

# Molekulare Orbitale $H_2^+$

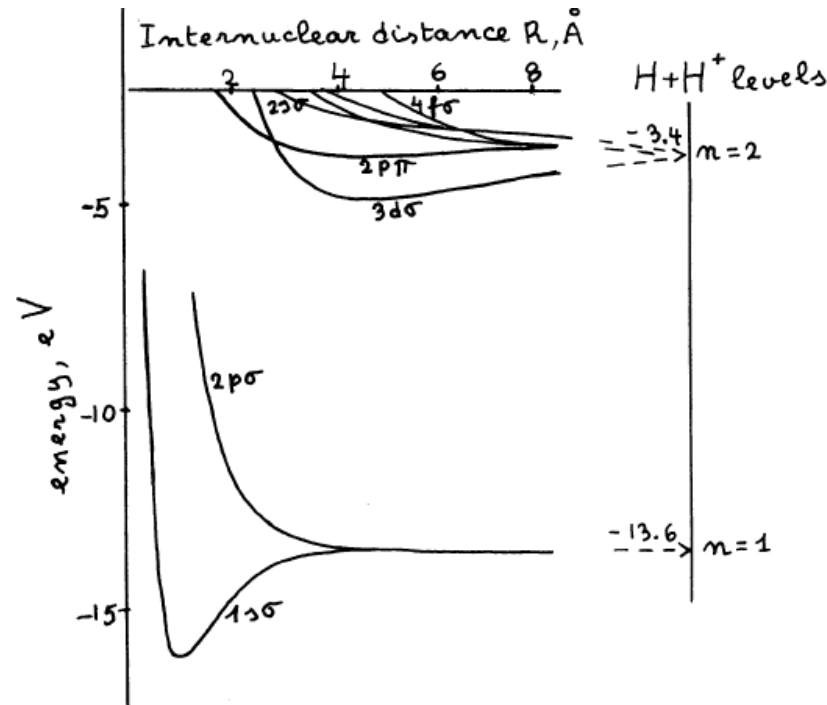


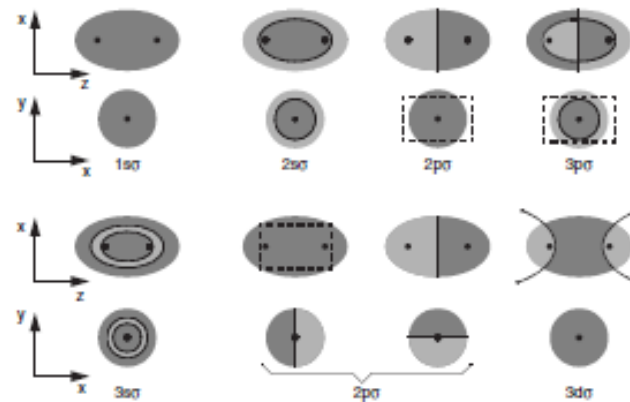
Abbildung 3.8: Potentialkurven für das  $H_2^+$ -Molekölion. Der  $1s\sigma$ -Zustand ist bindend und das Minimum liegt bei einem Gleichgewichtsabstand  $R_e = 2,0 a_0$ . Bezogen auf den Limes entfernter Kerne  $R \rightarrow \infty$  ist die Bindungsenergie  $E_B = -2,79$  eV. (Die einfache LCAO-Rechnung ergibt  $R_e = 2,5 a_0$  und  $E_B = -1,76$  eV.)

[nach: Fano & Fano, Physics of Atoms and Molecules]

# Molekulare Orbitale

**Tabelle 2.1:** Quantenzahlen und Termbezeichnung eines Elektrons im Molekül mit Bahndrehimpulsquantenzahl  $\ell$  und Projektionsquantenzahl  $\lambda = |m_\ell|$ .

Quantenzahlen			Termbezeichnung
$n$	$\ell$	$\lambda$	
1	0	0	1 $\sigma$
2	0	0	2 $\sigma$
2	1	0	2 $p\sigma$
2	1	1	2 $p\pi$
3	2	0	3 $d\sigma$
3	2	2	3 $d\delta$



**Abb. 2.12:** Elektronische Wellenfunktionen für einige Zustände des  $H_2^+$  (dunkelgrau = positive, hellgrau = negative Werte). *Oben:* Blick senkrecht zur Molekülachse; *unten:* Blickrichtung in die Molekülachse. Wenn die Zeichenebene Knotenebene ist, wird das Vorzeichen oberhalb der Ebene angegeben [2.11].

