QUANTUM CHEMICAL DATA. 1,1-DISUBSTITUTED ETHYLENES

M.L.HERR

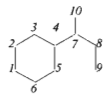
Laboratoire de Chimie Organique de Synthèse,
*Université Catholique de Louvain, 3000 Louvain, Belgium**

Received November 1st, 1971

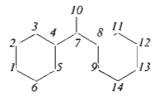
SCF MO Tables including LCAO–MO's, energies, and bond orders are presented for the following 1,1-disubstituted ethylenes: 2-Vinylbutadiene, 2-phenylbutadiene, 1,1-diphenylethylene, 2-(2-naphthyl)butadiene, α-(2-naphthyl)styrene, 2-(2-anthryl)butadiene, 1,1-bis(2-naphthyl)ethylene, α-(2-anthryl)styrene, and 2-(2-naphthacen)butadiene.

The use of Hückel molecular orbital calculations and tables summarizing the results of these calculations have proved useful to organic chemists. However, these have largely been rendered obsolete by the advent of more sophisticated molecular orbital methods which are more capable of duplicating the results of laboratory measurements. Notably, the SCF MO method of Dewar and coworkers[1–4] has been shown to give excellent projections of ground state properties of conjugated organic

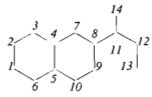
(1)



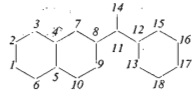
(2)



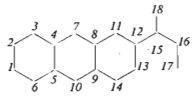
(3)



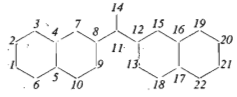
(4)



(5)

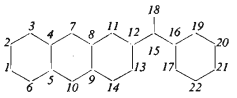


(6)

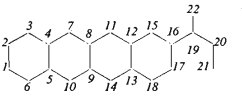


(7)

* Present address: Department of Chemistry, University of Malaya, Kuala Lumpur, Malaysia



(8)



(9)

molecules. Thus it now appears possible and, in fact, desirable, to supplant the use of HMO results by the vastly more accurate tables derived from SCF MO procedures. A step in this direction has already been made by Dewar and Trinajstic[5,6]. In a continuation of this effort, we present here a series of tables summarizing calculations on some 1,1-disubstituted ethylenes made by this same procedure[1-4]. In the following tables, SCF molecular orbitals, orbital energies, molecular energy terms, and bond orders are presented. The following abbreviations, following the example of Dewar and Trinajstic[5,6], are used: c.r. = total core repulsion; σ-b.e. = σ bond energy; π-t.e. = total π-electronic energy; π-b.e. = π-bonding energy; t.e. = total

TABLE I

2-Vinylbutadiene (*1*)

Orbital	1	2	3	4	5	6
Energy	−1·8474	−0·2267	1·0164	10·1144	11·3576	12·9783
Atom						
1	0·2911	−0·5000	−0·4066	−0·4066	−0·5000	−0·2910
2	0·4141	−0·5000	−0·2802	0·2802	0·5000	0·4141
3	0·5750	0·0000	0·4116	0·4116	0·0000	−0·5750
4	0·4141	0·5000	−0·2802	0·2802	−0·5000	0·4141
5	0·2910	0·5000	−0·4066	−0·4066	0·5000	−0·2910
6	0·3963	0·0000	0·5856	−0·5856	0·0000	0·3963

Energy terms		Bond	Bond order
c.r.	86·2678	1—2	0·9689
σ-b.e.	−17·7828	2—3	0·2455
π-t.e.	−93·7729	3—4	0·2455
π-b.e.	− 7·5051	3—6	0·9378
t.e.	−25·2879	4—5	0·9689
h.a.	−60·7879		

TABLE II

2-Phenylbutadiene (*2*)

Orbital	1	2	3	4	5
Energy	−2·5291	−1·3964	0·1790	0·4625	1·1730
Atom					
1	0·3126	−0·3263	−0·3955	0·0242	−0·3726
2	0·3303	−0·2692	−0·2355	−0·4848	−0·1670
3	0·3767	−0·1262	0·1349	−0·5113	0·2501
4	0·4634	0·0569	0·3918	−0·0293	0·3573
5	0·3797	−0·1195	0·1723	0·4877	0·2720
6	0·3324	−0·2638	−0·1966	0·5138	−0·1314
7	0·3239	0·4838	0·1898	−0·0036	−0·3535
8	0·1710	0·4684	−0·4572	0·0076	0·2056
9	0·1061	0·3596	−0·5096	0·0094	0·3157
10	0·1909	0·3678	0·2083	0·0086	−0·5338

Orbital	6	7	8	9	10
Energy	9·9592	10·6698	10·9532	12·5286	13·6614
Atom					
1	−0·3726	−0·0242	−0·3955	−0·3263	−0·3126
2	0·1670	−0·4848	0·2355	0·2692	0·3303
3	0·2501	0·5113	0·1350	−0·1261	−0·3767
4	−0·3573	−0·0293	−0·3919	−0·0569	0·4634
5	0·2720	−0·4877	0·1723	−0·1195	−0·3798
6	0·1314	0·5138	0·1966	0·2639	0·3324
7	−0·3536	0·0036	0·1897	0·4838	−0·3239
8	−0·2057	0·0075	0·4572	−0·4684	0·1710
9	0·3158	−0·0094	−0·5096	0·3595	−0·1061
10	0·5338	0·0086	−0·2082	−0·3678	0·1909

Energy terms		Bond	Bond order	Bond	Bond order
c.r.	224·2205	1—2	0·6694	4—7	0·2515
σ-b.e.	−36·5434	1—6	0·6584	5—6	0·6774
π-t.e.	−237·9454	2—3	0·6656	7—8	0·2451
π-b.e.	−13·7249	3—4	0·6490	7—10	0·9359
t.e.	−50·2683	4—5	0·6393	8—9	0·9691
h.a.	−94·6433				

TABLE III

1,1-Diphenylethylene (*3*)

Orbital	1	2	3	4	5
Energy	−2·6752	−2·2536	−0·9491	0·4611	0·4645
Atom					
1	0·2024	−0·2926	−0·3380	0·0119	0·0397
2	0·2209	−0·2911	−0·2527	−0·3618	0·3532
3	0·2702	−0·2863	−0·0458	−0·3758	0·3150
4	0·3628	−0·2832	0·1846	−0·0158	−0·0368
5	0·2727	−0·2873	−0·0349	0·3638	−0·3543
6	0·2227	−0·2918	−0·2432	0·3774	−0·3166
7	0·3509	−0·0001	0·5148	0·0003	−0·0000
8	0·3629	0·2830	0·1847	−0·0182	0·0352
9	0·2728	0·2871	−0·0349	0·3288	0·3874
10	0·1995	−0·0001	0·4312	0·0184	0·0009
11	0·2704	0·2862	−0·0458	−0·3434	−0·3494
12	0·2211	0·2911	−0·2526	−0·3269	0·3861
13	0·2025	0·2925	−0·3379	0·0146	−0·0384
14	0·2228	0·2917	−0·2432	0·3449	0·3512

