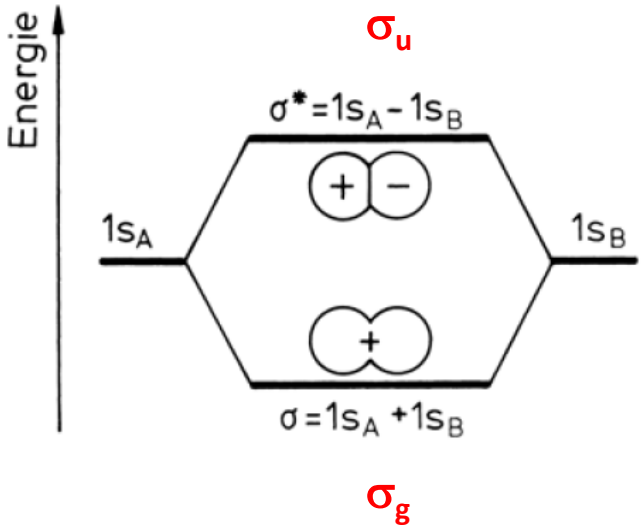
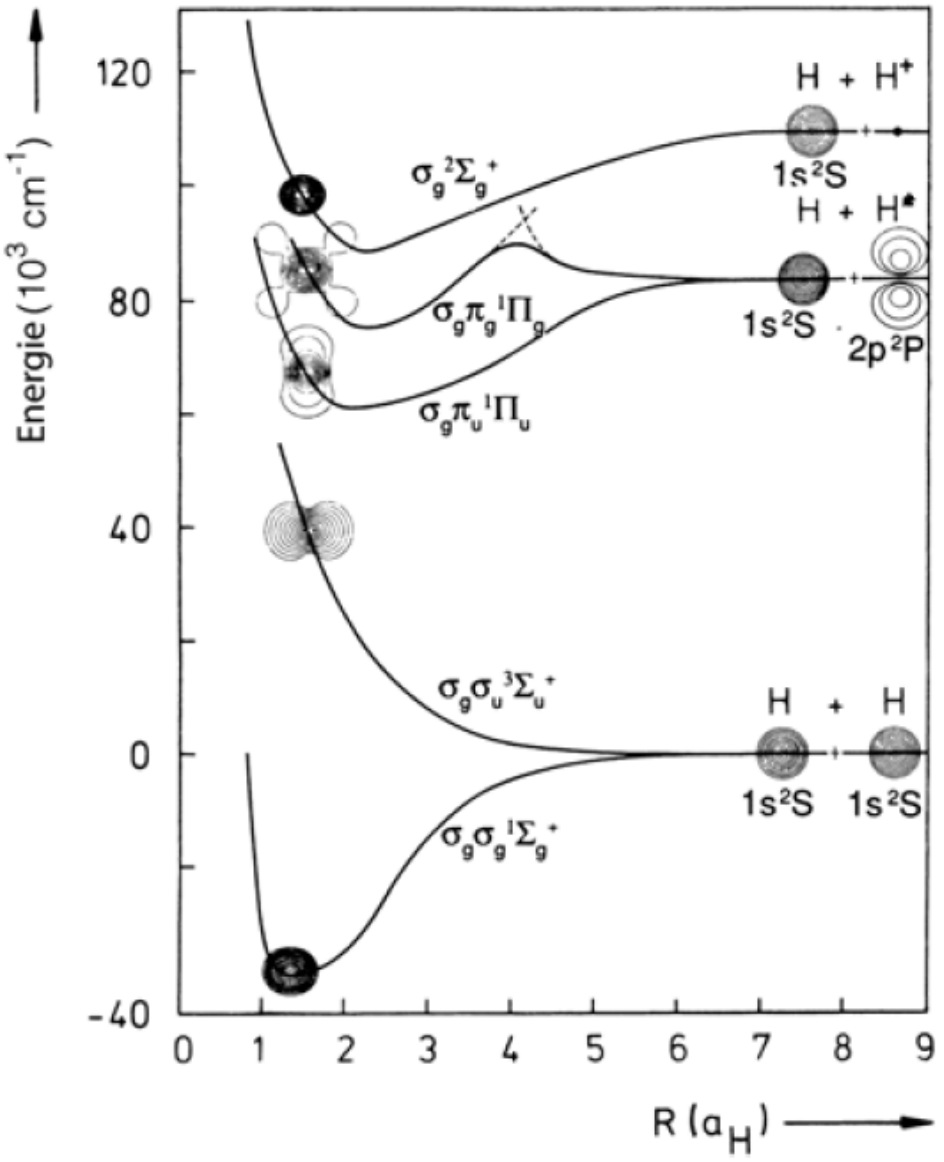
Molekülorbitale von H_2

