

Das Molekülorbital-Modell

am Beispiel des H₂-Moleküls

Ziel und Motivation

Ziel: Antwort auf die Frage: Was ist ein Molekülorbital?

Warum? - chemische Bindungen in der Quantenmechanik
- Grundlage in der Quantenchemie
- Erklärung von Reaktionsmechanismen
(z.B. Woodward-Hoffmann-Regeln)

Benötigte Vorkenntnisse: - Atomorbitale (Schrödingergleichung)
- Pauli-Prinzip

Literatur: - Atkins, de Paula, Physikalische Chemie
- Wedler, Physikalische Chemie
- ...

Geschichte

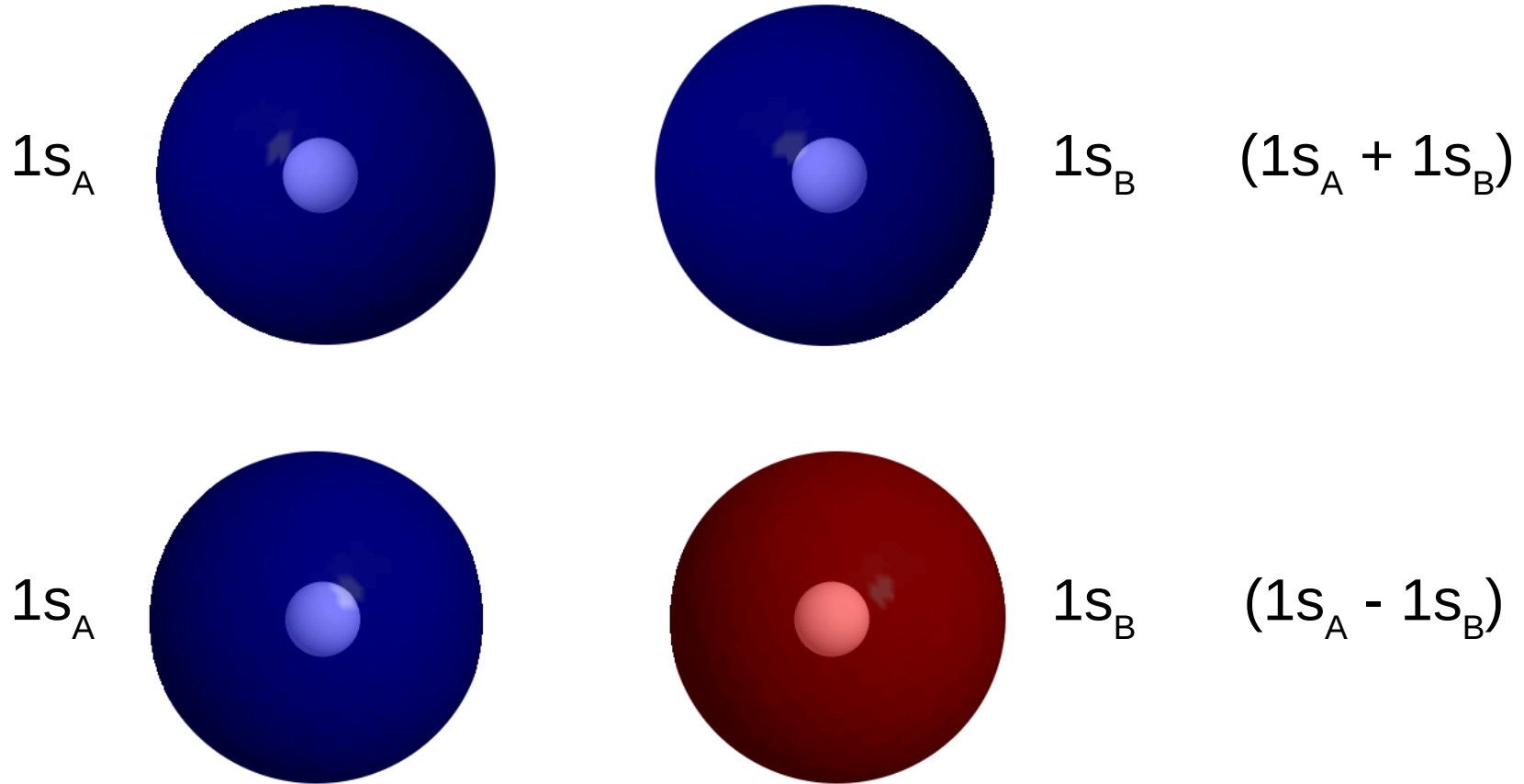
Molekülorbital-Theorie entwickelt in den 1930er Jahren von Friedrich Hund, Robert Mulliken mit Beiträgen von Felix Bloch, John Slater, John Lennard-Jones, Erich Hückel

