

7-3 / 1 Mehratomige Moleküle

Vorgehen: Molekülorbitale + Pauliprinzip

Typen von Molekülen:

- Zweiatomige homonukleare Moleküle
- Zweiatomige heteronukleare Moleküle
- Moleküle aus 3 und mehr Atomen
- Konjugierte Moleküle



"I'm on the verge of a major breakthrough, but I'm also at that point where physics leaves off and chemistry begins, so I'll have to drop the whole thing."

7-3 / 2 Zweiatomige Moleküle

Axiale Symmetrie:

nur Projektion L_z von Bahndrehimpuls auf Molekülachse
(nicht Betrag $|L|$) ist gute Quantenzahl:

$$L_z = \hbar \cdot m_l$$

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

$$\lambda \equiv |m_l| = 0, 1, 2, \dots (\sigma, \pi, \delta, \dots)$$

Homonukleare Moleküle:

symmetrische (**g**erade) und antisymmetrische (**u**ngerade) MO

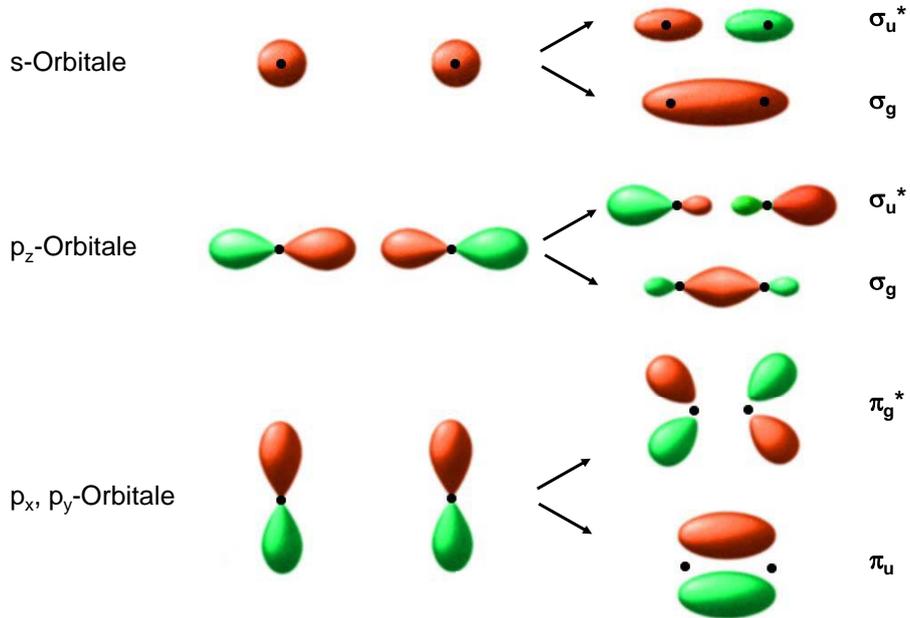
Bindungsverhalten:

bindende und antibindende (*) Zustände

Nomenklatur: $\lambda_{g/u} nl$ z.B.: $\sigma_u^* 1s$

7-3 / 3

Orbitale homonuklearer Moleküle

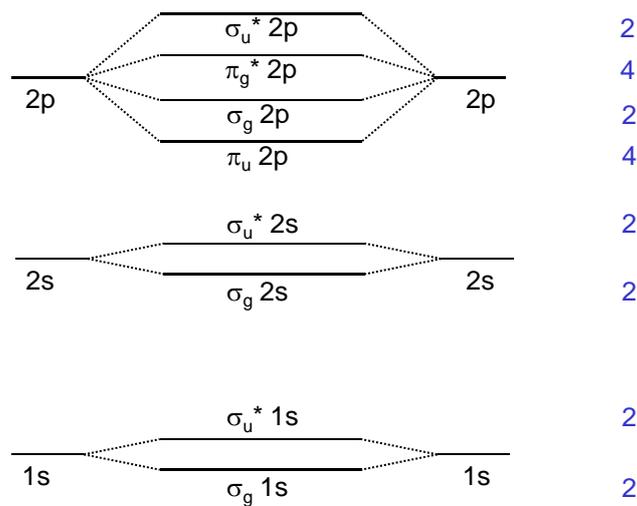


7-3 / 4

Energieniveaus

Schematischer Verlauf für H_2 bis N_2 :