Abb. 13.1. Potentialkurven und Elektronendichteverteilungen für Grund- und Anregungszustände von H_2 und H_2^+. Berechnet mit der Molekülorbital-Näherung nach Hund und Mulliken. Als Abstandseinheit ist der Bohrsche Radius $a_H = 0{,}529 \cdot 10^{-8}$ cm verwendet. Nach Hellwege





Haken, Wolf, Quantenchemie und Molekülspektroskopie

Molekülorbitale von H_2O

C_{2v}	E	C_2 (z)	σ_v(xz)	σ_v(yz)	Linear, rotations	quadratic
A_1	1	1	1	1	**z**	**x^2, y^2, z^2**
A_2	1	1	-1	-1	**R_z**	**xy**
B_1	1	-1	1	-1	**x, R_y**	**xz**
B_2	1	-1	-1	1	**y, R_x**	**yz**

	E	C_2	σ_{xz}	σ_{yz}
χ(2H1s)	2	0	0	2

$$\Gamma_{2H1s} = A_1 + B_2$$

	E	C_2	σ_{xz}	σ_{yz}
χ(O)	4	0	2	2

$$\Gamma_O = 2A_1 + B_1 + B_2$$

…mit den Orbitalen 2s (A1), $2p_z$ (A1), $2p_x$ (B1) und $2p_y$ (B2)

Molekülorbitale von H_2O

C_{2v}, 2mm	E	C_2	σ_v	σ'_v	$h=4$
A_1	1	1	1	1	z, z^2, x^2, y^2
A_2	1	1	−1	−1	xy
B_1	1	−1	1	−1	x, xz
B_2	1	−1	−1	1	y, yz

