

Diss. Nr. 3897

Anwendung der Valenzstrukturmethode auf geladene π -Elektronensysteme

ABHANDLUNG

zur Erlangung
der Würde eines Doktors der Naturwissenschaften

der

EIDGENÖSSISCHEN TECHNISCHEN
HOCHSCHULE ZÜRICH

vorgelegt von

HANS THEODOR GRUNDER

dipl. Naturwissenschaftler ETH

geboren am 5. März 1937
von Vechigen (Kanton Bern)

Angenommen auf Antrag von
Prof. Dr. E. Heilbronner, Referent
Prof. Dr. W. Simon, Korreferent

Juris Druck + Verlag Zürich
1966

5. ZUSAMMENFASSUNG

- 1) Die VB-Methode wurde auf geladene π -Elektronensysteme angewandt.
- 2) Die aus den Energien berechneten Ionisationspotentiale, Delokalisierungsenergien und UV-Anregungsenergien wurden mit den entsprechenden experimentellen Grössen verglichen.
- 3) Aus den berechneten Eigenfunktionen wurden Elektronen- und Spindichten abgeleitet und mit experimentellen Daten verglichen.
- 4) Für Benzol, Naphthalin, Anthracen und Phenanthren wurden Lokalisierungsenergien für den Uebergangszustand bei einer elektrophilen Substitution berechnet und mit den gemessenen Reaktivitätskoeffizienten verglichen.