# Anschauliche Interpretation

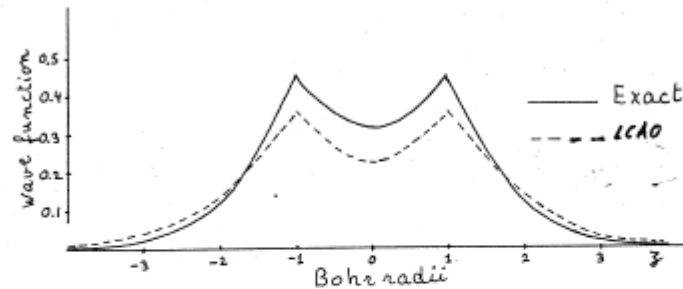


Abbildung 3.4: Schnitt des Molekülorbitals  $\Psi_s$  entlang der  $z$ -Achse. Dieses Molekülorbital hat keine Knotenflächen, hat also die Quantenzahlen  $1s\sigma$ . Durchgezogen die exakte Lösung, gestrichelt die LCAO-Näherung.

[nach: Fano & Fano, Physics of Atoms and Molecules]

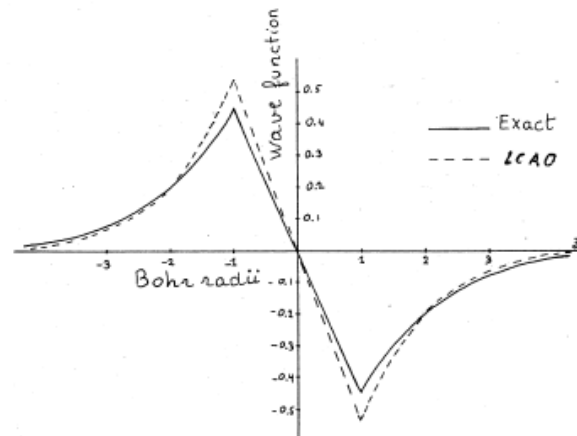


Abbildung 3.5: Schnitt des Molekülorbitals  $\Psi_a$  entlang der  $z$ -Achse. Dieses Molekülorbital hat eine Knotenebene bei  $z = 0$ , also eine hyperbolische Knotenfläche. Die Quantenzahlen sind  $2p\sigma$ . Durchgezogen die exakte Lösung, gestrichelt die LCAO-Näherung.

[nach: Fano & Fano, Physics of Atoms and Molecules]

