

Prom. Nr. 3390

**Über ein vereinfachtes
semiempirisches Verfahren
zur Behandlung der Wechselwirkung
zwischen π -Elektronen**

Von der
EIDGENÖSSISCHEN TECHNISCHEN
HOCHSCHULE IN ZÜRICH

zur Erlangung
der Würde eines Doktors der Naturwissenschaften
genehmigte

PROMOTIONSARBEIT

vorgelegt von
EUGEN WELTIN
dipl. Naturwissenschaftler E. T. H.
von Zürich

Referent: Herr Prof. Dr. E. Heilbronner
Korreferent: Herr Prof. Dr. J. D. Dunitz

Juris-Verlag Zürich
1963

Zusammenfassung

1. Das semiempirische C.I.-Verfahren von Pople, Pariser und Parr wurde zur Deutung des Spektrums des Radialens herangezogen und mit dem Hückel'schen Verfahren, sowie der Näherung lose gekoppelter Doppelbindungen verglichen.

2. Als Vereinfachung des C.I.-Verfahrens wurden die Elemente der C.I.-Matrix auf die drei Parameter β' , γ'_{11} und γ'_{12} zurückgeführt und die Zahl der berücksichtigten einfach angeregten Konfigurationen auf neun beschränkt. Die Brauchbarkeit des reduzierten Verfahrens wurde an Hand einiger ausgewählter Kohlenwasserstoffe geprüft, indem die berechneten Uebergangsenergien mit den spektroskopisch gefundenen Bandenlagen verglichen wurden.

3. Das reduzierte Verfahren wurde für eine elektronische Rechenanlage IBM 1620 programmiert, wobei das Programm möglichst flexibel und die Rechenzeit möglichst klein gehalten wurde.

Der Martha-Selve-Gerdtzen-Stiftung danke ich für die Gewährung eines Stipendiums.