

Benzol- und peripher-cisoidale Dien-Charakterordnungen einiger aromatischer Kohlenwasserstoffe

(Kurze Mitteilung)

Von

H. Sofer

Aus dem Institut für Theoretische Chemie der Universität Wien, A-1090,
und aus dem Institut für Physikalische Chemie der Technischen Hochschule
Wien, A-1060

(Eingegangen am 29. Januar 1968)*

Die Charakterordnungen von Benzolringen und *exo-cisoider* C₄-Einheiten von 7 kondensierten aromatischen Kohlenwasserstoffen wurden berechnet.

The character orders of benzene rings and of *exo-cisoidic* C₄-units of 7 aromatic hydrocarbons were calculated.

Im Zusammenhang mit anderen Untersuchungen¹ erschien es wünschenswert, ergänzend zu einer früheren Arbeit² die Charakterordnungen der Benzolringe (ρ_{benzoid}) und der peripheren C₄-Bruchstücke, deren Zentren *cisoid* angeordnet sind ($\rho_{\text{dienoid}}^{\text{exo-cisoid}}$), in den unten angegebenen Verbindungen zu berechnen. Für die ersten 5 Verbindungen lagen die Dichtematrizen (Matrizen aller Bindungsordnungen p) in der Literatur³

* Auf Wunsch des Autors erst jetzt veröffentlicht (Red.).

¹ H. Sofer, O. E. Polansky und G. Derflinger, Mh. Chem. **99**, 1879 (1968).

² O. E. Polansky und G. Derflinger, Internat. J. Quantum Chem. **1**, 379 (1967).

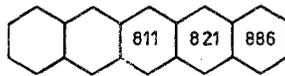
³ Heilbronner-Straub, Hückel Molecular Orbitals, Springer-Verlag: Berlin-Heidelberg-New York 1966.

vor, daher konnten die abgeleiteten Formeln² unmittelbar verwendet werden:

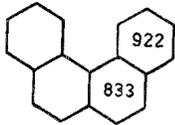
$$\rho_{benzoid} = \frac{1}{9} (2 \sum p_{ortho} - \sum p_{para})$$

$$\rho_{dienoid} = \frac{1}{2\sqrt{5}} [2(p_{12} + p_{34}) + (p_{23} - p_{14})];$$

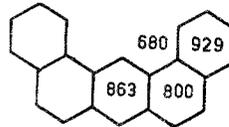
für die übrigen Verbindungen wurden die Charakterordnungen aus den Matrizen c (bestehend aus den Eigenvektoren der topologischen Matrix



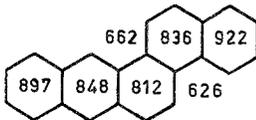
Pentacen



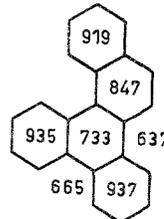
Benzo[c]phenanthren, RRI 5255
„3,4-Benzophenanthren“



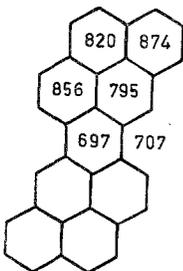
Dibenz[a,j]anthracen, RRI 6382
„1,2—7,8-Dibenzo-anthracen“



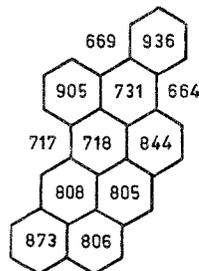
Benzo[b]chrysen, RRI 6379
„3,4-Benzo-tetraphen“



Benzo[g]chrysen, RRI 6385
„1,2—3,4-Dibenzo-phenanthren“



Dinaphtho[2,1,8,7-defg: 2',1',8',7'-
opqr]pentacen, RRI 7621
„1,14—7,8-Dibenzo-peropyren“



Anthra[2,1,9,8,7-defghi]benzo[qr]-
pentacen
„1,12—2,3—9,10-Tribenzo-anth-
anthren“

des Gesamtmoleküls) und m (Matrix der *Hückel*-Koeffizienten der Bruchstücke I, II, . . . , L , . . .) gemäß

$$f = m^+ c, \quad r_L = \frac{2}{n_L} \sum_{\mu \text{ bindend}} \sum_{s \text{ in } L} f_{s\mu}^2,$$

$$\rho = 2r - 1$$

berechnet². Die Ergebnisse sind in der üblichen Weise² in den Charakterogrammen angegeben.

Dem Vorstand des Instituts für Numerische Mathematik der Techn. Hochschule Wien, Herrn Prof. Dr. *H. J. Stetter*, danke ich für zur Verfügung gestellte Rechenzeiten an der elektronischen Rechenanlage IBM 7040 der Techn. Hochschule Wien, Herrn Prof. Dr. *O. E. Polansky* und Herrn Dr. *G. Derflinger* für anregende Diskussionen.