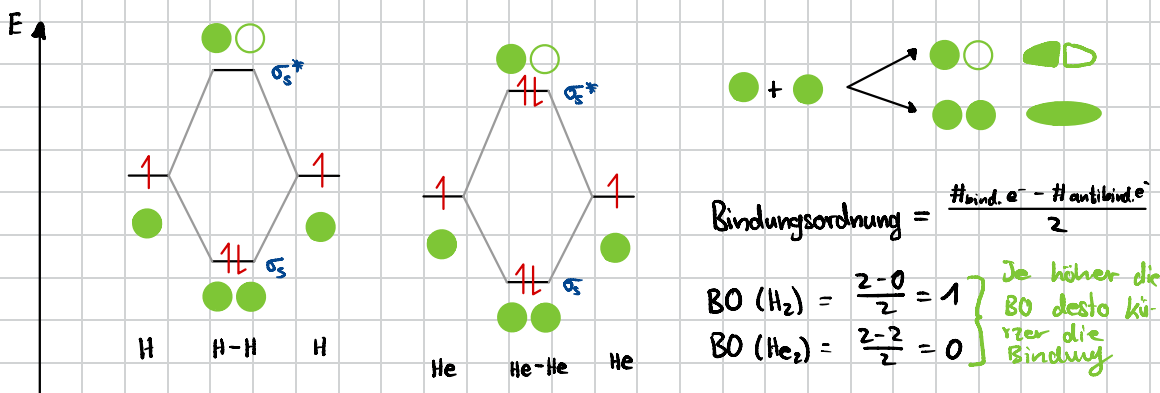
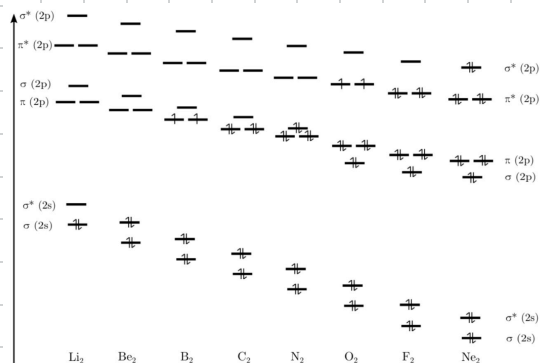
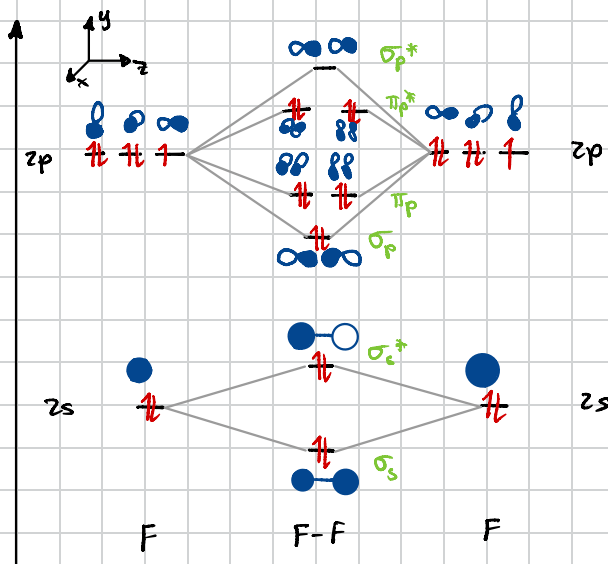


ÜS 5 - Symmetrie II

Grundsätzlich gehts darum Molekülorbitale (MO) qualitativ konstruieren zu können. Dazu gehen wir davon aus, dass zwei Atome nebeneinander liegen und ihre Orbitale wechselwirken. Dazu betrachten wir zunächst nur s-Orbitalbeteiligung in H_2 , wobei immer gleich viele MOs entstehen, wie AO's anfänglich vorhanden sind. Die beiden s-Orbitale können entweder bindend (σ_s) oder antibindend (σ_s^*) kombinieren.



Für die späteren homonuklearen Dimere müssen auch die p-Orbitale betrachtet werden.

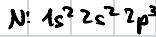
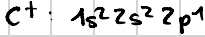


Dia- vs. Paramagnetismus

- Paramagnetisch: ungepaarte e^-
- Diamagnetisch: k. ungepaarten e^-

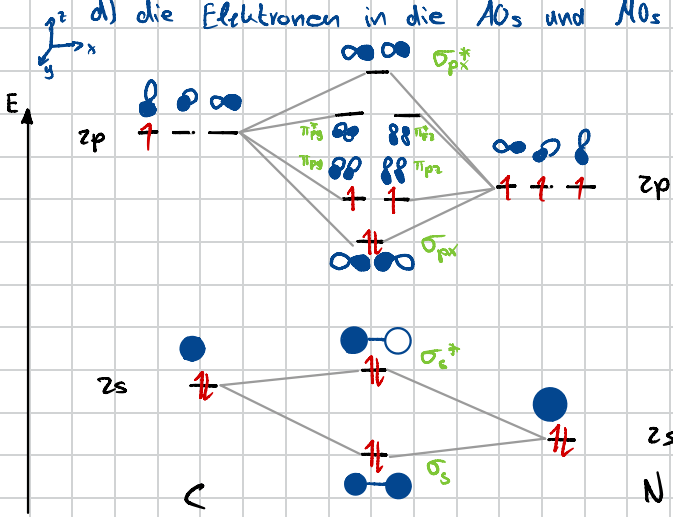
Aufg.: Konstruiere das MO-Schema für CN^{\oplus} , indem du

a) die Elektronenkonfiguration für C^+ und N angibst:



c) die Atomorbitale und die Molekülorbitale das Diagramm einzeichnest und benennst.