Orbital	6	7	8	9	10
Energy	0·5290	1·2627	9·8713	10·6051	10·6693
Atom					
1	−0·4036	0·3076	0·3076	−0·4036	0·0399
2	−0·1687	0·1360	−0·1360	0·1685	−0·3526
3	0·2393	−0·2126	−0·2126	0·2394	0·3142
4	0·4106	−0·2897	0·2897	−0·4105	0·0371
5	0·1727	−0·2328	−0·2327	0·1725	−0·3537
6	−0·2301	0·1027	−0·1027	0·2302	0·3158
7	−0·0001	0·3345	0·3345	−0·0001	−0·0000
8	−0·4106	−0·2898	0·2898	0·4105	−0·0353
9	−0·1718	−0·2328	−0·2328	−0·1716	0·3881
10	−0·0000	0·5235	−0·5234	0·0001	−0·0009
11	−0·2401	−0·2127	−0·2127	−0·2402	−0·3499
12	0·1678	0·1360	−0·1360	−0·1676	0·3868
13	0·4036	0·3077	0·3078	0·4036	−0·0386
14	0·2309	0·1027	−0·1028	−0·2311	−0·3517

TABLE III
(*Continued*)

Orbital	11	12	13	14
Energy	10·6728	12·0832	13·3876	13·8092
Atom				
1	0·0118	0·3380	−0·2926	0·2024
2	0·3625	−0·2527	0·2911	−0·2209
3	−0·3764	0·0458	−0·2863	0·2702
4	0·0157	0·1846	0·2832	−0·3628
5	0·3645	0·0349	−0·2873	0·2727
6	−0·3779	−0·2432	0·2918	−0·2226
7	0·0003	−0·5148	−0·0001	0·3509
8	0·0183	0·1846	−0·2830	−0·3629
9	0·3281	0·0349	0·2872	0·2728
10	−0·0184	0·4311	0·0001	−0·1995
11	−0·3428	0·0459	0·2862	0·2704
12	0·3262	−0·2526	−0·2910	−0·2210
13	0·0147	0·3379	0·2925	0·2025
14	−0·3442	−0·2432	−0·2917	−0·2228

Energy terms		Bond	Bond order	Bond	Bond order
c.r.	398·7363	1—2	0·6698	7—10	0·9341
σ-b.e.	−55·3040	1—6	0·6580	8—9	0·6389
π-t.e.	−418·6836	2—3	0·6652	8—11	0·6496
π-b.e.	−19·9473	3—4	0·6496	9—14	0·6778
t.e.	−75·2512	4—5	3·6390	11—12	0·6652
h.a.	−128·5012	4—7	0·2509	12—13	0·6698
		5—6	0·6777	13—14	0·6580
		7—8	0·2509		

TABLE IV

2-(2-Naphthyl)butadiene (*4*)

Orbital	1	2	3	4	5
Energy	−2·8411	−1·8709	−0·9833	−0·2756	0·4141
Atom					
1	0·2223	−0·2898	0·3135	0·2227	0·3381
2	0·2238	−0·2766	0·3526	−0·1895	0·1994
3	0·2727	−0·2270	0·2264	−0·3804	−0·0799
4	0·4071	−0·1347	−0·0453	−0·3074	−0·3512
5	0·3974	−0·1842	−0·1355	0·2818	−0·2495
6	0·2685	−0·2583	0·1454	0·3920	0·1565
7	0·3209	0·1433	−0·1553	−0·3891	−0·0575
8	0·3256	0·3535	−0·1894	−0·2046	0·2239
9	0·2765	0·1881	−0·3516	0·2002	0·1373
10	0·2954	0·0272	−0·3285	0·3718	−0·0488
11	0·1900	0·4692	0·2736	0·0100	0·2693
12	0·0898	0·3339	0·3953	0·1882	−0·3954
13	0·0528	0·2334	0·3310	0·1865	−0·4716
14	0·1036	0·3185	0·2290	0·0213	0·3218

Orbital	6	7	8	9	10
Energy	1·0244	1·4317	9·7026	10·1099	10·7200
Atom					
1	0·0799	0·3132	0·3131	−0·0797	0·3382
2	0·3971	−0·1253	0·1253	0·3970	−0·1995
3	0·2434	−0·3355	−0·3355	−0·2435	−0·0798
4	−0·2890	−0·1127	0·1127	−0·2888	0·3513
5	−0·3508	−0·1584	−0·1584	0·3507	−0·2497
6	−0·2533	0·3127	−0·3126	−0·2534	−0·1564
7	−0·1170	0·4289	0·4289	0·1171	−0·0574
8	0·1319	0·3518	−0·3517	0·1317	−0·2241
9	0·4472	−0·0749	−0·0749	−0·4472	0·1375
10	0·2444	−0·3220	0·3219	0·2446	0·0488
11	−0·2230	−0·2156	−0·2157	0·2231	0·2691
12	0·1506	0·0989	−0·0990	0·1508	0·3955
13	0·2188	0·1679	0·1680	−0·2190	−0·4715
14	−0·3080	−0·3696	0·3698	−0·3080	−0·3215

TABLE IV
(*Continued*)

Orbital	11	12	13	14
Energy	11·4101	12·1175	13·0051	13·9756
Atom				
1	0·2228	0·3134	0·2898	0·2222
2	0·1894	−0·3526	−0·2767	−0·2238
3	−0·3804	0·2264	0·2270	0·2727
4	0·3075	0·0453	−0·1347	−0·4071
5	0·2818	−0·1356	0·1842	0·3974
6	−0·3920	−0·1454	−0·2584	−0·2685
7	−0·3891	−0·1552	−0·1434	0·3210
8	0·2046	0·1892	0·3536	−0·3256
9	0·2002	−0·3515	−0·1882	0·2765
10	−0·3717	0·3286	0·0273	−0·2954
11	0·0101	0·2738	−0·4692	0·1900
12	−0·1882	−0·3953	0·3338	−0·0897
13	0·1864	0·3309	−0·2333	0·0528
14	−0·0215	−0·2291	0·3184	−0·1036