→ auch Hund-Mulliken(-Bloch)-Theorie genannt

Orbital: Einelektronenwellenfunktion (Spinorbital)

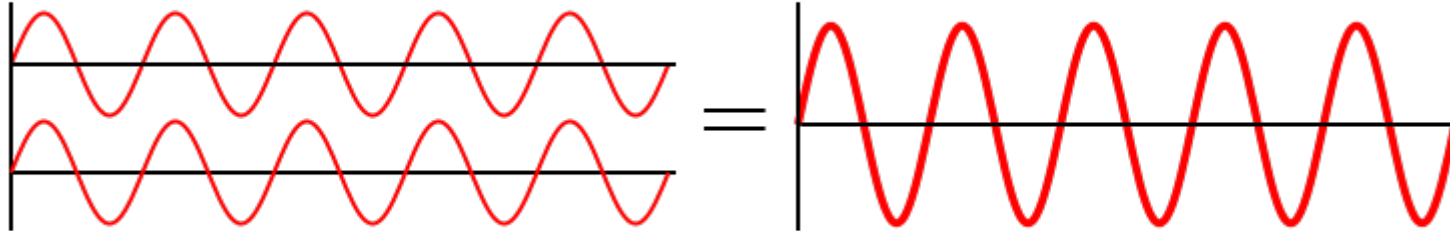
- exakte Wellenfunktion für H-Atom
- Ansatz für Mehrelektronenatome (Näherung)
- ohne Spin: maximal 2 Elektronen können räumliches Orbital besetzen