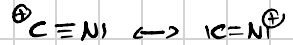
d) die Elektronen in die AOs und MOs einzeichnest.



e) die Bindungsordnung berech.

$$BO = \frac{6-2}{2} = 2$$

f) eine sinnvolle Lewisstruktur mit Resonanzstruktur zeichnest



Möchten wir nun das MO von komplizierteren polyatomaren Molekülen konstruieren, machen wir das mit Hilfe der Charaktertabelle, denn nur gleichsymmetrische Orbitale können kombinieren. Ziel dabei ist es immer die Ligandenorbitale um ein Zentralatom herum zu konstruieren. Zunächst bestimmen wir Punktgruppe des Moleküls und anhand dessen die Mullikensymbole der Atome. Danach kombinieren nur diejenigen Orbitale mit gleichem Mullikensymbol.

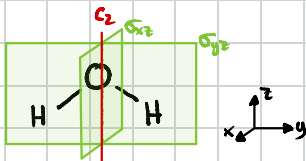
• Buchstaben A, B, E, T

↳ A (1d, symmetrisch unter C_n), B (1d, antisymmetrisch unter C_n), E (2d), T (3d)

• Indizes 1, 2 1 (symmetrisch unter σ_v), 2 (antisymmetrisch unter σ_v)

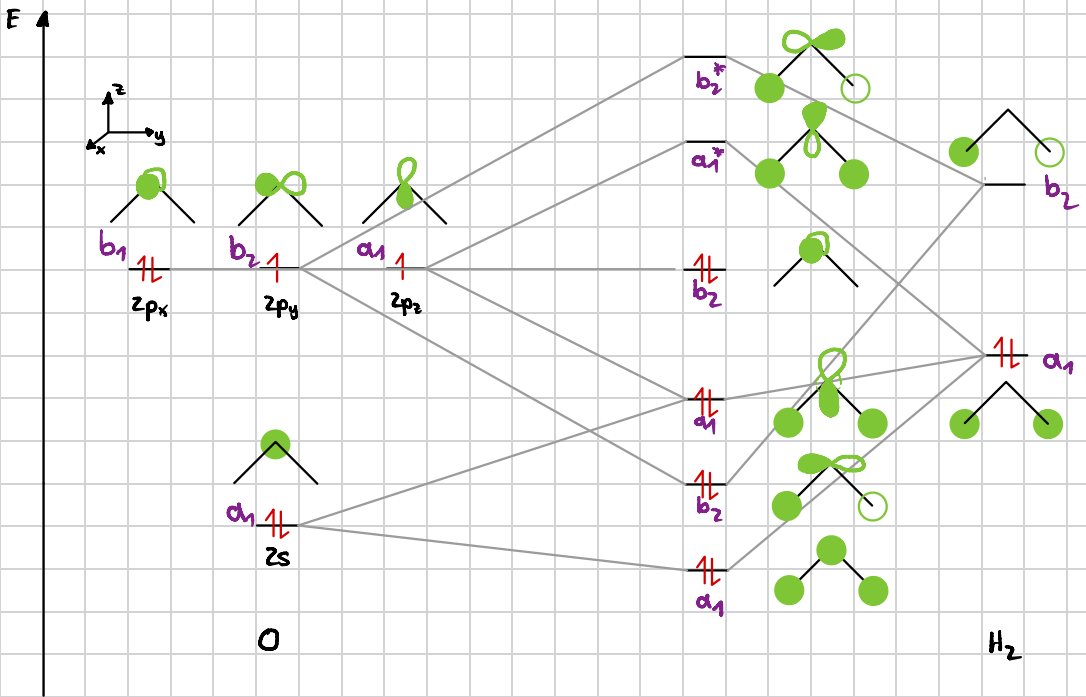
• Striche ' ' (symmetrisch unter σ_h), ' (antisymmetrisch unter σ_h)

• Parität g, u g (gerade \Rightarrow symmetrisch unter i), u (antisymmetrisch unter i)



C_{2v}	E	C_2^z	σ^{xz}	σ^{yz}	Koord.	Quadr.	Rot.
A_1	1	1	1	1	z	x^2, y^2, z^2	
A_2	1	1	-1	-1		xy	R_z
B_1	1	-1	1	-1	x	xz	R_y
B_2	1	-1	-1	1	y	yz	R_x

Für H_2O kombinieren wir H_2 um O als Zentralatom herum.



Bei H_2O kombinieren drei a_1 -Orbitale zu drei a_1 -MOs. Die AOs von O liegen tiefer als diejenigen von H, da O elektronegativer sind. Kombinieren AOs nicht, so sind sie nicht bindende Orbitale im MO (b_2)