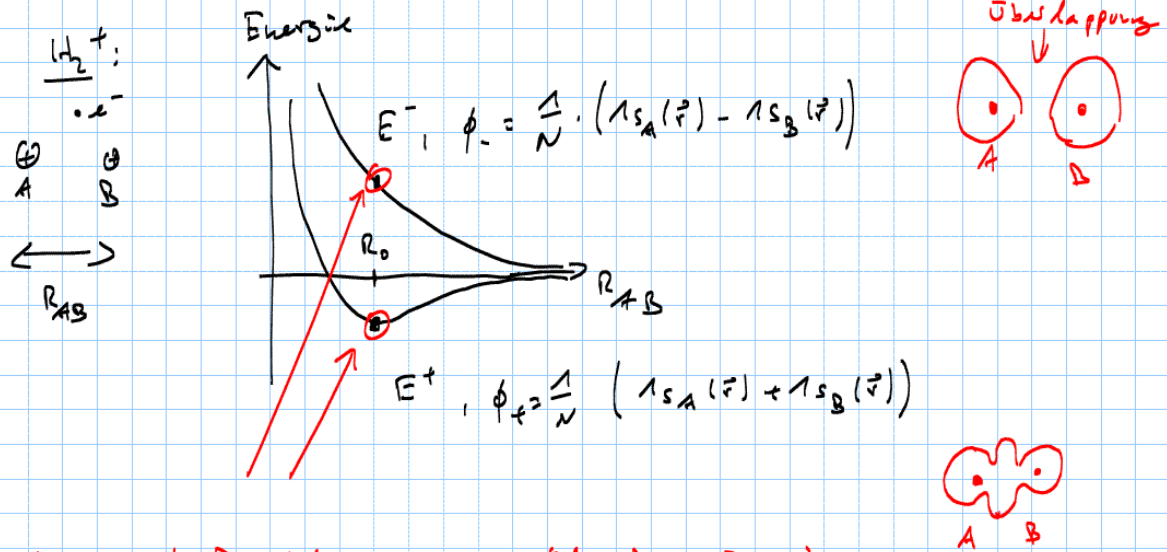


Ü 12.2.6

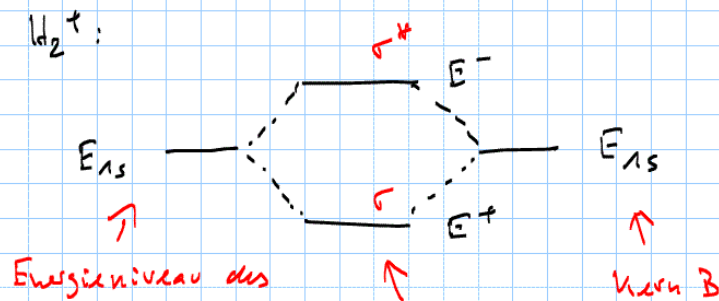
Vereinfachte Bindungsmodelle



Vereinfachte Darstellung von $E^+(R_0)$, $E^-(R_0)$:

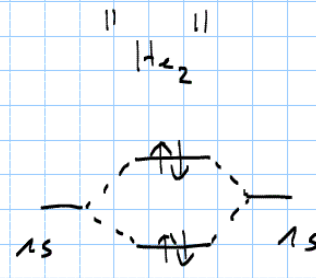
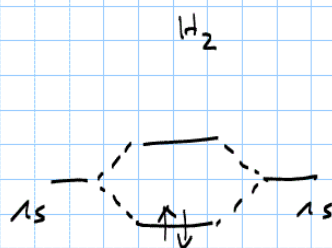
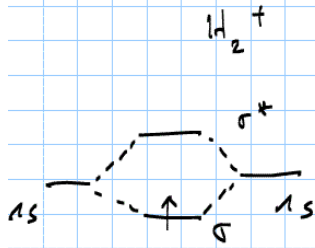
MO - Diagramme:

- nur qualitative Unterscheidung: bindend, nicht-bindend, antibindend
- Abhängigkeit von R_{AB} und $e^- - e^-$ Wechselwirkung nicht berücksichtigt (nur Pauli-Prinzip)



Atomorbitale von
Kern A

Molekül-
orbitale



↑
gemeint ist hier
immer der antisymmetrische
Spinzustand

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\alpha(1)\rangle|\beta(2)\rangle - |\beta(1)\rangle|\alpha(2)\rangle)$$

\Rightarrow 1H_2 : kein Energiegewinn, σ und σ^* gleichermaßen
gefüllt, d.h. es gibt kein H_2 Molekül