$$\Gamma_{2H1s} = A_1 + B_2$$
$$\Gamma_O = 2A_1 + B_1 + B_2$$

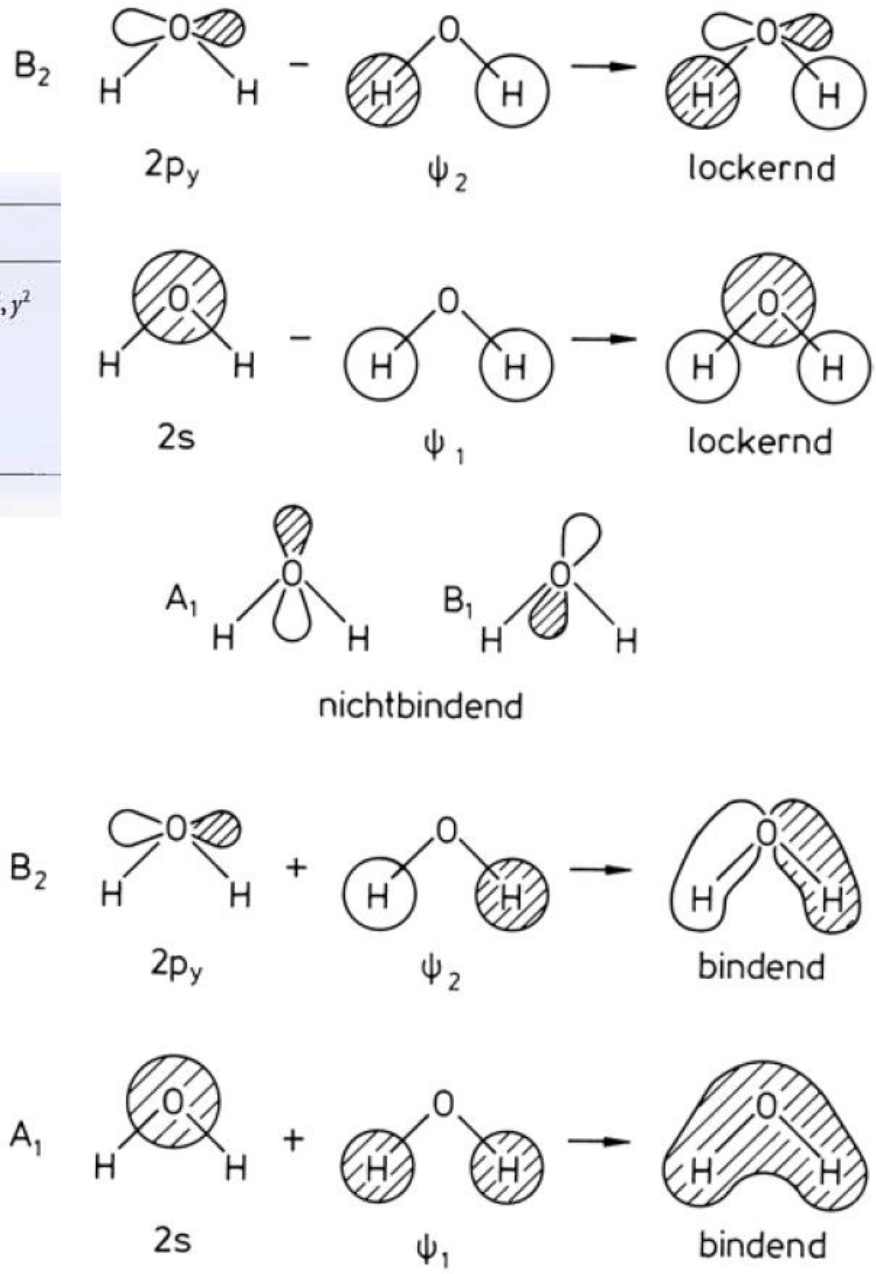
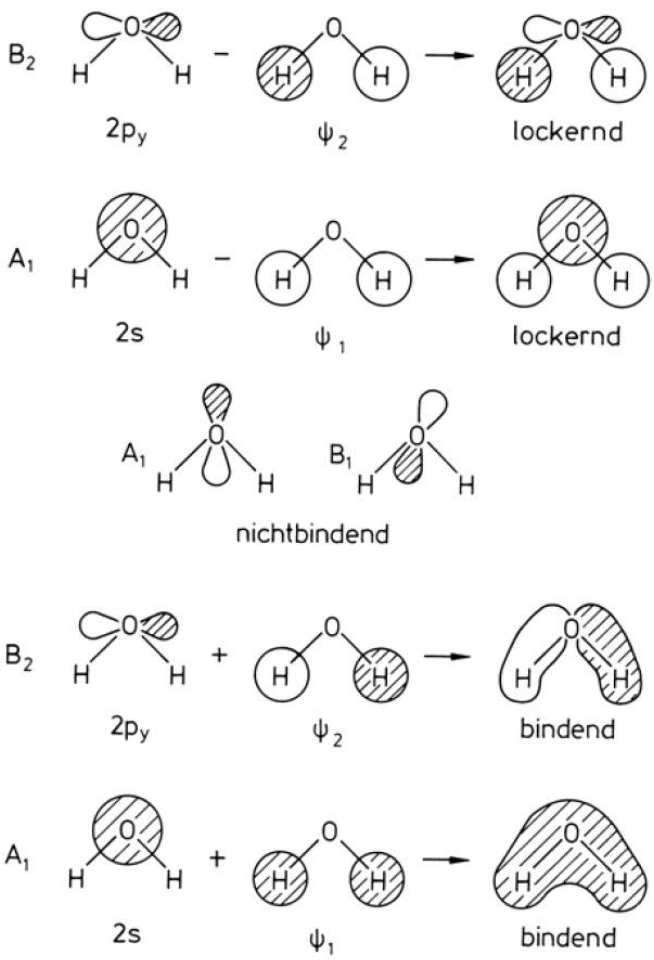


