

Das Orbitalmodell (IX) - Zweiatomige Systeme

Zwei H-Atome „unendlich“ voneinander entfernt, üben aufeinander keinerlei Kräfte aus. Sobald sie sich jedoch nähern, treten zwischen ihnen Wechselwirkungen auf: die beiden Atomkerne und beide Elektronenwolken des 1s-Orbitals stoßen sich gegenseitig ab, zwischen dem Kern des einen Atoms und dem Orbital des anderen existiert jedoch eine **Anziehung**. Während sich beide Atome einander nähern, werden die Elektronenwolken in den Bereich zwischen den Kernen gezogen. Dabei ist die Kombination zweier Kerne und Elektronen stabiler (energieärmer) als die energetische Situation zweier isolierter H-Atome. Je dichter die Kerne zusammenkommen, desto stärker konzentriert sich die Elektronendichte zwischen ihnen, desto mehr nimmt die Energie des Systems ab, desto stabiler wird das Gesamtsystem=Molekül.

Kommen sich die Kerne jedoch zu nahe, beginnt die **Abstoßung** zwischen ihnen die Oberhand zu gewinnen. Zwischen Abstoßung und Anziehung liegt ein **Gleichgewichtszustand**, bei dem beide Wechselwirkungskräfte gleich stark sind. Die beiden Atome verhalten sich so, wie wenn sie durch eine Feder miteinander verbunden wären. Dieser Gleichgewichtsabstand entspricht der Bindungslänge.

Die Anziehung, die das Molekül stabilisiert, ist die Anziehung zwischen den Kernen und der zwischen ihnen konzentrierten Elektronendichte. Diese Konzentrierung kann man sich als **Überlappung** der atomaren 1s-Orbitale vorstellen. Stellt man die atomare Wellenfunktion ψ_{1s} durch das Symbol $1s$ dar, dann ist die Elektronendichte um den Kern herum durch $|1s|^2$ gegeben. Durch Addition der beiden Wellenfunktionen $1s_a$ und $1s_b$ der Atome **a** und **b** entsteht ein **Molekülorbital**. Die Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung des Elektrons in einem solchen Molekülzustand wird durch das Absolutquadrat der molekularen Wellenfunktion gegeben: $|1s_a + 1s_b|^2$.

Beim H_2 -Molekül wird dieses Molekülorbital von den zwei Elektronen mit antiparallelem Spin besetzt: $\uparrow\downarrow$. Dieser Typ von Molekülorbital wird als **bindendes** Orbital bezeichnet.

Werden zwei atomare Wellenfunktionen $1s_a$ und $1s_b$ voneinander **subtrahiert**, ändert die molekulare Wellenfunktion $1s_a - 1s_b$ ihr Vorzeichen, so dass ihr Absolutquadrat auf der sogenannten **Knotenfläche** den Wert Null bekommt. Wenn sich im Molekül Elektronen in diesem Orbital befinden, ist die Wahrscheinlichkeit gleich null, sie dort in einer Ebene in der Mitte zwischen den Kernen, senkrecht zur Bindungsachse anzutreffen. Der größte Teil der Elektronendichte konzentriert sich im Raum außerhalb der beiden Kerne. Infolgedessen fällt die anziehende Wirkung der Elektronenwolke zwischen den Kernen fort und die Kerne stoßen sich gegenseitig ab. Dieser Orbitaltyp wird deswegen als **antibindend** bezeichnet. **Bindende** Orbitale werden als **σ -Bindung** bezeichnet, sofern sie nur aus der Linearkombination der entsprechenden ψ -Funktionen entstanden sind, antibindende Orbitale mit σ^* .

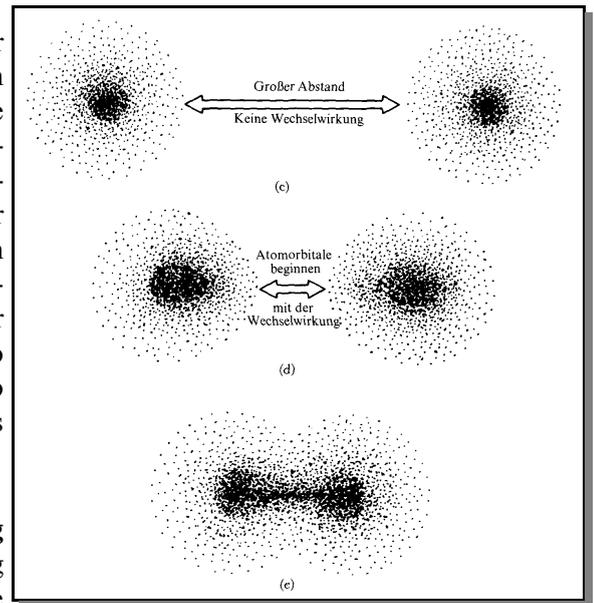


Abb. 22

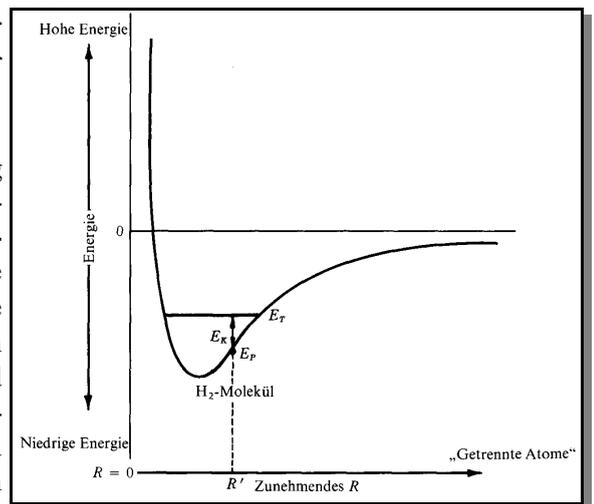


Abb. 23

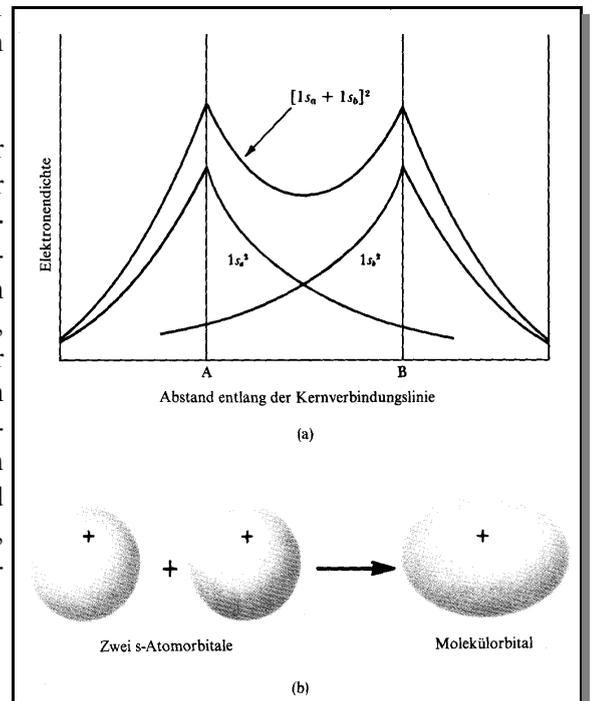


Abb. 24