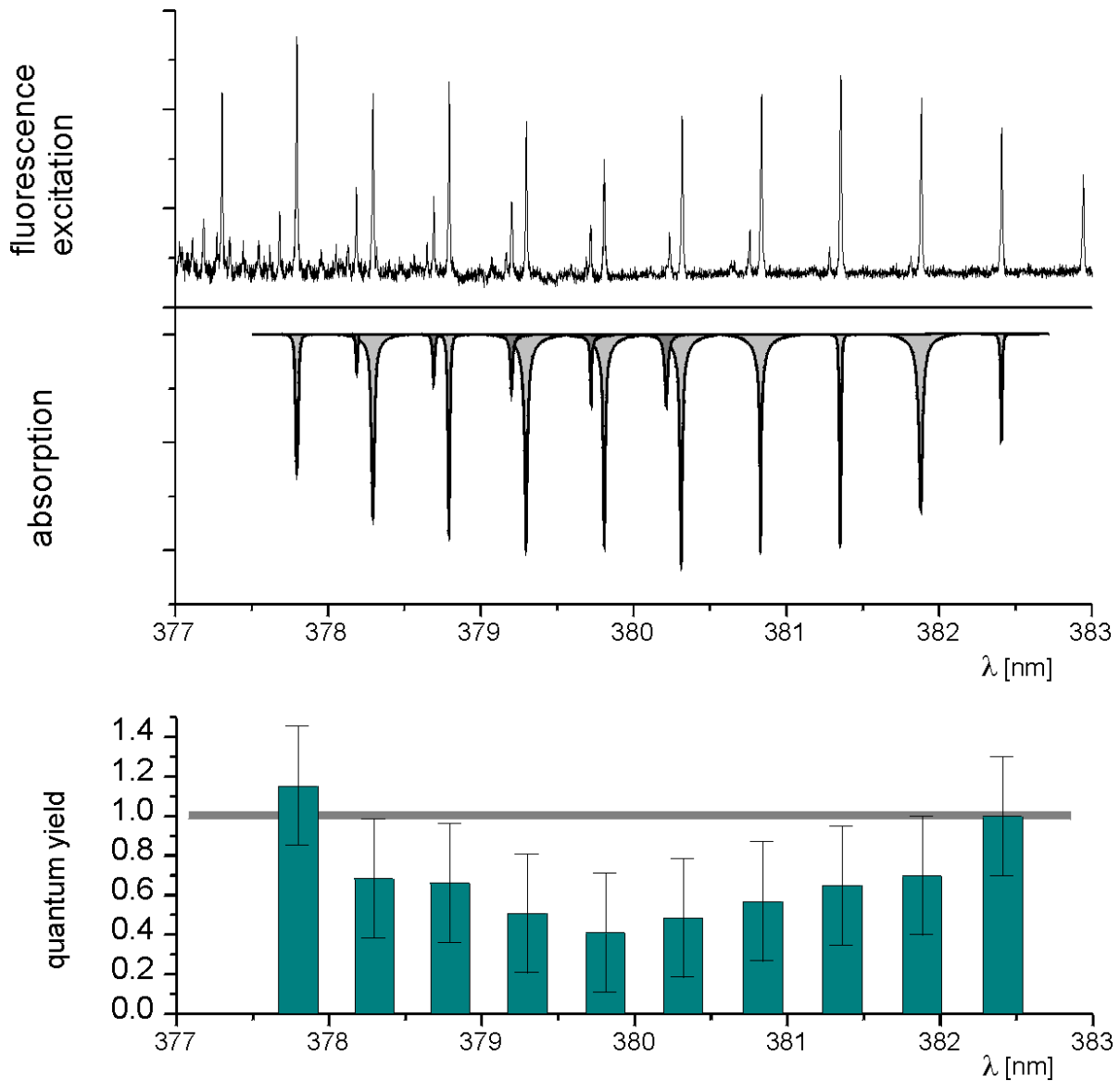


Abb.5: Im oberen Teil der Abbildung ist der Vergleich von Fluoreszenzanregungsspektrum und Cavity-Ring-Down Spektrum dargestellt. Gut sichtbar ist der Bereich der resonanten Photoreaktion der sich durch ein Fehlen an Fluoreszenzintensität (oben) und die Reduktion der Fluoreszenzquantenausbeute (unten) auszeichnet. Hiervon ist aber nur die Hauptprogression der Torsionschwingung – die Linien hoher Intensität (hellgrau) – betroffen. Eine Kombinationsprogression mit geringerer Intensität (dunkelgrau) zeigt den resonanten Einbruch nicht. Hierin zeigt sich der modenspezifische Charakter der Photoreaktion.

Literatur

- /1/ Rettig, W. *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* 1986, 25, 971
/2/ Shang, Q.; Bernstein, E.R., *J. Chem. Phys.* 1992, 97, 60
/3/ W. Rettig, M. Zander, *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.*, 87 (1983) 1143
/4/ C. Monte, A. Roggan, A. Subaric-Leitis, W. Rettig, P. Zimmermann, *J. Chem. Phys.* 98 (1993) 2580
/5/ T.J. Kang, W. Jarzeba, P.F. Barbara, T. Fonseca, *Chem. Phys.* 149 (1990) 81
/6/ J. Manz, B. Proppe, B. Schmidt, *Z. Phys. D* 34 (1995) 111
/7/ J. Giraud-Girard, J. Manz, C. Scheurer, *Z. Phys. D* 39 (1997) 291

Publikationen

- CRD 95 C. Cornelissen, W. Rettig, J.-P. Desvergne, H. Bouas-Laurent
