

Die Produkte der irreduziblen Darstellungen von D_{2d} genügen der Bedingung $A_2 \times E = B_1 \times E = E$, so dass die einfach angeregten Konfigurationen $8e(\pi^*) \leftarrow 1a_2(\pi)$ und $8e(\pi^*) \leftarrow 1b_1(\pi)$ sowie die dazugehörigen Übergangsdichten zur gleichen irreduziblen Darstellung E gehören. Dies und die Quasi-Alternanz der MO-Paare ψ_1, ψ_{-1} und ψ_2, ψ_{-2} führt, wie eine einfache Rechnung zeigt, notwendigerweise dazu, dass auch die Differenzen der Austausch-Integrale $K_{r,s}$ Null bzw. sehr klein werden.

Man kommt somit zum Schluss, dass im Falle von **1** wegen der D_{2d} -Symmetrie des Systems und der durch die Spirokonjugation erzwungenen Sequenz... $1b_1(\pi)$, $1a_2(\pi)$, $8e(\pi^*)$... der MO, sowie deren Quasi-Alternanz, die Klammerausdrücke in (2) verschwinden und deshalb aus den genannten Gründen die einfache Beziehung (1) ausnahmsweise gelten muss. Wie die Daten der Tabelle zeigen, ist dies der Fall.

Vorliegende Mitteilung ist Teil Nr. 59 aus dem Projekt 2.477.71 des *Schweizerischen Nationalfonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung*. Wir danken den Firmen *Ciba-Geigy AG*, *F. Hoffmann-La Roche & Co. AG* und *Sandoz AG* für ihre Unterstützung.

LITERATURVERZEICHNIS

- [1] *T. Koopmans*, *Physica* **1**, 104 (1934).
- [2] *C. C. J. Roothaan*, *Rev. Mod. Phys.* **23**, 69 (1951); *J. A. Pople*, *Proc. Roy. Soc. A* **68**, 81 (1955); *J. N. Murrell*, 'The Theory of the Electronic Spectra of Organic Molecules', Methuen & Co. Ltd., London, 1963; *L. Salem*, 'Molecular Orbital Theory of Conjugated Systems', W. A. Benjamin Inc., New York, 1966.
- [3] *E. Haselbach & A. Schmelzer*, *Helv.* **54**, 1575 (1971).
- [4] *E. Haselbach & A. Schmelzer*, *Helv.* **55**, 1745, 3130 (1972); *E. Haselbach, Z. Lanyiova & M. Rossi*, *Helv.* (im Druck); *E. Heilbronner, J. P. Maier & E. Haselbach*, 'UV-Photoelectron Spectra of Heterocyclic Compound's in 'Physical Methods in Heterocyclic Chemistry' (A. Katritzky, Edit.), Academic Press (im Druck).
- [5] *M. F. Semmelhack, J. S. Foos & S. Katz*, *J. Amer. chem. Soc.* **94**, 8637 (1972).
- [6] *C. Batich, E. Heilbronner, E. Rommel & M. F. Semmelhack*, *J. Amer. chem. Soc.*, in Vorbereitung.
- [7] *H. E. Simmons & T. Fukunaga*, *J. Amer. chem. Soc.* **89**, 5208 (1967).
- [8] *R. Hoffmann, A. Imamura & G. Zeiss*, *J. Amer. chem. Soc.* **89**, 5215 (1967).

First International Meeting on Tryptophan Metabolism: Biochemistry, Pathology and Regulation

organized by:

ISTRY International Study Group for Tryptophan Research

Padova, May 2–4, 1974

Further informations: Sign. Dr. Graziella Allegri, Istituto di Chimica Farmaceutica, Università, 35100 Padova, via Marzolo, 5.

3rd Symposium on Ion-Exchange

organized by the Hungarian Chemical Society

Belatonszéplak, May 28–31, 1974

Further informations: Hungarian Chemical Society, Organizing Committee, 3rd Symposium on Ion Exchange, H-1368 *Budapest*, P.O.B. 240

Fourth International Conference on Thermal Analysis

Budapest, July 8–13, 1974

Fourth informations: Dr. Ferenc Paulik, c/o Hungarian Chemical Society, H-1061 *Budapest* Anker köz 1.

10ème Symposium international de chromatographie

organisé par le: Groupement pour l'avancement des méthodes spectroscopiques et physico-chimiques d'analyse (G.A.M.S.)

Barcelone, Palais des Congrès, 30 septembre–4 octobre 1974.

Ceux qui désirent soumettre des mémoires au choix du Comité Scientifique sont invités à faire parvenir *avant le 31 janvier 1974* un résumé de 200 à 400 mots en anglais ou en français.

Les manuscrits, rédigés en anglais ou en français, devront parvenir *avant le 30 avril 1974*.

Toute la correspondance doit être envoyée à l'adresse suivante: M. le Directeur du G.A.M.S. 10, rue du Delta, 75009 *Paris*

Symposium 'Permanent Press'

School of Textiles, University of Bradford, Yorkshire, 18th and 19th December 1973

Further informations: Dr. Peter Ellis, School of Textiles, University of Bradford, GB *Bradford*, Yorkshire BD7 1DP.