Orbitale von H_2



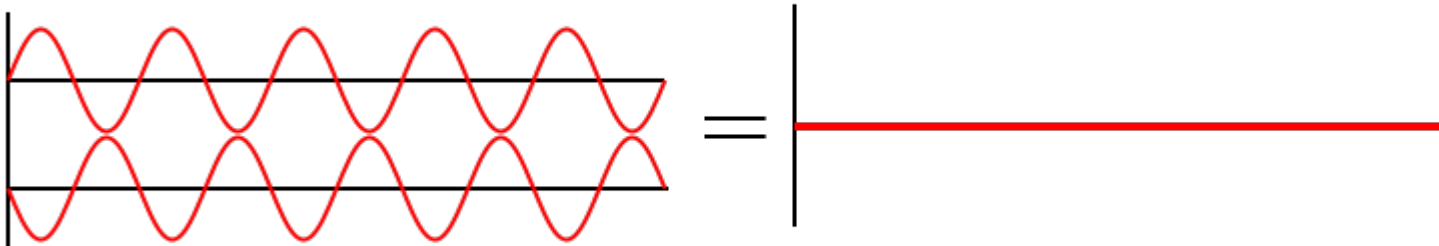
Interferenz

- **Fall 1:** Konstruktive Interferenz



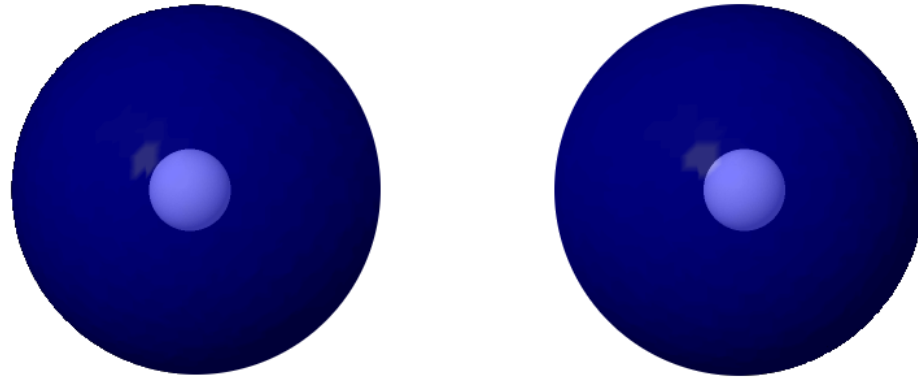
Zwei Wellen gleicher Amplitude+Wellenlänge, aber um 2π verschoben, addieren sich.

- **Fall 2:** Destruktive Interferenz

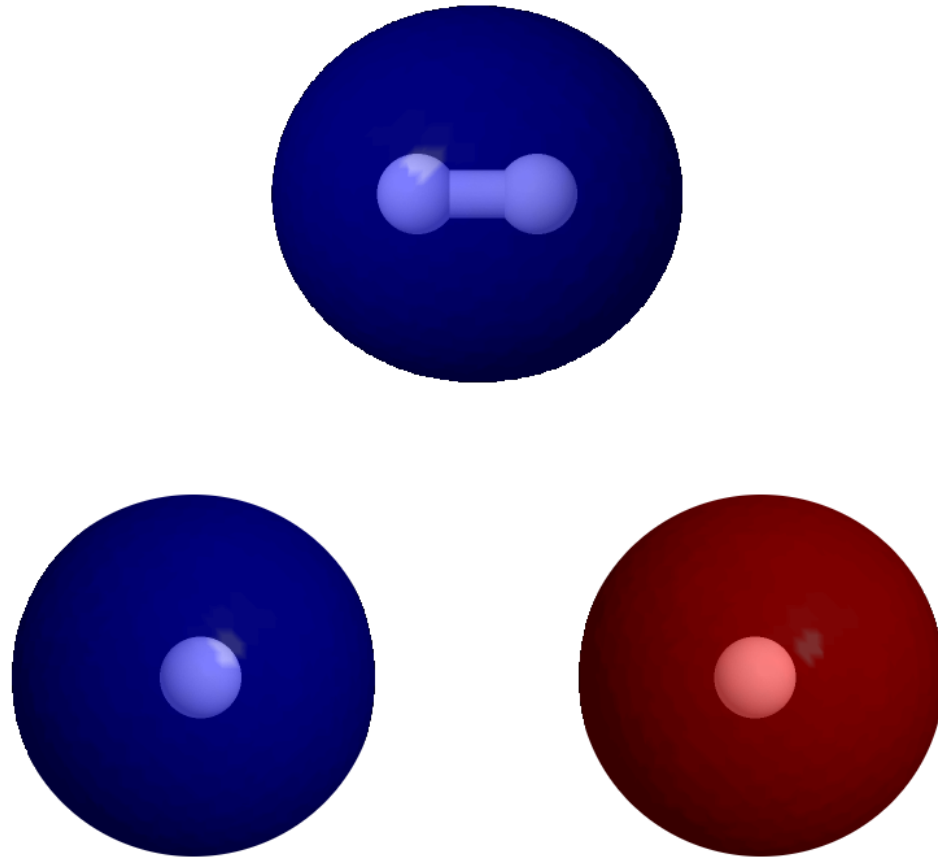


Zwei Wellen gleicher Amplitude+Wellenlänge, aber um π verschoben, löschen sich aus.