Multiple Emitting Species and Competing Intramolecular Fluorescence Quenching in 9,9'-Dianthrylmethanol and Model Compounds
Chem. Phys. Lett. **239**, 290 (1995)
- DJM 95 C. Dedonder-Lardeux, C. Jouvét, S. Martrenchard, D. Solgadi, J. McCombie, B.D. Howells, T.F. Palmer, A. Subaric-Leitis, C. Monte, W. Rettig und P. Zimmermann,
Photochemistry in Jet-cooled Aniline Derivatives
Chem. Phys. **191**, 271 (1995)
- KRH 95 A.M. Klock, W. Rettig, J. Hofkens, M. van Damme, F.C. DeSchryver
Excited State Relaxation Channels of Liquid-Crystalline Cyanobiphenyls and a Ring-Bridged Model Compound. Comparison of Bulk and Dilute Solution Properties
J. Photochem. Photobiol. A: Chem. **85**, 11 (1995)
- LDL 95 J.F. Letard, S. Delmond, R. Lapouyade, D. Braun, W. Rettig, M. Kreissler
New Intrinsic Fluoroionophores with Dual Fluorescence: DMABN-Crown4 and DMABN-Crown5
Rec. Trav. Chim. Pays-Bas, **114**, 517 (1995)
- RDJ 95 W. Rettig, C. Dedonder-Lardeux, C. Jouvét, S. Martrenchard-Barra, P. Szrifiger, L. Krim und F. Castano
Intramolecular Charge Transfer Induced by Solvent Interaction
J. Chimie Phys. (France), **92**, 465 (1995)
- BrR 96 D. Braun, W. Rettig
Excitation energy dependence of the kinetics of charge-transfer formation
Chem. Phys. Lett. **268**, 110 (1997)