Energy terms		Bond	Bond order	Bond	Bond order
c.r.	400·1670	1— 2	0·5163	7— 8	0·7735
σ-b.e.	— 55·1700	1— 6	0·7960	8— 9	0·4910
π-t.e.	−419·8547	2— 3	0·7970	8—11	0·2579
π-b.e.	— 19·6877	3— 4	0·4876	9—10	0·8070
t.e.	— 74·8577	4— 5	0·6259	11—12	0·2448
h.a.	−128·1077	4— 7	0·4874	11—14	0·9340
		5— 6	0·4906	12—13	0·9692
		5—10	0·4782		

TABLE V

α-(2-Naphthyl)styrene (5)

Orbital	1	2	3	4	5	6
Energy	−2·8682	−2·4648	−1·6000	−0·6913	−0·2070	0·4639
Atom						
1	0·2016	−0·1507	0·3353	−0·2184	−0·3100	0·0086
2	0·2036	−0·1472	0·3231	−0·3347	0·1052	−0·0033
3	0·2506	−0·1550	0·2373	−0·2449	0·3526	0·0037
4	0·3798	−0·1817	0·0725	0·0238	0·3637	0·0085
5	0·3676	−0·1992	0·1126	0·2477	−0·1989	0·0051
6	0·2453	−0·1642	0·2651	−0·0133	−0·4183	−0·0052
7	0·3110	−0·0574	−0·2152	0·0069	0·3969	0·0005
8	0·3300	0·0357	−0·4086	−0·0023	0·1614	−0·0053
9	0·2688	−0·0386	−0·2898	0·3054	−0·1564	−0·0030
10	0·2786	−0·1037	−0·1275	0·3853	−0·2851	0·0013
11	0·2329	0·2379	−0·3174	−0·3969	−0·1634	−0·0024
12	0·1845	0·4204	0·0100	−0·1995	−0·1519	−0·0167
13	0·1260	0·3592	0·1203	−0·0092	−0·0456	0·4943
14	0·1260	0·1413	−0·2272	−0·3505	−0·1743	0·0097
15	0·1248	0·3568	0·1232	0·0019	−0·0328	−0·5054
16	0·0937	0·3229	0·2075	0·2001	0·1082	−0·4915
17	0·0822	0·3098	0·2407	0·2834	0·1679	0·0114
18	0·0946	0·3246	0·2051	0·1900	0·0958	0·5079

Orbital	7	8	9	10	11	12
Energy	0·6836	1·0857	1·4525	9·6838	10·0505	10·4528
Atom						
1	0·3013	−0·0080	0·2993	0·2992	0·0083	−0·3013
2	0·2702	0·3531	−0·1083	0·1083	0·3529	0·2704
3	−0·0057	0·2741	−0·3126	−0·3125	−0·2742	0·0055
4	−0·3585	−0·2075	−0·1142	0·1142	−0·2072	−0·3586
5	−0·3417	−0·2616	−0·1623	−0·1622	0·2614	0·3419
6	0·0453	−0·2868	0·2883	−0·2883	−0·2868	0·0452
7	0·0042	−0·1670	0·4102	0·4101	0·1670	−0·0042
8	0·2852	0·0337	0·3381	−0·3379	0·0334	0·2853
9	0·2489	0·3995	−0·0549	−0·0549	−0·3993	−0·2491
10	−0·0072	0·2772	−0·2979	0·2978	0·2773	−0·0071
11	0·0844	−0·2090	−0·2310	−0·2311	0·2090	−0·0842
12	−0·3757	0·2494	0·1505	−0·1507	0·2496	−0·3755
13	−0·2087	0·1788	0·1364	0·1365	−0·1789	0·2085
14	0·1142	−0·2957	−0·3985	0·3986	−0·2956	0·1138
15	−0·2063	0·1671	0·1225	0·1226	−0·1672	0·2062
16	0·1790	−0·1156	−0·0723	0·0724	−0·1157	0·1789
17	0·3705	−0·2556	−0·1678	−0·1680	0·2558	−0·3703
18	0·1699	−0·0956	−0·0490	0·0490	−0·0957	0·1699

TABLE V
(*Continued*)

Orbital	13	14	15	16	17	18
Energy	10·6717	11·3435	11·8276	12·7364	13·6008	14·0050
Atom						
1	0·0086	−0·3100	−0·2183	0·3353	0·1506	0·2016
2	−0·0033	−0·1050	0·3348	−0·3231	−0·1471	−0·2036
3	−0·0037	0·3525	−0·2445	0·2373	0·1549	0·2506
4	0·0085	−0·3638	−0·0236	−0·0725	−0·1815	−0·3799
5	−0·0051	−0·1988	0·2478	0·1126	0·1990	0·3678
6	−0·0052	0·4183	0·0132	−0·2651	−0·1642	−0·2453
7	−0·0005	0·3969	0·0067	−0·2152	0·0571	0·3111
8	−0·0053	−0·1614	0·0024	0·4086	0·0360	−0·3301
9	0·0030	−0·1564	0·3054	−0·2898	0·0383	0·2689
10	0·0013	0·2850	−0·3854	0·1275	−0·1035	−0·2787
11	0·0024	−0·1636	−0·3969	−0·3173	−0·2382	0·2328
12	−0·0166	0·1519	0·1993	−0·0102	0·4206	−0·1843
13	−0·4943	−0·0456	−0·0090	0·1204	−0·3593	0·1257
14	0·0097	0·1744	0·3504	0·2271	0·1415	−0·1259
15	0·5054	−0·0328	0·0020	0·1234	−0·3568	0·1245
16	−0·4915	−0·1083	−0·2001	−0·2075	0·3228	−0·0935
17	−0·0113	0·1680	0·2834	0·2407	−0·3097	0·0820
18	0·5079	−0·0958	−0·1901	−0·2052	0·3246	−0·0943

Energy terms		Bond	Bond order	Bond	Bond order
c.r.	601·3752	1— 2	0·5166	8—11	0·2572
σ-b.e.	−73·9308	1— 6	0·7958	9—10	0·8068
π-t.e.	−627·2866	2— 3	0·7968	11—12	0·2505
π-b.e.	−25·9114	3— 4	0·4878	11—14	0·9323
t.e.	−99·8421	4— 5	0·6256	12—13	0·6391
h.a.	−161·9671	4— 7	0·4875	12—15	0·6497
		5— 6	0·4908	13—18	0·6777
		5—10	0·4784	15—16	0·6652
		7— 8	0·7736	16—17	0·6698
		8— 9	0·4914	17—18	0·6580

TABLE VI

2-(2-Anthryl)butadiene (*6*)