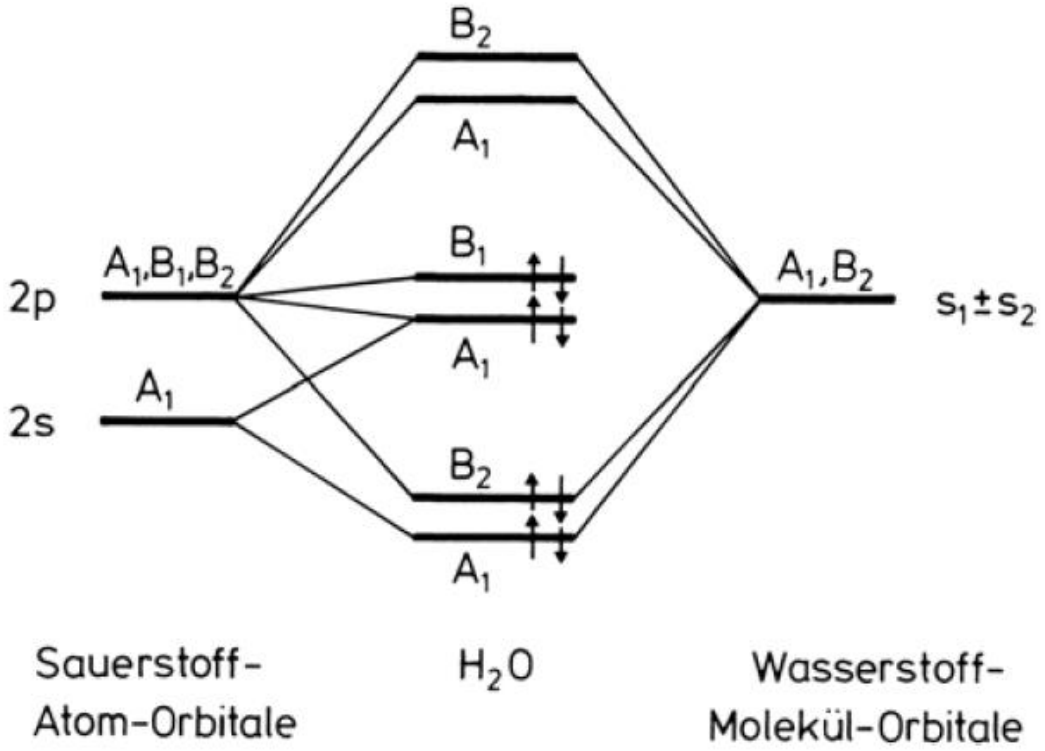
Abb. 6.21. Übersicht über die sich ergebenden H_2O Wellenfunktionen. Ihre Anordnung entspricht dem Energie-Diagramm 6.22