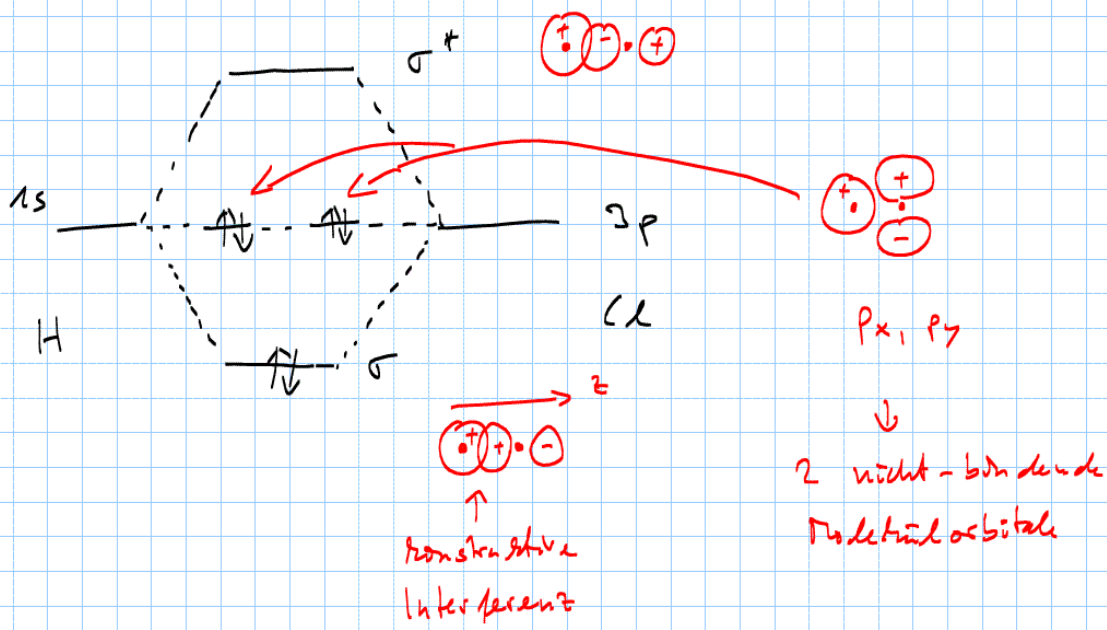
HCl:

H: $1s^1$ - orbital wird für das π_0 genutzt

Cl: $1s^2, 2s^2, 2p^2, 3s^2$ orbitale sind voll gefüllt,

nur $3p$ orbitale tragen zum π_0 bei

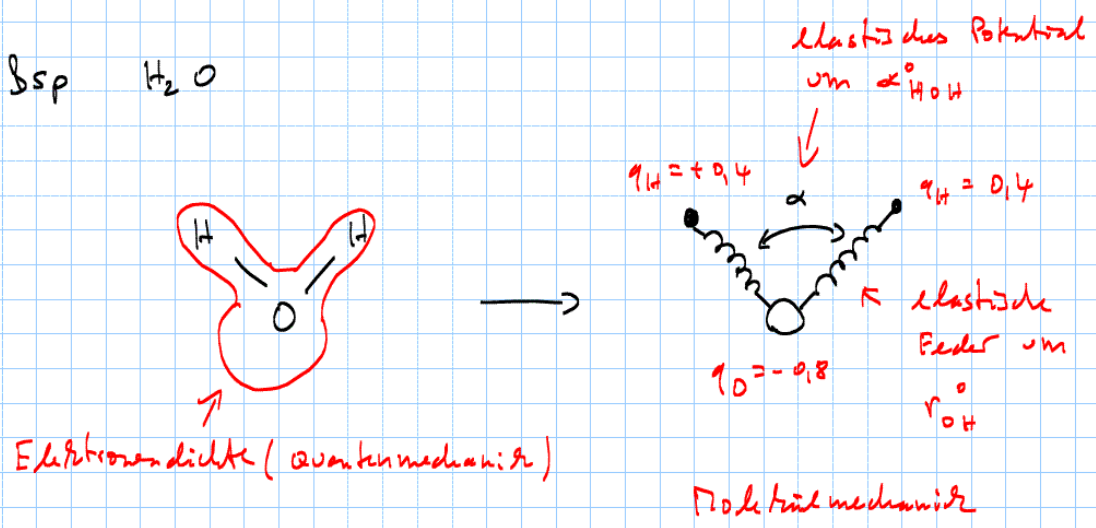
$\rightarrow 1e^-$ aus $1s(H)$ und $3e^-$ aus $3p(Cl)$



Ausblick: Molekülmechanik

Vereinfachung für nicht-reagierende Moleküle

Bsp H_2O



(Stäbchen oder Federn für
 kovalente Bindungen, einfache
 Potentialterme für die
 Wechselwirkungen)

$$\langle \hat{H} \rangle \approx \sum_{i,j} \left(\frac{q_i q_j}{4\pi \epsilon_0 r_{ij}} + \frac{A_{ij}}{r_{ij}^{12}} - \frac{B_{ij}}{r_{ij}^6} \right) +$$

$$+ \sum_{\substack{\text{Bindungen} \\ b}} \frac{1}{2} k_b (r_{ij} - r_b^0)^2 +$$

$$+ \sum_{\substack{\text{Valenzwinkel} \\ \alpha}} \frac{1}{2} k_\alpha (\alpha - \alpha^0)^2 + \dots$$