Orbital	1	2	3	4	5	6
Energy	−2·9876	−2·2496	−1·5036	−0·6338	−0·5482	0·2912
Atom						
1	0·1583	−0·2578	0·2624	0·3427	−0·1272	−0·1447
2	0·1585	−0·2563	0·2725	0·1226	−0·3409	0·2808
3	0·1998	−0·2548	0·2111	−0·0942	−0·3051	0·3625
4	0·3321	−0·2636	0·0659	−0·3276	−0·0334	0·0749
5	0·3312	−0·2703	0·0351	0·0663	0·3250	−0·2276
6	0·1995	−0·2584	0·1898	0·3189	0·0908	−0·3315
7	0·2980	−0·0676	−0·0947	−0·4414	−0·0993	0·0084
8	0·3552	0·1247	−0·2369	−0·3081	−0·0826	−0·0696
9	0·3493	0·0975	−0·3139	0·1051	0·2424	0·1610
10	0·2954	−0·0840	−0·1577	0·1363	0·4014	−0·0563
11	0·2423	0·2702	−0·0304	−0·1018	−0·2907	−0·2953
12	0·2299	0·3895	0·1239	0·1027	−0·2970	−0·2277
13	0·1979	0·2817	−0·0692	0·3673	−0·1702	0·2379
14	0·2259	0·2027	−0·1926	0·3629	0·0043	0·3773
15	0·1250	0·3353	0·4333	−0·0529	0·1017	−0·1504
16	0·0563	0·1984	0·3868	−0·1368	0·3289	0·2793
17	0·0323	0·1293	0·2904	−0·1238	0·3044	0·3217
18	0·0658	0·2081	0·3199	−0·0432	0·1002	−0·1596

Orbital	7	8	9	10	11	12
Energy	0·6273	1·1580	1·8904	9·2459	9·9782	10·5038
Atom						
1	0·3437	−0·1154	−0·2315	−0·2315	−0·1152	0·3437
2	0·0914	−0·2764	0·2002	−0·2002	0·2764	−0·0918
3	−0·1642	−0·1178	0·2764	0·2764	−0·1179	−0·1639
4	−0·3262	0·2930	−0·0977	0·0977	−0·2927	0·3264
5	−0·2285	0·2825	0·1491	0·1491	0·2823	−0·2288
6	0·2264	0·1118	−0·2718	0·2718	−0·1119	−0·2262
7	0·0230	0·0695	−0·4331	−0·4330	0·0696	0·0229
8	0·3394	−0·2438	−0·1450	0·1450	0·2435	−0·3395
9	0·1263	−0·3901	0·0782	0·0782	−0·3900	0·1268
10	−0·0974	−0·1330	0·4132	−0·4132	0·1331	0·0973
11	0·2476	0·1252	0·3291	0·3291	0·1253	0·2472
12	−0·0343	0·2487	0·2577	−0·2577	−0·2486	0·0348
13	−0·1802	0·2992	−0·1849	−0·1849	0·2991	−0·1803
14	−0·1260	0·0448	−0·2814	0·2814	−0·0449	0·1257
15	−0·2609	−0·2687	−0·0903	−0·0904	−0·2689	−0·2607
16	0·2773	0·1589	0·0279	−0·0279	−0·1592	−0·2775
17	0·3527	0·2421	0·0587	0·0587	0·2425	0·3528
18	−0·3396	−0·3988	−0·1958	0·1959	0·3991	0·3393

TABLE VI
(*Continued*)

Orbital	13	14	15	16	17	18
Energy	10·8449	11·6843	11·7702	12·6396	13·3859	14·1242
Atom						
1	0·1450	−0·1277	−0·3425	0·2624	0·2578	0·1582
2	0·2807	0·3411	0·1222	−0·2725	−0·2563	−0·1584
3	−0·3626	−0·3050	0·0945	0·2111	0·2548	0·1998
4	0·0751	0·0330	−0·3277	−0·0659	−0·2636	−0·3321
5	0·2275	0·3249	−0·0668	0·0350	0·2703	0·3312
6	−0·3316	−0·0903	0·3190	−0·1897	−0·2585	−0·1994
7	−0·0084	−0·0987	0·4415	−0·0947	0·0676	0·2980
8	−0·0698	0·0823	−0·3032	0·2368	0·1248	−0·3552
9	−0·1610	0·2422	−0·1055	−0·3139	−0·0976	0·3493
10	−0·0562	−0·4012	0·1369	0·1578	−0·0840	−0·2954
11	0·2956	−0·2905	0·1022	−0·0302	−0·2703	0·2423
12	−0·2278	0·2971	0·1022	−0·1242	0·3895	−0·2299
13	−0·2379	−0·1708	−0·3671	−0·0690	−0·2818	0·1979
14	0·3773	−0·0037	0·3624	0·1925	0·2028	−0·2259
15	0·1501	0·1021	0·0529	0·4335	−0·3351	0·1250
16	0·2792	−0·3292	−0·1364	−0·3867	0·1982	−0·0563
17	−0·3215	0·3045	0·1233	0·2903	−0·1291	0·0323
18	−0·1592	−0·1005	−0·0431	−0·3199	0·2080	−0·0657

Energy terms		Bond	Bond order	Bond	Bond order
c.r.	603·1897	1— 2	0·4488	8—11	0·4174
σ-b.e.	— 73·8183	1— 6	0·8431	9—10	0·6379
π-t.e.	—628·6477	2— 3	0·8433	9—14	0·4072
π-b.e.	— 25·4580	3— 4	0·4154	11—12	0·8156
t.e.	— 99·2764	4— 5	0·5533	12—13	0·4274
h.a.	—161·4014	4— 7	0·6286	12—15	0·2610
		5— 6	0·4160	13—14	0·8509
		5—10	0·6272	15—16	0·2446
		7— 8	0·6342	15—18	0·9331
		8— 9	0·5471	16—17	0·9693

TABLE VII

1,1-Bis(2-naphthyl)ethylene (7)