maximale Anzahl von Elektronen pro MO



Anmerkung: Abstand und Reihenfolge der MOs abhängig von Molekül

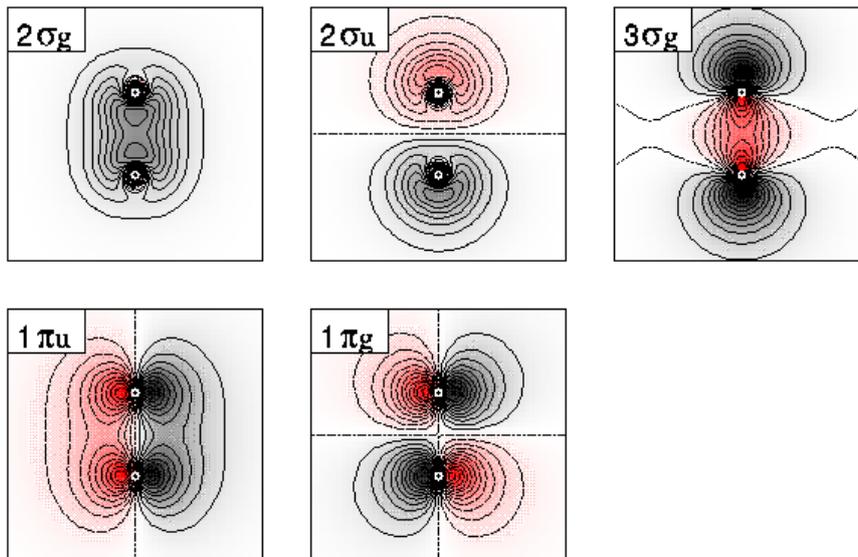
7-3 / 5

Elektronenkonfigurationen

		Bindungsenergie [eV]
H_2^+	$\sigma_g 1s$ ↑	2.65
H_2	↑↓ $\sigma_u^* 1s$	4.48
He_2^+	↑↓ ↑	3.1
He_2	↑↓ ↑↓ $\sigma_g 2s$	nicht stabil
Li_2	↑↓ ↑↓ ↑↓ $\sigma_u^* 2s$	1.03
Be_2	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ $\pi_u 2p$	nicht stabil
B_2	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑ ↑	3.60
C_2	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ $\sigma_g 2p$	3.60
N_2	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ $\pi_g^* 2p$	7.37
O_2	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑ ↑	5.08
F_2	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ $\sigma_u^* 2p$	2.8
Ne_2	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓	nicht stabil

7-3 / 6

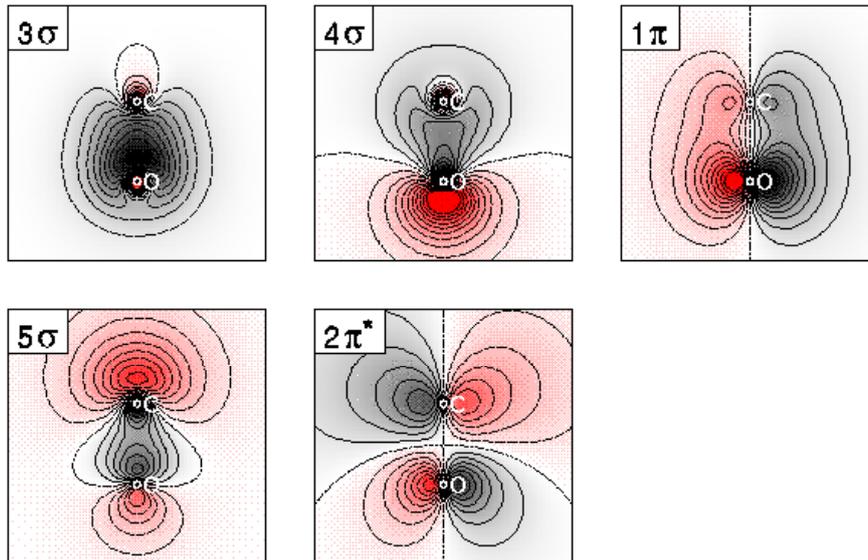
Molekülorbitale von Sauerstoff



<http://www.fhi-berlin.mpg.de/th/personal/hermann/pictures.html>

7-3 / 7

Molekülorbitale von Kohlenmonoxid

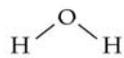


<http://www.fhi-berlin.mpg.de/th/personal/hermann/pictures.html>

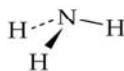
7-3 / 8

Molekülgeometrie

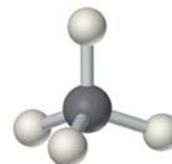
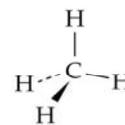
Wasser



