

Tab. 4-1. Atomorbitalkoeffizienten in den Molekülorbitalen konjugierter Systeme (nach [7]).

Ethylen	ψ_2^*	0.707	-0.707	LUMO							
	ψ_1	0.707	0.707	HOMO							
Allyl	ψ_3^*	0.500	-0.707	0.500	LUMO im Anion						
	ψ_2	0.707	0	-0.707	HOMO im Anion, LUMO im Kation						
	ψ_1	0.500	0.707	0.500	HOMO im Kation						
Butadien	ψ_4^*	0.371	0.600	0.600	-0.371						
	ψ_3^*	0.600	-0.371	-0.371	0.600	LUMO					
	ψ_2	0.600	0.371	-0.371	-0.600	HOMO					
	ψ_1	0.371	0.600	0.600	0.371						
Pentadienyl	ψ_5^*	0.288	-0.500	0.576	-0.500	0.288					
	ψ_4^*	0.500	-0.500	0	0.500	0.500	LUMO im Anion				
	ψ_3	0.576	0	0.576	0	0.576	HOMO im Anion, LUMO im Kation				
	ψ_2	0.500	0.500	0	-0.500	-0.500	HOMO im Kation				
	ψ_1	0.288	0.500	0.576	0.500	0.288					
Hexatrien	ψ_6^*	0.232	-0.418	0.521	-0.521	0.418	-0.232				
	ψ_5^*	0.418	-0.521	0.232	0.232	-0.521	0.418				
	ψ_4^*	0.521	-0.232	-0.418	0.418	0.232	-0.521	LUMO			
	ψ_3	0.521	0.232	-0.418	-0.418	0.232	0.521	HOMO			
	ψ_2	0.418	0.521	0.232	-0.232	0.521	-0.418				
Heptatrienyl	ψ_1	0.232	0.418	0.521	0.521	0.418	0.232				
	ψ_7^*	0.191	-0.354	0.462	-0.500	0.462	-0.354	0.191			
	ψ_6^*	0.354	-0.500	0.354	0	-0.354	0.500	-0.354			
	ψ_5^*	0.462	-0.354	-0.191	0.500	-0.191	-0.354	0.462			
	ψ_4	0.500	0	-0.500	0	0.500	0	-0.500	{ LUMO im Anion HOMO im Anion LUMO im Kation HOMO im Kation		
	ψ_3	0.462	0.354	-0.191	-0.500	-0.191	0.354	0.462			
Octatetraen	ψ_2	0.354	0.500	0.354	0	-0.354	-0.500	-0.354			
	ψ_1	0.191	0.354	0.462	0.500	0.462	0.354	0.191			
	ψ_8^*	0.161	-0.303	0.408	-0.464	0.464	-0.408	0.303	-0.161		
	ψ_7^*	0.303	-0.464	0.408	-0.161	-0.161	0.408	-0.464	0.303		
	ψ_6^*	0.408	-0.408	0	0.408	-0.408	0	0.408	-0.408		
	ψ_5^*	0.464	-0.161	-0.408	0.303	0.303	-0.408	-0.161	0.464	LUMO	
	ψ_4	0.464	0.161	-0.408	-0.303	0.303	0.408	-0.161	-0.464	HOMO	
	ψ_3	0.408	0.408	0	-0.408	-0.408	0	0.408	0.408		
ψ_2	0.303	0.464	0.408	0.161	-0.161	-0.408	-0.464	-0.303			
ψ_1	0.161	0.303	0.408	0.464	0.464	0.408	0.303	0.161			