Orbital	1	2	3	4	5	6
Energy	−2·9180	−2·7483	−1·8822	−1·2775	−0·5717	−0·2762
Atom						
1	0·1389	−0·1836	0·2491	0·2934	−0·1284	−0·1595
2	0·1409	−0·1834	0·2377	0·2958	−0·2770	0·1423
3	0·1767	−0·2159	0·1961	0·1954	−0·2321	0·2798
4	0·2750	−0·3061	0·1189	−0·0034	−0·0158	0·2227
5	0·2623	−0·3070	0·1619	−0·0097	0·2483	−0·2094
6	0·1711	−0·2166	0·2232	0·1903	0·0581	−0·2859
7	0·2400	−0·2097	−0·1209	−0·1908	−0·0707	0·2836
8	0·2730	−0·1745	−0·3026	−0·2893	−0·0704	0·1507
9	0·2084	−0·1777	−0·1583	−0·2987	0·2428	−0·1481
10	0·2055	−0·2132	−0·0195	−0·2062	0·3487	−0·2751
11	0·2431	−0·0001	−0·4089	−0·0000	−0·3285	0·0001
12	0·2731	0·1743	−0·3027	0·2893	−0·0705	−0·1507
13	0·2085	0·1776	−0·1584	0·2987	0·2428	0·1481
14	0·1295	−0·0000	−0·2741	−0·0000	−0·2935	0·0001
15	0·2401	0·2096	−0·1209	0·1907	−0·0708	−0·2837
16	0·2751	0·3060	0·1189	0·0035	−0·0158	−0·2228
17	0·2624	0·3069	0·1619	0·0097	0·2484	0·2093
18	0·2056	0·2131	−0·0195	0·2063	0·3487	0·2750
19	0·1768	0·2158	0·1961	−0·1954	−0·2322	−0·2798
20	0·1410	0·1834	0·2377	−0·2958	−0·2771	−0·1422
21	0·1390	0·1835	0·2491	−0·2934	−0·1284	0·1597
22	0·1712	0·2165	0·2232	−0·1903	0·0582	0·2860

Orbital	7	8	9	10	11	12
Energy	−0·0638	0·7755	1·0267	1·2918	1·5144	9·6236
Atom						
1	0·3106	−0·2508	0·0594	−0·2045	0·2286	0·2284
2	0·0332	−0·2740	0·3038	0·1832	−0·0594	0·0593
3	−0·2046	−0·0306	0·1875	0·2932	−0·2224	−0·2223
4	−0·3187	0·3263	−0·2200	0·0143	−0·1004	0·1004
5	0·0147	0·3341	−0·2674	0·0152	−0·1469	−0·1468
6	0·3003	0·0070	−0·1951	−0·2916	0·1983	−0·1982
7	−0·2547	−0·0067	−0·0908	−0·2986	0·3157	0·3155
8	−0·0249	−0·2601	0·0997	−0·2133	0·2614	−0·2612
9	0·0738	−0·2729	0·3421	0·1811	−0·0069	−0·0068
10	0·0883	−0·0271	0·1879	0·2927	−0·2066	0·2065
11	0·2872	−0·0000	−0·1708	−0·0001	−0·2326	−0·2325

TABLE VII
(*Continued*)

Orbital	7	8	9	10	11	12
Energy	−0·0638	0·7755	1·0267	1·2918	1·5144	9·6236
Atom						
12	−0·0248	0·2601	0·0996	0·2134	0·2613	−0·2615
13	0·0737	0·2730	0·3421	−0·1810	−0·0068	−0·0070
14	0·3124	−0·0000	−0·2285	−0·0001	−0·4150	0·4149
15	−0·2546	0·0067	−0·0909	0·2986	0·3157	0·3158
16	−0·3186	−0·3264	−0·2199	−0·0144	−0·1004	0·1004
17	0·0146	−0·3342	−0·2673	−0·0153	−0·1469	−0·1469
18	0·0882	0·0272	0·1880	−0·2927	−0·2066	0·2068
19	−0·2045	0·0307	0·1875	−0·2933	−0·2223	−0·2226
20	0·0332	0·2740	0·3037	−0·1832	−0·0593	0·0595
21	0·3105	0·2508	0·0593	0·2046	0·2285	0·2287
22	0·3002	−0·0070	−0·1951	0·2916	0·1982	−0·1985

Orbital	13	14	15	16	17	18
Energy	9·8460	10·1112	10·3626	11·2018	11·4142	11·7097
Atom						
1	0·2047	−0·0593	0·2509	0·3105	−0·1597	0·1284
2	0·1833	0·3037	−0·2741	−0·0333	−0·1422	−0·2771
3	−0·2934	−0·1875	0·0307	−0·2043	0·2798	0·2322
4	0·0144	−0·2198	0·3264	0·3185	−0·2229	−0·0159
5	−0·0153	0·2673	−0·3342	0·0146	−0·2093	−0·2484
6	−0·2918	−0·1951	0·0070	−0·3001	0·2861	0·0582
7	0·2987	0·0908	0·0067	−0·2545	0·2838	0·0708
8	−0·2134	0·0996	−0·2601	0·0248	−0·1507	−0·0705
9	−0·1810	−0·3420	0·2730	0·0737	−0·1481	−0·2429
10	0·2927	0·1879	−0·0271	−0·0882	0·2751	0·3487
11	−0·0001	0·1709	−0·0001	0·2872	−0·0002	0·3285
12	0·2131	0·0998	0·2600	0·0250	0·1507	−0·0704
13	0·1811	−0·3421	−0·2728	0·0738	0·1481	−0·2429
14	0·0002	−0·2285	0·0001	−0·3124	0·0002	−0·2934
15	−0·2984	0·0907	−0·0068	−0·2548	−0·2836	0·0707
16	−0·0143	−0·2200	−0·3263	0·3187	0·2226	−0·0158
17	0·0151	0·2675	0·3340	0·0148	0·2094	−0·2483
18	−0·2926	0·1878	0·0270	−0·0884	−0·2751	0·3487
19	0·2932	−0·1875	−0·0306	−0·2046	−0·2797	0·2322
20	−0·1832	0·3038	0·2739	−0·0332	0·1423	−0·2771
21	−0·2044	−0·0595	−0·2508	0·3106	0·1594	0·1285
22	0·2916	−0·1950	−0·0068	−0·3004	−0·2858	0·0580

TABLE VII
(*Continued*)

Orbital	19	20	21	22
Energy	12·4155	13·0203	13·8864	14·0562
Atom				
1	−0·2934	0·2491	0·1835	0·1389
2	0·2958	−0·2377	−0·1833	−0·1410
3	−0·1954	0·1961	0·2158	0·1768
4	−0·0034	−0·1190	−0·3059	−0·2752
5	0·0097	0·1620	0·3068	0·2625
6	0·1904	−0·2232	−0·2164	−0·1712
7	0·1907	−0·1209	0·2096	0·2402
8	−0·2893	0·3027	−0·1743	−0·2732
9	0·2987	−0·1583	0·1776	0·2086
10	−0·2062	0·0194	−0·2131	−0·2057
11	−0·0001	−0·4090	−0·0001	0·2432
12	0·2894	0·3026	0·1746	−0·2731
13	−0·2987	−0·1582	−0·1778	0·2084
14	0·0001	0·2742	0·0001	−0·1295
15	−0·1907	−0·1208	−0·2098	0·2400
16	0·0033	−0·1194	0·3062	−0·2749
17	−0·0095	0·1620	−0·3071	0·2622
18	0·2061	0·0193	0·2133	−0·2055
19	0·1954	0·1961	−0·2159	0·1766
20	−0·2958	−0·2376	0·1834	−0·1408
21	0·2934	0·2490	−0·1835	0·1388
22	−0·1904	−0·2232	0·2166	−0·1710