- CPM 96a P. Changenet, P. Plaza, M.M. Martin, Y.H. Meyer, W. Rettig
Ultrafast Intramolecular Charge Transfer and Dual Fluorescence of Dimethylamino-substituted Triphenylphosphines in Polar Solvents
Fast Elementary Processes in Chemical and Biological Systems, A. Tramer (Ed),
(American Inst. of Physics conference proceedings) **364**, 363 (1996)
- CPM 96b P. Changenet, P. Plaza, M.M. Martin, Y.H. Meyer, W. Rettig
Dynamics of photoinduced charge-transfer in dimethylamino-substituted triphenylphosphines
J. Chimie Physique **93**, 1697 (1996)
- KaR 96 S. Kapelle, W. Rettig
Charge transfer interactions in donor-donor diarylamines
J. Inf. Recording **23**, 187 (1996)
- KRR 96a G. Köhler, K. Rechthaler, K. Rotkiewicz, W. Rettig
Formation and Stabilization of Twisted Intramolecular Charge Transfer States in Binary Mixed Solvents
Chem. Physics, **207**, 85 (1996)
- KKR 96b V.A. Kharlanov, M.I.Knyazhansky, W. Rettig
Electronic Structure and Spectral Properties of N-Anthryl Substituted Pyridinium Cations
J. Mol. Structure **380**, 113 (1996)
- MRL 96 M. Maus, W. Rettig, R. Lapouyade
Photodynamics of a pretwisted donor-acceptor biphenyl
J. Inf. Recording **22**, 451 (1996)
- OSV 96 A. Onkelinx, F.C. DeSchryver, L. Viaene, M. Van der Auweraer, K. Iwai, M. Yamamoto, M. Ichikawa, H. Masuhara, M. Maus, W. Rettig
Radiative Depopulation of the Excited Intramolecular Charge Transfer State of 9-(4-(N,N-Dimethylamino)phenyl)phenanthrene
J. Amer. Chem. Soc., **118**, 2892 (1996)
- RML 96 W. Rettig, M. Maus, R. Lapouyade ,,
Conformational Control of Electron Transfer States: Induction of Molecular Photodiode Behaviour
Ber. Bunsenges. Phys. Chem. **100**, 2091 (1996)
- BRD 97 D. Braun, W. Rettig, S. Delmond, J.-F. Letard, R. Lapouyade
Amide derivatives of DMABN - A new class of dual fluorescent compounds
J. Phys, Chem **101**, 6836 (1997)

- CPM 97 P. Changenet, P. Plaza, M.M. Martin, Y.H. Meyer, W. Rettig
Photophysics of triphenylphosphines and their oxides: role of dimethylamino substituents
Chem. Phys. **221**, 311 (1997)
- CRL 97 C. Cornelissen-Gude, W. Rettig, R. Lapouyade
Photophysical Properties of Squaraine Derivatives: Evidence for Charge Separation
J. Phys. Chem. A **101**, 9673 (1997)
- DLL 97 S. Delmond, J.F. Letard, R. Lapouyade, W. Rettig
Photoinduced intramolecular charge transfer in planar versus twisted donor-acceptor terphenyls
J. Photochem.. Photobiol. A: Chem. **105**, 135 (1997)
- DWY 97 J. Dobkowski, J. Waluk, W. Yang, C. Rullière, W. Rettig
Intramolecular charge transfer properties in a molecule with a large size donor group: The case of 4'-(1-pyrenyl)-acetophenone
New J. Chem. **21**, 429 (1997)
- FRN 97 R. Fritz, W. Rettig, K. Nishiyama, T. Okada, W. Müller, K. Müllen
Excitonic and Charge Transfer States in Oligomeric 9,10-Anthrylene Chains
J. Phys. Chem. A **101**, 2796 (1997)
- KRK 97 V.A. Kharlanov, W. Rettig, M.I. Knyazhansky, N. Makarova
Multiple emission of N-(1-anthryl)-pyridinium
J. Photochem. Photobiol. A: Chem. **103**, 45 (1997)
- MaR 97 M. Maus, W. Rettig
The electronic structure of 4-(N,N-Dimethylamino)-4'-cyano-biphenyl and its planar and twisted model compounds
Chem. Phys. **218**, 151 (1997)
- RFB 97 W. Rettig, R. Fritz, D. Braun
Combination of Pressure and Temperature Dependent Measurements: A Simple Access to Intrinsic Thermal Activation Energies
J. Phys. Chem. A **101**, 6830 (1997)
- CoR 98 C. Cornelißen-Gude, W. Rettig
Dual Fluorescence and multiple Charge Transfer Nature in Derivatives of N-pyrrolo-benzonitrile
J. Phys. Chem. A **102**, 7754 (1998)