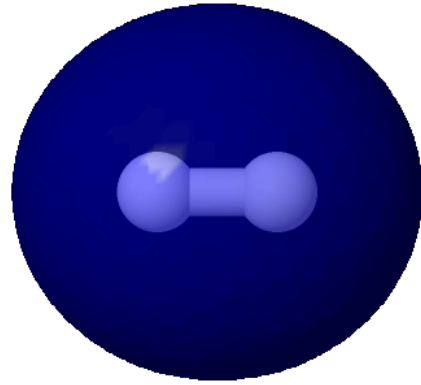
Orbitale von H_2



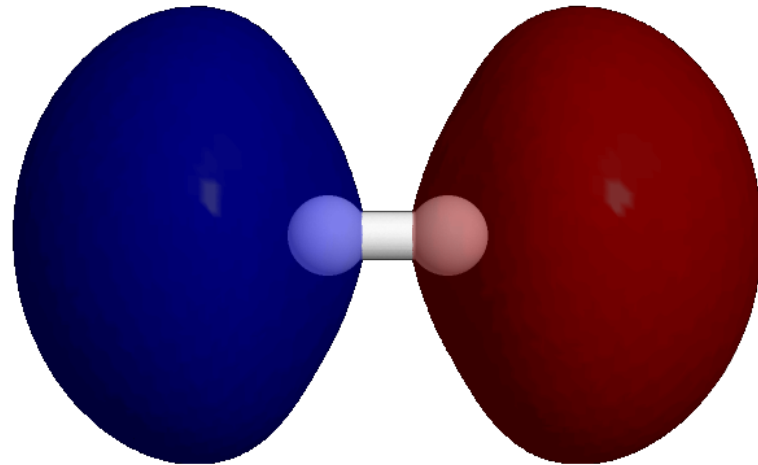
Orbitale von H_2



Orbitale von H_2



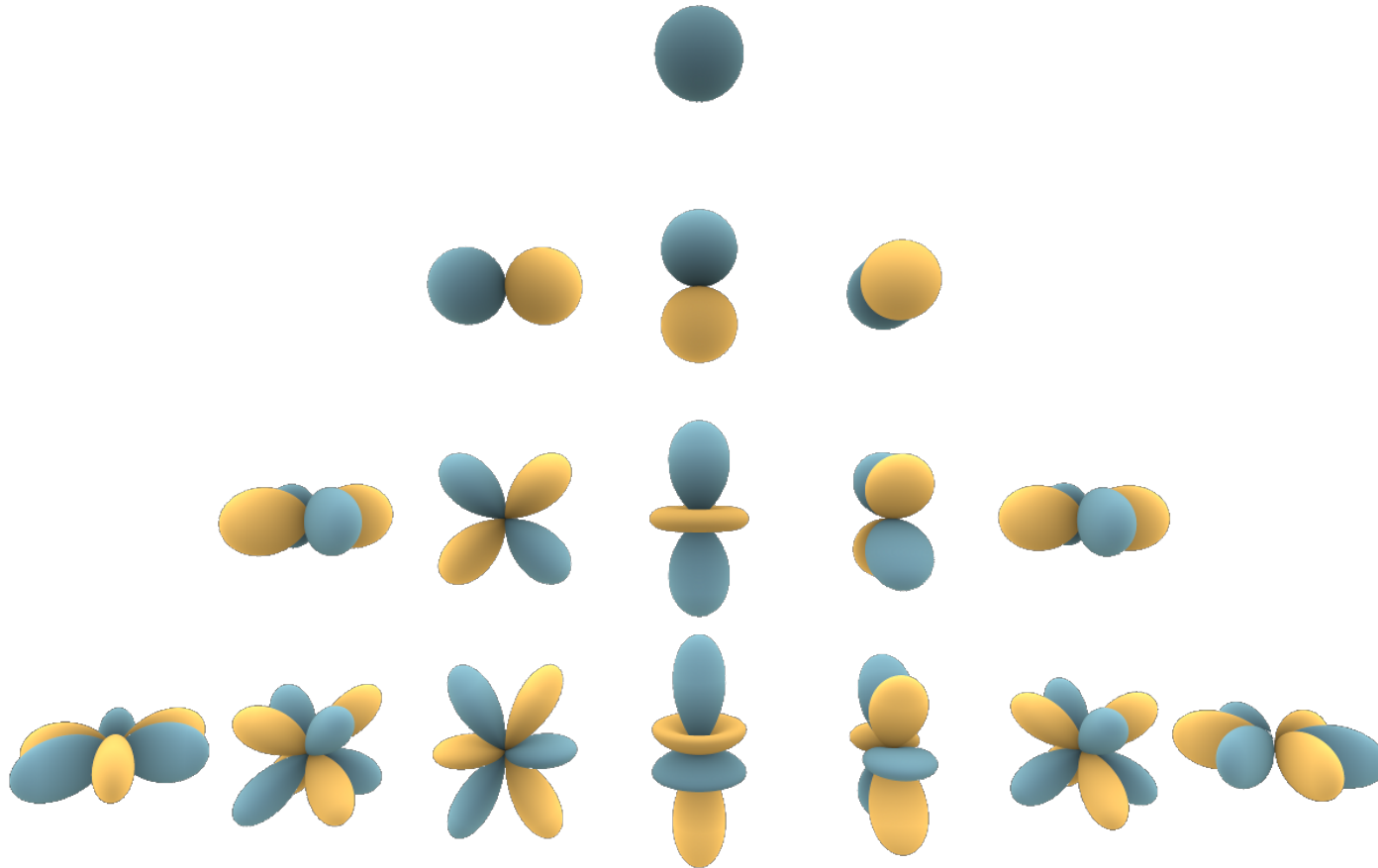
σ oder 1σ



σ^* oder 2σ

Kugelflächenfunktionen

Kugelflächenfunktionen (spherical harmonics) für festen Radius r .



letters to nature

Direct observation of *d*-orbital holes and Cu–Cu bonding in Cu₂O

J. M. Zuo*, M. Kim*, M. O’Keeffe† & J. C. H. Spence*

* Department of Physics and Astronomy, † Department of Chemistry, Arizona State University, Tempe, Arizona 85287, USA

NATURE | VOL 401 | 2 SEPTEMBER 1999 | www.nature.com

© 1999 Macmillan Magazines Ltd

49

Are Orbitals Observable?

Peter Mulder

HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry, Vol. 17 (2011), No. 1, pp. 24–35.
Copyright © 2011 by HYLE and Peter Mulder.

articles

Tomographic imaging of molecular orbitals

J. Itatani^{1,2}, J. Levesque^{1,3}, D. Zeidler¹, Hiromichi Niikura^{1,4}, H. Pépin³, J. C. Kieffer³, P. B. Corkum¹ & D. M. Villeneuve¹

