

Polycyclische Aromaten

Kohlenwasserstoffe und Fullerene

Von Prof. Dr. rer. nat. Maximilian Zander
Castrop-Rauxel



B. G. Teubner Stuttgart 1995

INHALTSVERZEICHNIS

Vorwort	5
1 Aromaten im Überblick: Strukturen und Eigenschaften	9
1.1 Benzol	9
1.2 Paracyclophane	12
1.3 Mehrkernige benzoide Kohlenwasserstoffe	16
1.4 Aromatizität	21
1.5 Sind die Fullerene polycyclische Aromaten ?	23
1.6 Heteroaromaten und mehrkernige nichtbenzoide Aromaten	33
2 Bauprinzipien polycyclischer aromatischer Kohlenwasserstoffe	35
2.1 Bi- und Oligo-aryle, Fluorene	35
2.2 Alternierende und nichtalternierende PAHs	37
2.3 Kata- und peri-kondensierte PAHs	42
2.4 "Kekulians" und "Non-Kekulians"	46
2.5 Nichtplanare PAHs	50
2.6 Isomerenzahlen und Größe (Ringzahl) alternierender PAHs	53
2.7 Nomenklatur von PAHs	56
3 Die Vielfalt der Polycyclenchemie	60
3.1 All-benzoide PAHs	60
3.2 Die Acene	67
3.3 Angular anellierte PAHs	72
3.4 Circumarene	79
3.5 Nichtalternierende PAHs	82
3.6 Die Fullerene	88
4 Die Theorie polycyclischer Aromaten	96
4.1 Semiempirische Quantenchemie der PAHs	96
4.2 Molekulare Topologie und Eigenschaften von PAHs	100
4.3 S,T-Isomere	107
4.4 Clars π -Sextett-Modell der PAHs	112
4.5 Theoretische Chemie der Fullerene	120

8	Inhaltsverzeichnis	
5	Polycyclische Aromaten in elektronischen Anregungszuständen	122
5.1	UV-Absorptionsspektren der PAHs	122
5.2	Fluoreszenz und Phosphoreszenz	126
5.3	Strahlungslose Übergänge	131
5.4	Termschema und photophysikalische Eigenschaften von PAHs	134
5.5	Excimere	140
5.6	Photophysikalische Eigenschaften von Fullerenen	141
6	Die chemische Reaktivität polycyclischer Aromaten	143
6.1	Substitutionsreaktionen	143
6.2	Additionsreaktionen	146
6.3	Hydrierung und Oxidation	150
6.4	Umlagerungen	153
6.5	Molekülverbindungen	156
7	Die Herstellung von polycyclischen Aromaten	158
7.1	Allgemeines	158
7.2	Synthesemethoden	163
7.3	Trenn- und Reinigungsmethoden	181
7.4	Konstitutionsbestimmung von PAHs	183
8	Die industrielle Bedeutung der polycyclischen Aromaten	188
8.1	Historisches und wirtschaftliche Aspekte	188
8.2	PAHs für die industrielle Synthesechemie	193
8.3	Steinkohlenteer: Zusammensetzung und Aufarbeitung	199
8.4	Technische Kohlenstoffprodukte	201
8.5	Fullerene: Anmerkungen zur Frage der praktischen Nutzung	211
9	Polycyclische Aromaten in der Umwelt	213
9.1	Bildungsmechanismen	213
9.2	Vorkommen, Emissionsquellen, Konzentrationen	218
9.3	Cancerogene PAHs	222
9.4	Mechanismen der Cancerogenese durch PAHs	225
9.5	Umweltanalytik der PAHs	229
10	PAHs im interstellaren Raum	234
	Literaturhinweise zu den einzelnen Abschnitten	235
	Sachverzeichnis	261