Energy terms		Bond	Bond order	Bond	Bond order
c.r.	824·9001	1— 2	0·5163	11—14	0·9305
σ-b.e.	— 92·5571	1— 6	0·7960	12—13	0·4914
π-t.e.	−856·7766	2— 3	0·7970	12—15	0·7738
π-b.e.	— 31·8765	3— 4	0·4876	13—18	0·8068
t.e.	−124·4336	4— 5	0·6258	15—16	0·4874
h.a.	−195·4336	4— 7	0·4874	16—17	0·6258
		5— 6	0·4906	16—19	0·4876
		5—10	0·4784	17—18	0·4784
		7— 8	0·7738	17—22	0·4906
		8— 9	0·4914	19—20	0·7970
		8—11	0·2567	20—21	0·5163
		9—10	0·8068	21—22	0·7960
		11—12	0·2567		

TABLE VIII

α-(2-Anthryl)styrene (*8*)

Orbital	1	2	3	4	5	6
Energy	−2·9956	−2·5460	−2·0839	−1·1929	−0·6227	−0·3319
Atom						
1	0·1525	−0·1225	0·2726	0·2718	0·2806	0·1703
2	0·1527	−0·1216	0·2721	0·2935	−0·0095	0·3543
3	0·1931	−0·1333	0·2559	0·2062	0·1843	0·2690
4	0·3222	−0·1730	0·2258	−0·0020	0·3233	−0·0721
5	0·3210	−0·1776	0·2277	−0·0580	−0·1582	−0·3309
6	0·1926	−0·1357	0·2570	0·1620	−0·3235	−0·0610
7	0·2912	−0·0936	0·0150	−0·1200	0·4459	−0·0022
8	0·3505	−0·0279	−0·1949	−0·2051	0·3100	0·0466
9	0·3433	−0·0497	−0·1874	−0·3152	−0·1866	−0·0942
10	0·2880	−0·1057	0·0195	−0·2240	−0·2562	−0·3123
11	0·2454	0·0922	−0·2641	0·0974	0·1903	0·1853
12	0·2401	0·1923	−0·3143	0·2880	0·0066	0·1839
13	0·2010	0·0960	−0·2845	0·0733	−0·2988	0·2794
14	0·2250	0·0338	−0·2478	−0·1054	−0·3553	0·1841
15	0·1499	0·3111	−0·1021	0·4133	0·0446	−0·2987
16	0·1047	0·4230	0·1480	0·0961	0·0247	−0·2344
17	0·0676	0·3424	0·1817	−0·0653	0·0018	−0·0564
18	0·0786	0·1809	−0·0646	0·3246	0·0337	−0·2916
19	0·0670	0·3398	0·1817	−0·0715	0·0014	−0·0413
20	0·0478	0·2951	0·2053	−0·2108	−0·0228	0·1779
21	0·0407	0·2780	0·2142	−0·2674	−0·0333	0·2715
22	0·0482	0·2969	0·2053	−0·2056	−0·0223	0·1630

Orbital	7	8	9	10	11	12
Energy	0·3940	0·4650	0·8024	1·2218	1·8921	9·2462
Atom						
1	−0·2706	0·0205	−0·2714	0·0724	−0·2310	−0·2310
2	0·2030	−0·0103	−0·1967	0·2374	0·1995	−0·1995
3	0·3734	−0·0235	0·0329	0·1166	0·2756	0·2757
4	0·1838	−0·0145	0·3235	−0·2398	−0·0972	0·0971
5	−0·1047	0·0021	0·3059	−0·2212	0·1491	0·1490
6	−0·3871	0·0254	−0·0797	−0·1164	−0·2710	0·2710
7	−0·0020	0·0016	−0·0125	−0·0783	−0·4321	−0·4320
8	−0·1830	0·0156	−0·3301	0·1855	−0·1448	0·1448
9	0·1285	−0·0066	−0·2604	0·3334	0·0774	0·0774
10	0·0226	−0·0043	0·0436	0·1415	0·4120	−0·4120
11	−0·3943	0·0262	−0·0670	−0·1126	0·3289	0·3289

TABLE VIII
(*Continued*)

Orbital	7	8	9	10	11	12
Energy	0·3940	0·4650	0·8024	1·2218	1·8921	9·2462
Atom						
12	−0·2281	0·0131	0·1813	−0·1963	0·2573	−0·2573
13	0·2319	−0·0148	0·1947	−0·2665	−0·1839	−0·1839
14	0·3641	−0·0220	0·0305	−0·0534	−0·2806	0·2806
15	0·0364	−0·0039	0·1386	0·2814	−0·0923	−0·0924
16	0·1823	−0·0326	−0·3461	−0·2612	0·0342	−0·0343
17	0·1203	0·4853	−0·2104	−0·2041	0·0423	0·0423
18	0·0580	0·0069	0·1928	0·4299	−0·2002	0·2002
19	0·0473	−0·5116	−0·1995	−0·1873	0·0370	0·0370
20	−0·1299	−0·4821	0·1652	0·1221	−0·0186	0·0187
21	−0·1807	0·0269	0·3437	0·2745	−0·0456	−0·0457
22	−0·0555	0·5144	0·1465	0·0941	−0·0087	0·0088

Orbital	13	14	15	16	17	18
Energy	9·9163	10·3358	10·6724	10·7444	11·4701	11·7611
Atom						
1	−0·0722	0·2714	−0·0204	0·2707	0·1704	0·2805
2	0·2372	−0·1970	−0·0102	0·2030	−0·3543	−0·0095
3	−0·1167	−0·0326	0·0233	−0·3734	0·2690	−0·1843
4	−0·2395	0·3236	−0·0143	0·1840	0·0722	0·3232
5	0·2209	−0·3061	−0·0021	0·1047	−0·3308	0·1583
6	−0·1165	−0·0795	0·0252	−0·3872	0·0609	−0·3235
7	0·0784	0·0124	−0·0016	0·0019	−0·0023	−0·4459
8	0·1851	−0·3301	0·0155	−0·1830	−0·0466	0·3101
9	−0·3331	0·2608	0·0065	−0·1285	−0·0941	0·1867
10	0·1415	0·0435	−0·0042	0·0226	0·3122	−0·2563
11	0·1126	0·0667	−0·0259	0·3943	0·1852	−0·1904
12	−0·1960	0·1816	0·0130	−0·2280	−0·1837	0·0067
13	0·2663	−0·1949	0·0147	−0·2320	0·2795	0·2988
14	−0·0534	0·0305	−0·0218	0·3641	−0·1842	−0·3552
15	−0·2816	−0·1382	0·0039	−0·0366	−0·2989	−0·0445
16	−0·2615	−0·3459	−0·0325	0·1822	0·2344	0·0246
17	0·2044	0·2102	−0·4855	−0·1198	−0·0563	−0·0018
18	0·4301	0·1922	0·0070	0·0581	0·2917	0·0336
19	0·1875	0·1993	0·5116	−0·0475	−0·0412	−0·0014
20	0·1223	0·1652	−0·4822	−0·1296	−0·1779	−0·0227
21	−0·2748	−0·3435	−0·0268	0·1806	0·2715	0·0332
22	0·0943	0·1465	0·5143	−0·0558	−0·1631	−0·0223