7th Jerusalem Symposium an International Symposium on:

'Molecular Pharmacology'

under the auspices of the Israel Academy of Sciences and Humanities
Jerusalem, Israel, April 1st to 5th 1974

The aim of this meeting will be the confrontation of the present status of our knowledge about the theoretical and experimental aspects of the problem. Emphasis will be laid on the possibilities of the quantum-mechanical computations in this field. The collaboration of theoreticians and experimentalists is particularly wellcome at this symposium.

Correspondence and applications should be sent to Prof. E. D. Bergmann, Dept. of Organic Chemistry, the Hebrew University, Jerusalem, Israel, and Prof. B. Pullman, Fondation Edmond de Rothschild, 13, rue P. et M. Curie, Paris 5è, France.

V1th Symposium on Organic Sulphur Chemistry

School of Physical and Molecular Sciences, Bangor, July 1-5, 1974

The Honorary President: Sir Derek Barton, F.R.S.

The Chairman: Prof. C. J. M. Stirling.

Further informations: V1th Organic Sulphur Symposium, School of Physical and Molecular Sciences, University College of North Wales, Bangor, LL57 2 UW, Caerns, U.K.

Cinetique des reactions dans les systemes chimiques hétérogènes

25ème Réunion annuelle de la Société de Chimie physique
9-12 juillet 1974, Dijon, France

Relations entre aspects thermodynamiques et cinétiques, problèmes de transfert. Loi d'évolution et morphologie. Formation de phases solides nouvelles, états intermédiaires. Réarrangements des espèces formées, annihilation des défauts. Constantes de vitesse: influence des variables intensives, mécanismes et réactions solide-solide. Influence des traitements préliminaires, des impuretés, des radiations, des défauts de *Wadsley*, des dislocations et joints de grains.

Propositions de communications: titre et résumé d'au moins 250 mots, avant le 15 octobre 1973.

Pour tous renseignements s'adresser au: Dr. Troyanowsky, Secrétaire général, Société de Chimie physique, 10, rue Vauquelin, 75231 Paris, Cedex 05.

IUPAC International Symposium on Macromolecules (SIM)

July 26–31, 1974, Rio de Janeiro, Brazil

Inquiries and other correspondence concerning the Symposium should be addressed to: Prof. Eloisa Biasotto Mano, Simpósio Internacional de Macromoléculas (SIM), Academie Brasileira de Ciências, Caixa Postal 229, 20.000 Rio de Janeiro, GB, Brazil.

VIth International Conference on Magnetic Resonance in Biological Systems

Kandersteg, Switzerland, September 16–21, 1974

The purpose of the conference is to bring together scientists of many disciplines who are concerned with the application of magnetic resonance in biochemistry, molecular biology, biophysics, pharmacology, and medicine.

Further informations: Prof. Dr. K. Wüthrich, Institut für Molekularbiologie und Biophysik, ETH-Hönggerberg, CH-8049 Zürich.

Bei der Redaktion eingelaufene Bücher:

(Die Redaktion verpflichtet sich nicht zur Besprechung der eingesandten Werke)

Livres reçus par la Rédaction:

(La rédaction ne s'engage pas à publier des analyses des ouvrages qui lui sont soumis)

Fundamental Aspects and Recent Developments in Optical Rotatory Dispersion and Circular Dichroism. Editors: F. Ciardelli & P. Salvadori. Verlag: Heyden & Son Ltd., London, New York, Rheine. £11.00.

Basic Organic Reactions. W. McCrae. Verlag: Heyden & Son Ltd., London, New York, Rheine. £3.60/1.95.

Aims, Methods and Assessment in Advanced Science Education. Edited by D. E. Billing & B. S. Furniss. Verlag: Heyden & Son Ltd., London, New York, Rheine.

A Games Approach to Mastery of the Chemical Elements. Element Cards by Joseph Lipson. Element Cards Booklet. Verlag: Joseph Lipson, Box 412, Northfield, Illinois 600093. £2.40.

Hungarian Journal of Industrial Chemistry, Volume 1, 1973, Number 2. Edited by: The Hungarian Oil Gas Research Institute (MAFKI), the Research Institute for Heavy Chemical Industries (NEVIKI), the Research Institute of Technical Chemistry of the Hungarian Academy of Sciences (VVE), Veszprém (Hungary).

Journal für Signalaufzeichnungsmaterialien, Band 1, Heft 1, 1973. Herausgegeben im Auftrage der Chemischen Gesellschaft der Deutschen Demokratischen Republik, Akademie-Verlag, Berlin.

Molecular Biology Reports, Volume 1, No. 1, 1973. An International Journal for Rapid Communications in Molecular Biology. Editor-in-Chief: H. Bloemendal, Nijmegen/The Netherlands. Verlag: D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, Holland/Boston, USA.

Revue Roumaine de Physique, Tome 18, No. 1, 1973. Éditions de l'Académie de la République Socialiste de Roumanie, Bucarest.

Chemical Engineering in Practice, by G. Nonhebel & M. Berry. Wykeham Publications (London) Ltd., London. £3.00/2.25.