

Raumsparende Darstellung von Moleküldiagrammen bei vergleichenden quantenchemischen Untersuchungen

(Kurze Notiz)

Von

O. E. Polansky

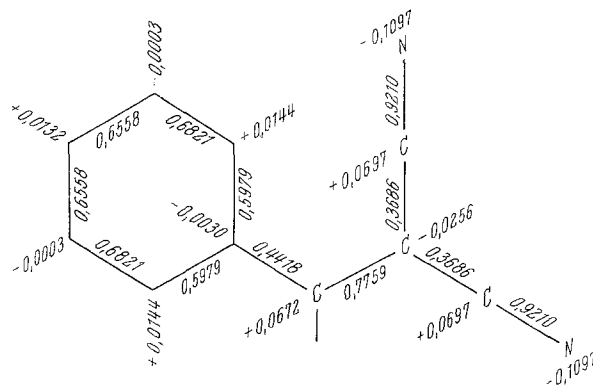
Aus dem Organisch-Chemischen Institut der Universität Wien

(Eingegangen am 10. Oktober 1963)

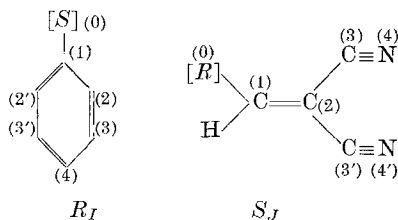
Die mit Hilfe quantenchemischer Verfahren errechneten π -Elektronenstrukturen werden üblicherweise in Form von Moleküldiagrammen dargestellt¹. Bei systematischen und vergleichenden Untersuchungen von Verbindungsklassen ist für die Darstellung der Ergebnisse fast stets eine größere Anzahl von Moleküldiagrammen nötig. Sehr oft werden aber gerade in diesen Fällen die berechneten Verbindungen durch Kombination einiger weniger Teilstrukturen R_I bzw. S_J erhalten; die Gesamtheit der untersuchten Verbindungen läßt sich dann durch die allgemeine Formel $R_I - S_J$ darstellen, worin I und J Laufzahlen sind. In diesen Fällen können die gezeichneten Moleküldiagramme leicht durch die tabellarische Wiedergabe der π -Elektronen-Nettoladungen q_i , der π -Bindungsordnungen p_{ij} und (wenn gewünscht) der freien Valenzen F_j ersetzt werden, vorausgesetzt, daß man die Bezifferung der Atome in den Resten R_I und in den Strukturen S_J angibt. Werden insgesamt r Reste R_I mit s Strukturen S_J kombiniert, so erfordert dies die Wiedergabe von $(r + s)$ Formelbildern der R_I und S_J anstatt von $(r \cdot s)$ Moleküldiagrammen der Verbindungen $R_I - S_J$, wobei eine weitere Raumsparnis durch den Umstand erzielt wird, daß die Formelbilder für die einzelnen R_I bzw. S_J weniger umfangreich als die Moleküldiagramme für $R_I - S_J$ sind.

¹ C. A. Coulson, „Valence“, Oxford 1952, S. 255; R. Daudel, „Structure électronique des molécules“, Paris 1962, S. 176ff.; u. a. m.

Das folgende Beispiel soll das Gesagte verdeutlichen. Für das Benzalodinitril folgt nach einfachen LCAO—MO-Rechnungen² das nachstehende Moleküldiagramm*:



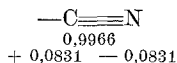
Seine tabellarische Darstellung erfordert die Zerlegung dieses Moleküls in zwei Teilstrukturen, sagen wir



und die Angabe der q_i und p_{ij} wie in folgender Tabelle:

Verbindung	des Teils	π -Elektronenstruktur							
		π -Elektronen-Nettoladung $q_i \cdot 10^4$				π -Bindungsordnung $p_{ij} \cdot 10^4$			
		q_1	q_2	q_3	q_4	p_{01}	p_{12}	p_{23}	p_{34}
R_I-S_J	R_I	-0030	+0144	-0003	+0132	4418	5979	6821	6558
	S_J	+0672	-0256	+0697	-1097	4418	7759	3686	9210

* Das zweite π -Elektronenpaar der $C\equiv N$ -Gruppe ist darin nicht berücksichtigt; seine Ladungsverteilung ist²:



² O. E. Polansky, P. Schuster und F. Wessely, Mh. Chem. **95** (1964), im Druck.

Wie man sich leicht überzeugen kann, sind die so tabellierten Angaben vollständig und gestatten leicht, das Moleküldiagramm zu rekonstruieren. Durch die für eine bestimmte Teilstruktur R_I bzw. S_J feste Numerierung der Atome wird auch die Verfolgung der Ladungsdichten an bestimmten Atomen oder die der Bindungsordnungen bestimmter Bindungen erleichtert.

Herrn Prof. Dr. *F. Wessely* und Herrn Prof. Dr. *F. Kuffner* danke ich für Anregung und Diskussion.