TABLE VIII
(*Continued*)

Orbital	19	20	21	22
Energy	12·3311	13·2221	13·6839	14·1340
Atom				
1	0·2718	−0·2725	0·1226	0·1524
2	−0·2935	0·2720	−0·1217	−0·1526
3	0·2063	−0·2559	0·1334	0·1930
4	0·0019	0·2258	−0·1731	−0·3222
5	−0·0580	−0·2277	0·1777	0·3210
6	−0·1620	0·2570	−0·1358	−0·1925
7	−0·1199	−0·0150	0·0936	0·2913
8	0·2051	−0·1949	−0·0278	−0·3506
9	−0·3152	0·1874	0·0496	0·3433
10	0·2240	0·0195	−0·1057	−0·2880
11	0·0974	0·2640	−0·0925	0·2454
12	−0·2882	−0·3141	0·1926	−0·2401
13	0·0734	0·2844	−0·0962	0·2010
14	0·1054	−0·2477	0·0340	−0·2250
15	0·4132	0·1018	−0·3113	0·1499
16	−0·0958	0·1484	0·4229	−0·1045
17	−0·0655	−0·1820	−0·3422	0·0675
18	−0·3245	−0·0644	0·1810	−0·0786
19	−0·0716	−0·1819	−0·3397	0·0668
20	0·2108	0·2055	0·2949	−0·0477
21	−0·2674	−0·2143	−0·2778	0·0406
22	0·2056	0·2054	0·2967	−0·0481

Energy terms		Bond	Bond order	Bond	Bond order
c.r.	825·2842	1— 2	0·4489	11—12	0·8158
σ-b.e.	— 92·5789	1— 6	0·8430	12—13	0·4277
π-t.e.	—856·9670	2— 3	0·8432	12—15	0·2602
π-b.e.	— 31·6829	3— 4	0·4155	13—14	0·8508
t.e.	—124·2618	4— 5	0·5533	15—16	0·2503
h.a.	—195·2618	4— 7	0·6286	15—18	0·9313
		5— 6	0·4161	16—17	0·6390
		5—10	0·6272	16—19	0·6499
		7— 8	0·6342	17—22	0·6779
		8— 9	0·5471	19—20	0·6650
		8—11	0·4174	20—21	0·6700
		9—10	0·6379	21—22	0·6579
		9—14	0·4073		

TABLE IX

2-(2-Naphthacenyl)butadiene (*9*)

Orbital	1	2	3	4	5	6
Energy	−3·0618	−2·5200	−1·8491	−1·1884	−0·7563	−0·2769
Atom						
1	0·1182	−0·2134	0·2434	−0·2853	0·0754	−0·3269
2	0·1182	−0·2132	0·2449	−0·2733	−0·1588	−0·2793
3	0·1515	−0·2329	0·2140	−0·1734	−0·2412	−0·0812
4	0·2661	−0·3040	0·1421	0·0464	−0·2051	0·2804
5	0·2660	−0·3047	0·1366	0·0157	0·2451	0·2187
6	0·1515	−0·2332	0·2107	−0·1974	0·1964	−0·1637
7	0·2536	−0·1780	−0·0271	0·1853	−0·3019	0·2141
8	0·3343	−0·0613	−0·2201	0·2841	−0·2322	−0·0004
9	0·3337	−0·0646	−0·2366	0·2266	0·2774	−0·0185
10	0·2533	−0·1798	−0·0384	0·1322	0·3559	0·1488
11	0·2644	0·1022	−0·1787	0·0789	−0·3351	−0·1972
12	0·2906	0·2572	−0·1300	−0·1228	−0·2551	−0·2594
13	0·2866	0·2418	−0·1816	0·2262	0·1743	−0·2173
14	0·2625	0·0936	−0·2164	−0·0233	0·3064	−0·1754
15	0·1852	0·2761	0·1316	−0·1063	−0·2054	0·0896
16	0·1707	0·3287	0·3037	−0·0689	−0·0822	0·2823
17	0·1478	0·2596	0·1434	−0·2488	0·1119	0·3403
18	0·1736	0·2358	0·0143	−0·2890	0·1869	0·1789
19	0·0897	0·2309	0·4157	0·3045	0·0507	−0·0157
20	0·0395	0·1223	0·2991	0·3516	0·1020	−0·2906
21	0·0224	0·0760	0·2099	0·2817	0·0901	−0·2871
22	0·0464	0·1346	0·2827	0·2419	0·0500	−0·0156

Orbital	7	8	9	10	11	12
Energy	−0·1287	0·5997	0·9622	1·2353	2·2360	8·9023
Atom						
1	−0·1921	0·0368	−0·3383	−0·0180	−0·1854	0·1855
2	0·1988	0·2644	0·0367	−0·2460	0·1774	0·1774
3	0·3324	0·1988	0·2517	−0·1594	0·2085	−0·2086
4	0·2156	−0·1564	0·2216	0·2264	−0·1498	−0·1498
5	−0·2217	−0·2349	0·2145	0·1800	0·1640	−0·1640
6	−0·3300	−0·1443	−0·2808	0·1501	−0·2071	−0·2072
7	0·1925	−0·0934	−0·1729	0·1380	−0·3705	0·3705
8	0·0023	0·0752	−0·4144	−0·1551	−0·0076	−0·0077
9	−0·0009	0·2773	−0·0681	−0·3438	−0·0134	0·0134
10	−0·1962	0·0126	0·1962	−0·1588	0·3652	0·3652
11	−0·1896	−0·1109	−0·1699	0·0824	0·3827	−0·3827

TABLE IX
(*Continued*)

