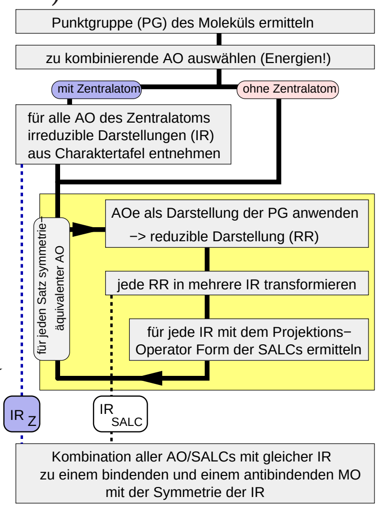
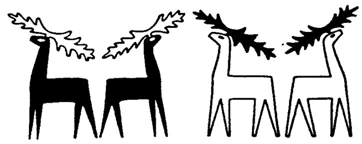
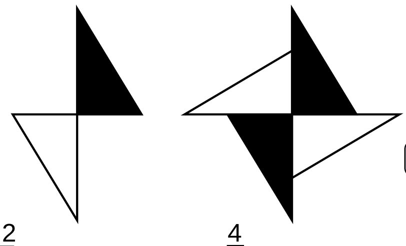
2.9. Anwendungen IV: MO-Theorie (Basis: Atomorbitale)







2 4

Antisymmetrie

Beispiel: H_2O

Basis: Atomorbitale (s. Vorl. 2.13)

Reduktion:

	E	C_2	σ_{xz}	σ_{yz}	a_i	Rechnung nach Formel Vorl. 2.14
a_1	1	1	1	1	3*	$\frac{1}{4}[6*1+0*1+2*1+4*1]$
a_2	1	1	-1	-1	0*	$\frac{1}{4}[6*1+0*1+2*(-1)+4*-1]$
b_1	1	-1	1	-1	1*	$\frac{1}{4}[6*1+0*(-1)+2*1+4*-1]$
b_2	1	-1	-1	1	2*	$\frac{1}{4}[6*1+0*(-1)+2*(-1)+4*1]$
	3+1+2= 6	3-1-2= 0	3+1-2= 2	3-1+2= 4		$\mapsto$ 3 a_1, 1 b_1, 2 b_2

Ergebnis: MOs: 3 a_1, 1 b_1, 2 b_2

MOs als LCAO: Irreduzible Darstellungen der AO (SALCs der AO)

H-Atom-Gruppenorbitale (aus der red. Darstellung 2 0 0 2 für die beiden 1s-AO)	irreduz. Darstellung	O-Atomorbitale (O auf allen SE $\mapsto$ AO haben Symmetrie-eigenschaften einer irred. Darstellung)
$\varphi_1 = s_1 + s_2$	a_1	2s, $2p_z$
	a_2	
	b_1	$2p_x$
$\varphi_2 = s_1 - s_2$	b_2	$2p_y$