- CoR 98a C. Cornelißen-Gude, W. Rettig
Temperature Dependence of the Multiple Fluorescence of 9,9'-Dianthrylmethanol
Chem. Phys., **229**, 325 (1998)
- MRD 98 M. Maus, W. Rettig, S. Depaemelaere, A. Onkelinx, F.C. De Schryver, K. Iwai
Solvent and conformation dependent electron transfer interactions in flexible biaromatic compounds: The case of 9-(dimethylanilino) phenanthrene
Chem. Phys. Lett. **292**, 115 (1998)
- MRJ 98 M. Maus, W. Rettig, G. Jonusauskas, R. Lapouyade, C. Rulliere
Sub-picosecond Transient Absorption of Donor-Acceptor Biphenyls. Intramolecular Control of the Excited State Charge Transfer Processes by a Weak Electronic Coupling
J. Phys.Chem. A **102**, 7393 (1998)
- MaR 98 M. Maus, W. Rettig
Donor-Acceptor-Biphenyls: Electronic and Conformational Pathways after Photoexcitation
J. Inf. Recording **24**, 461 (1998)
- RSS 98 W. Rettig, B. Strehmel, S. Schrader, H. Seifert (Editors)
Applied Fluorescence in Chemistry, Biology, and Medicine
Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, 1998, ISBN 3-540-64451-2
- JPM 99 M. Jurczok, P. Plaza, M.M. Martin, W. Rettig,
Excited state dynamics of a julolidino analogue of crystal violet: A relaxation path through a conical intersection ?
J. Phys. Chem. A, **103** (1999) 3372-3377
- RPH 99 W. Rettig, B. Paepflow, H. Herbst, K. Müllen, J.-P. Desvergne, H. Bouas-Laurent
Intramolecular Excimer Formation in Short and Long Chainlength Di-(9-Anthryl) Bichromophoric Compounds and Relation to Ground State Properties
New J. Chem. **23** (1999) 453-460
- OUK 99 T. Okada, M. Uesugi, G. Köhler, K. Rechthaler, K. Rotkiewicz, W. Rettig, G. Grabner
Time-resolved Spectroscopy of DMABN and Its Cage Derivatives 6-Cyanobenzquinuclidine (CBQ) and Benzquinuclidine (BQ)
Chem. Phys. **241** (1999) 327-337
- RBD 99 W. Rettig, B. Bliss, K. Dirnberger
Pseudo-Jahn-Teller and TICT-Models: A Photophysical Comparison of meta- and para-DMABN Derivatives
Chem. Phys. Lett., **305** (1999) 8-14

- CoR 99 C. Cornelißen-Gude, W. Rettig
An experimental and ab initio-CI study for charge transfer excited states and their relaxation in pyrroloborane derivatives
J. Phys. Chem. A, 103 (1999) 4371 -4377
- MRB 99 M. Maus, W. Rettig, D. Bonafoux, R. Lapouyade
Photoinduced Intramolecular Charge Transfer in a Series of Differently Twisted Donor-Acceptor Biphenyls as Revealed by Fluorescence
J. Phys. Chem. A, 103 (1999) 3388-3401
- ReZ 99 W. Rettig, B. Zietz
Do Twisting and Pyramidalization contribute to the Reaction Coordinate of Charge Transfer Formation in DMABN and Derivatives?
Chem. Phys. Lett., in press
- ReM 99 W. Rettig, M. Maus
Conformational Changes Accompanying Intramolecular Excited State Electron Transfer
in "Conformational Analysis of Molecules in Excited States", ed. Jacek Waluk, Wiley, Methods in Stereochemical Analysis Series, submitted 1999.

Wissenschaftliche Mitarbeiter des Teilprojektes in der Förderperiode 95-98

Prof. Wolfgang Rettig, Dr. Claudia Cornelißen-Gude, Dr. David Braun, Dr. Christian Monte, Dr. Michael Maus, Dr. Sabine Kapelle, Barbara Bliß (geb. Rothmund), Holger Seifert