Orbital	7	8	9	10	11	12
Energy	−0·1287	0·5997	0·9622	1·2353	2·2360	8·9023
Atom						
12	−0·2156	−0·1530	0·2184	0·1979	0·1683	0·1683
13	0·2195	−0·0294	0·1898	0·3045	−0·1412	0·1411
14	0·1943	0·2179	0·1702	0·0072	−0·3689	−0·3689
15	−0·3300	−0·0154	0·2748	−0·2596	−0·2420	0·2421
16	−0·2012	0·0922	0·0554	−0·2933	−0·2032	−0·2032
17	0·1925	−0·1257	−0·3123	−0·1426	0·1712	−0·1712
18	0·3284	−0·1667	−0·2717	0·0905	0·2142	0·2142
19	−0·0171	0·3133	−0·0435	0·2595	0·0511	−0·0512
20	0·1846	−0·3464	0·0309	−0·1427	−0·0115	−0·0116
21	0·1899	−0·4370	0·0438	−0·2237	−0·0299	0·0300
22	−0·0057	0·3897	−0·0776	0·4033	0·1343	0·1344

Orbital	13	14	15	16	17	18
Energy	9·9029	10·1762	10·5380	11·2670	11·4150	11·8949
Atom						
1	−0·0176	0·3383	0·0369	−0·1917	0·3271	0·0752
2	0·2459	0·0364	−0·2645	−0·1991	−0·2791	0·1589
3	−0·1596	−0·2516	0·1989	0·3324	0·0809	−0·2411
4	−0·2260	0·2219	0·1565	−0·2153	0·2806	0·2051
5	0·1796	−0·2145	−0·2350	−0·2221	−0·2184	0·2451
6	−0·1503	−0·2808	0·1443	0·3298	−0·1641	−0·1962
7	0·1381	0·1726	−0·0934	0·1924	−0·2144	−0·3018
8	0·1546	−0·4145	−0·0753	−0·0025	−0·0004	0·2322
9	−0·3435	0·0683	0·2776	−0·0009	0·0186	0·2775
10	0·1589	0·1960	−0·0127	0·1965	0·1485	−0·3560
11	0·0824	0·1698	−0·1110	−0·1894	0·1973	−0·3352
12	−0·1975	0·2185	0·1532	0·2154	−0·2595	0·2552
13	0·3042	−0·1901	−0·0298	0·2197	0·2170	0·1742
14	−0·0072	0·1702	−0·2177	−0·1945	−0·1753	−0·3064
15	−0·2599	−0·2745	−0·0149	−0·3302	−0·0893	−0·2054
16	0·2932	0·0551	−0·0927	0·2014	0·2821	0·0821
17	−0·1424	0·3125	−0·1254	0·1921	−0·3406	0·1119
18	−0·0906	−0·2717	0·1668	−0·3281	0·1794	−0·1869
19	0·2599	0·0432	0·3130	−0·0168	0·0161	0·0509
20	0·1431	0·0308	0·3465	−0·1849	−0·2904	−0·1021
21	−0·2242	−0·0436	−0·4370	0·1901	0·2868	0·0901
22	−0·4037	−0·0772	−0·3892	0·0054	−0·0160	−0·0502

TABLE IX
(*Continued*)

Orbital	19	20	21	22
Energy	12·3264	12·9872	13·6584	14·2005
Atom				
1	−0·2852	0·2435	0·2133	−0·1181
2	0·2732	−0·2450	−0·2132	0·1181
3	−0·1734	0·2140	0·2328	−0·1515
4	−0·0465	−0·1421	−0·3041	0·2661
5	0·0156	0·1367	0·3048	−0·2660
6	0·1974	−0·2108	−0·2332	0·1514
7	0·1854	−0·0271	0·1781	−0·2536
8	−0·2840	0·2202	−0·0613	0·3344
9	0·2264	−0·2367	0·0646	−0·3337
10	−0·1321	0·0384	−0·1798	0·2533
11	0·0789	−0·1786	−0·1022	−0·2644
12	0·1228	0·1298	0·2573	0·2907
13	−0·2264	−0·1815	−0·2419	−0·2866
14	0·0235	0·2164	0·0936	0·2626
15	−0·1060	0·1319	−0·2761	−0·1852
16	0·0685	−0·3040	0·3287	0·1706
17	−0·2486	0·1437	−0·2596	−0·1478
18	0·2890	−0·0145	0·2358	0·1736
19	0·3049	0·4156	−0·2307	−0·0897
20	−0·3517	−0·2988	0·1222	0·0394
21	0·2816	0·2096	−0·0758	−0·0224
22	−0·2421	−0·2825	0·1345	0·0463

Energy terms		Bond	Bond order	Bond	Bond order
c.r.	827·2314	1— 2	0·4140	11—12	0·7095
σ-b.e.	— 92·4786	1— 6	0·8647	12—13	0·4879
π-t.e.	—858·3743	2— 3	0·8647	12—15	0·3827
π-b.e	— 31·1428	3— 4	0·3784	13—14	0·7135
t.e.	—123·6214	4— 5	0·4944	13—18	0·3719
h.a.	—194·6214	4— 7	0·7057	15—16	0·8348
		5— 6	0·3786	16—17	0·3951
		5—10	0·7054	16—19	0·2626
		7— 8	0·5416	17—18	0·8709
		8— 9	0·5399	19—20	0·2446
		8—11	0·5353	19—22	0·9325
		9—10	0·5424	20—21	0·9693
		9—14	0·5337		

energy and h.a. = heat of atomization at 25°C. Charge densities are not explicitly presented since all compounds presented here are alternant hydrocarbons, and therefore, all charge densities equal unity. The procedures for using these tables to obtain ionization potentials, bond energies, resonance energies, *etc.* have previously been presented[5,6].

Thanks are due to Prof. M. J. S. Dewar for supplying a copy of his program, and also to Prof. J. Ghosez. Calculations were made on an IBM 360—40 computer on time donated by the Centre de Calcul, University of Louvain.

REFERENCES

1. Chung A. L. H., Dewar M. J. S.: J. Chem. Phys. *42*, 756 (1965).
2. Dewar M. J. S., Gleicher G. J.: J. Am. Chem. Soc. *87*, 685 (1965).
3. Dewar M. J. S., Hashmall J. A., Vernier C. G.: J. Am. Chem. Soc. *90*, 1953 (1968).
4. Dewar M. J. S., Llano de C.: J. Am. Chem. Soc. *91*, 789 (1969).
5. Dewar M. J. S., Trinajstić N.: This Journal *35*, 3136 (1970).
6. Dewar M. J. S., Trinajstić N.: This Journal *35*, 3484 (1970).