Haken, Wolf, Quantenchemie und Molekülspektroskopie

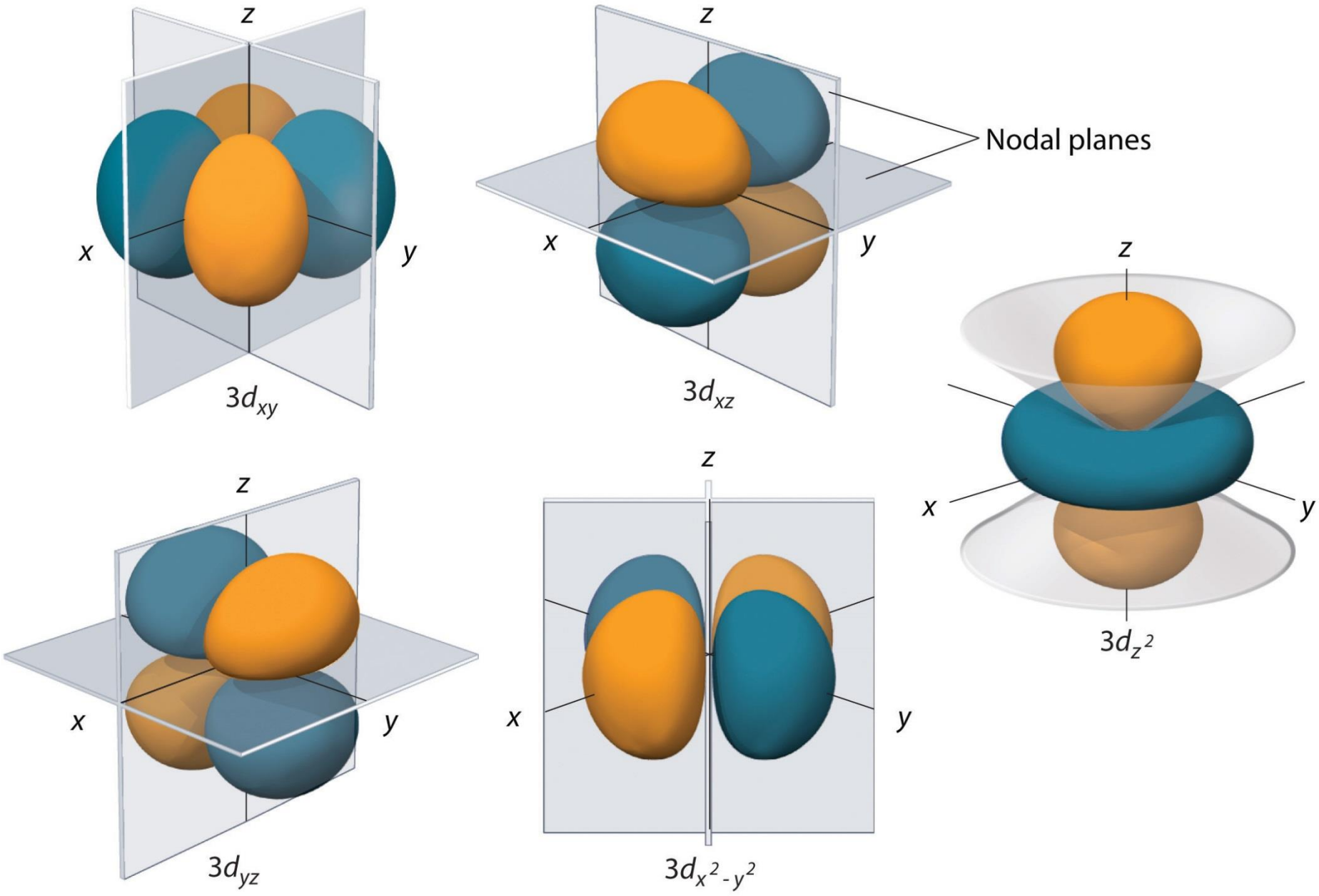
Molekülorbitale von H_2O

$$\Gamma_{2H1s} = A_1 + B_2$$
$$\Gamma_O = 2A_1 + B_1 + B_2$$





Haken, Wolf, Quantenchemie und Molekülspektroskopie



Averill & Eldredge, Principles of General Chemistry

Variationsprinzip

Säkulargleichung

$$\sum_{ij}(H_{ij} - ES_{ij})c_j = 0$$

$$\psi_{+/-} = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{1 \pm S}}(\varphi_A \pm \varphi_B)$$