Ammoniak

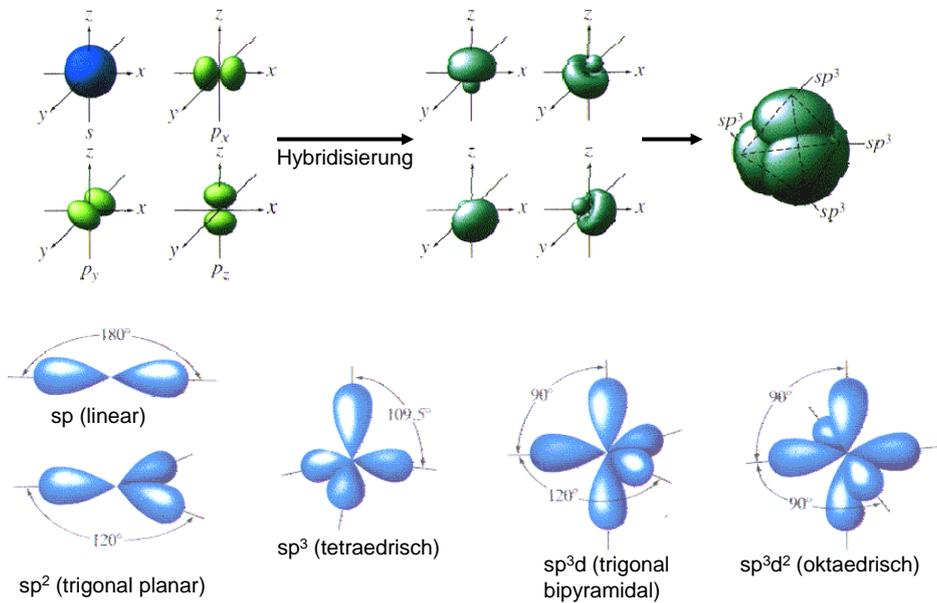


Methan



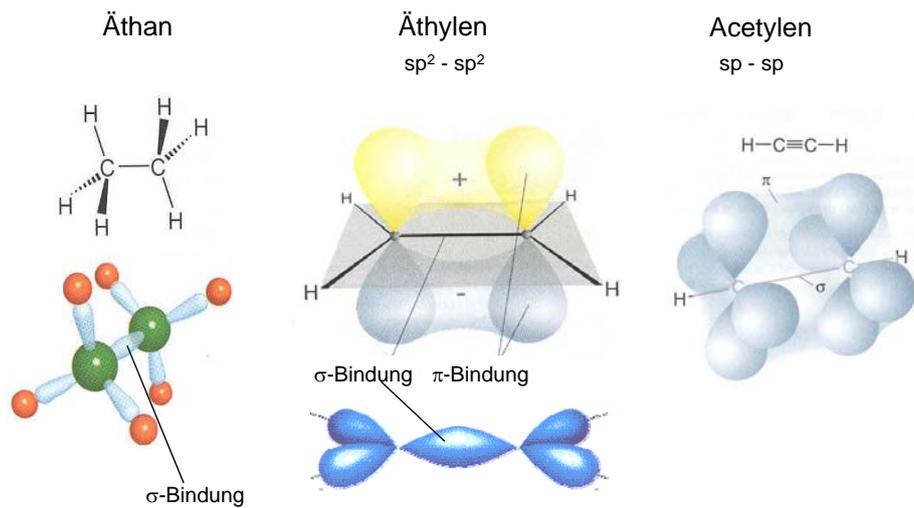
7-3 / 9

Hybridisierung



7-3 / 10

Hybridisierung



7-3 / 11 Konjugierte Moleküle

Moleküle mit konjugierten Doppelbindungen:
delokalisierte π -Elektronen \rightarrow

- Elektronentransfer möglich (Leitfähigkeit)