# H<sub>2</sub>-Molekül

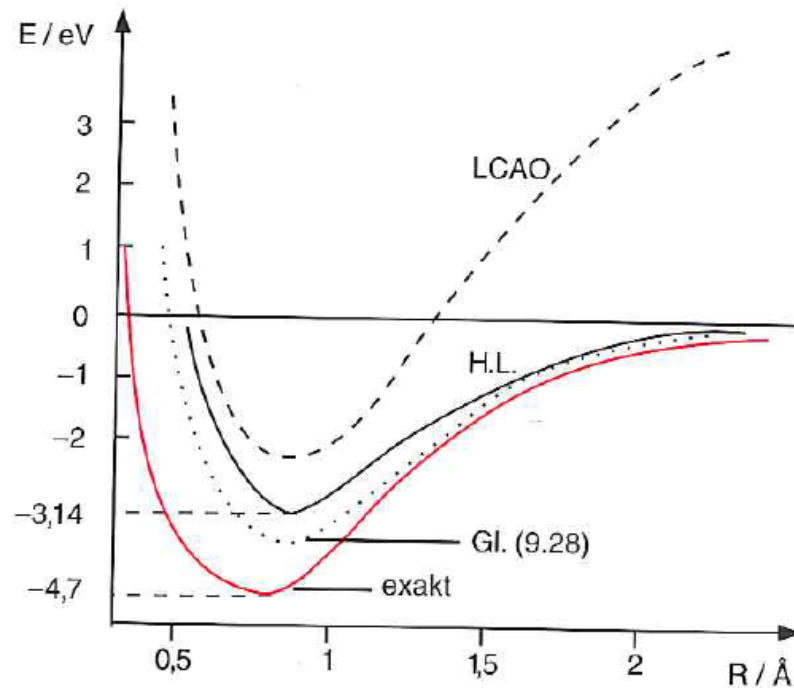
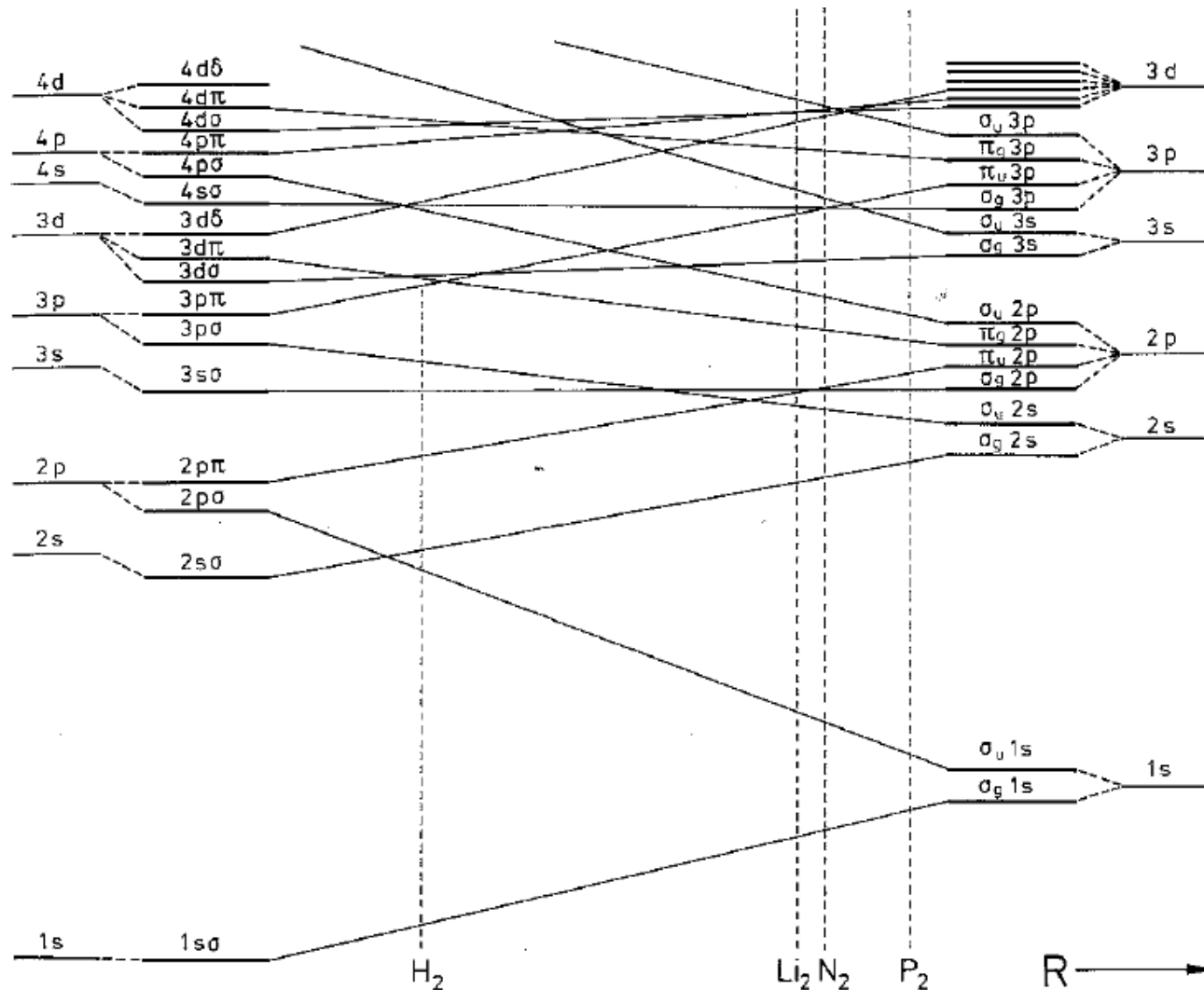


Abb. 9.14. Potentialkurven  $E(R)$  des H<sub>2</sub>-Grundzustandes für die verschiedenen Näherungen

# Korrelationsdiagramm für homonukleare Moleküle



# Das "Periodensystem" der Moleküle

**Tabelle 2.9:** Grundzustands-Elektronenkonfigurationen einiger leichter Moleküle.

Molekül	Elektronenkonfiguration	Spektroskopische Bezeichnung des Grundzustandes	Bindungsenergie (eV)
$\text{H}_2^+$	$\sigma_g 1s$	$2 \Sigma_g^+$	2,648
$\text{H}_2$	$(\sigma_g 1s)^2$	$1 \Sigma_g^+$	4,476
$\text{He}_2^+$	$(\sigma_g 1s)^2(\sigma_u 1s)$	$2 \Sigma_u^+$	2,6
$\text{He}_2$	$(\sigma_g 1s)^2(\sigma_u 1s)^2$	$1 \Sigma_g^+$	0,001
$\text{Li}_2$	$(\sigma_g 1s)^2(\sigma_u 1s)^2(\sigma_g 2s)^2$	$1 \Sigma_g^+$	1,02
$\text{B}_2$	$(\sigma_g 1s)^2(\sigma_u 1s)^2(\sigma_g 2s)^2(\sigma_u 2s)^2(\pi_u 2p)^2$	$3 \Sigma_g^-$	3,6
$\text{C}_2$	$(\sigma_g 1s)^2(\sigma_u 1s)^2(\sigma_g 2s)^2(\sigma_u 2s)^2(\pi_u 2p)^4$ oder $(\pi_u 2p)^3 \sigma_g 2p$	$3 \Pi_u^-$ $3 \Sigma_u^-$	3,6 3,6