$$E_{+/-} = (\alpha \pm \beta)\frac{1}{1 \pm S}$$

$$E_{+/-} \cong (E_A \pm \beta)$$

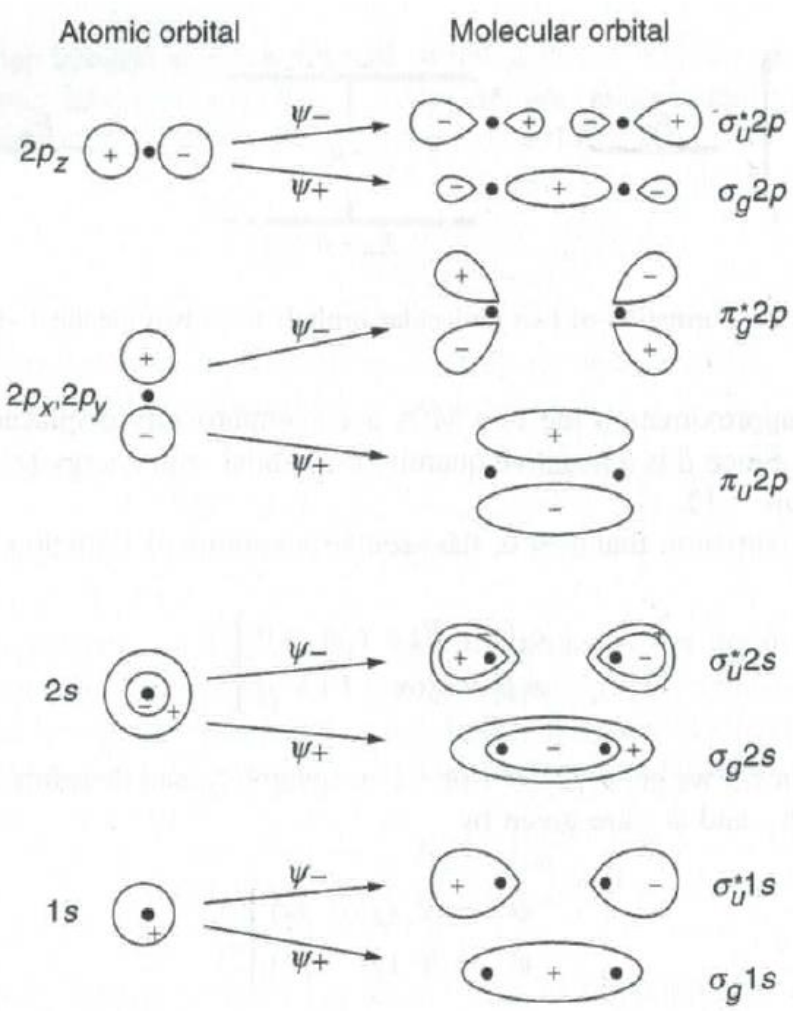


Figure 7.13 Formation of molecular orbitals from 1*s*, 2*s*, and 2*p* atomic orbitals

JM Hollas, Modern Spectroscopy

Variationsprinzip, Orbitalenergien

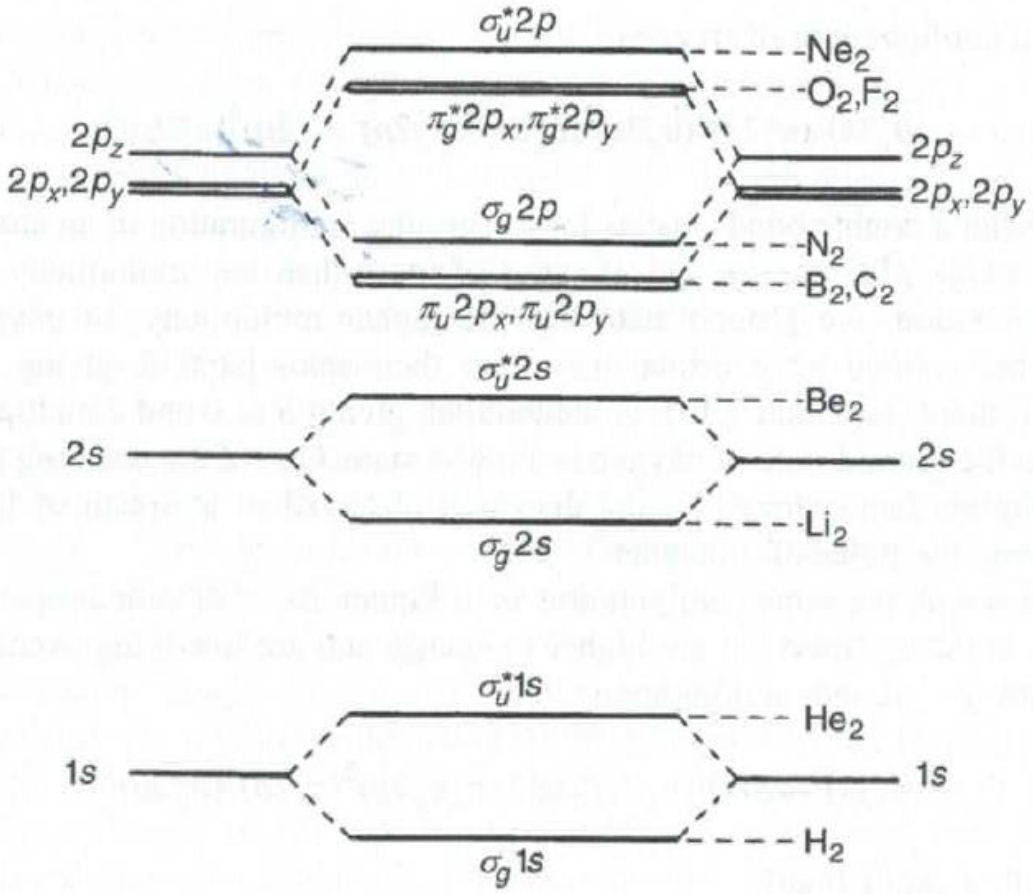


Figure 7.14 Molecular orbital energy level diagram for first-row homonuclear diatomic molecules. The $2p_x$, $2p_y$, $2p_z$ atomic orbitals are degenerate in an atom and have been separated for convenience. (In O_2 and F_2 the order of $\sigma_g 2p$ and $\pi_u 2P$ is reversed.)

JM Hollas, Modern Spectroscopy

Molekülorbitale von Ethen und Butadien