¹National Research Council of Canada, 100 Sussex Drive, Ottawa, Ontario K1A 0R6, Canada

²University of Ottawa, 150 Louis Pasteur, Ottawa, Ontario K1N 6N5, Canada

³INRS-Énergie et Matériaux, 1650 boulevard Lionel-Boulet, CP 1020, Varennes, Québec J3X 1S2, Canada

⁴PRESTO, Japan Science and Technology Agency, 4-1-8 Honcho Kawaguchi Saitama, 332-0012, Japan

NATURE | VOL 432 | 16 DECEMBER 2004 | www.nature.com/nature

©2004 Nature Publishing Group

867

THE JOURNAL OF
PHYSICAL CHEMISTRY A

Viewpoint

pubs.acs.org/JPCA

Can Orbitals Really Be Observed in Scanning Tunneling Microscopy

Buu Q. Pham
Mark S. Gordon*

Department of Chemistry, Iowa State University, Ames,
Iowa 50011, United States

Published: July 6, 2017

ACS Publications © 2017 American Chemical Society

4851

DOI: 10.1021/acs.jpca.7b05789
J. Phys. Chem. A 2017, 121, 4851–4852

Zusammenfassung

Ziel: Antwort auf die Frage: Was ist ein Molekülorbital?

Mathematisches Hilfskonstrukt um das Konzept von Atomorbitalen auf Moleküle zu übertragen

Ungefährer Anteil eines Elektrons an der Gesamtwellenfunktion