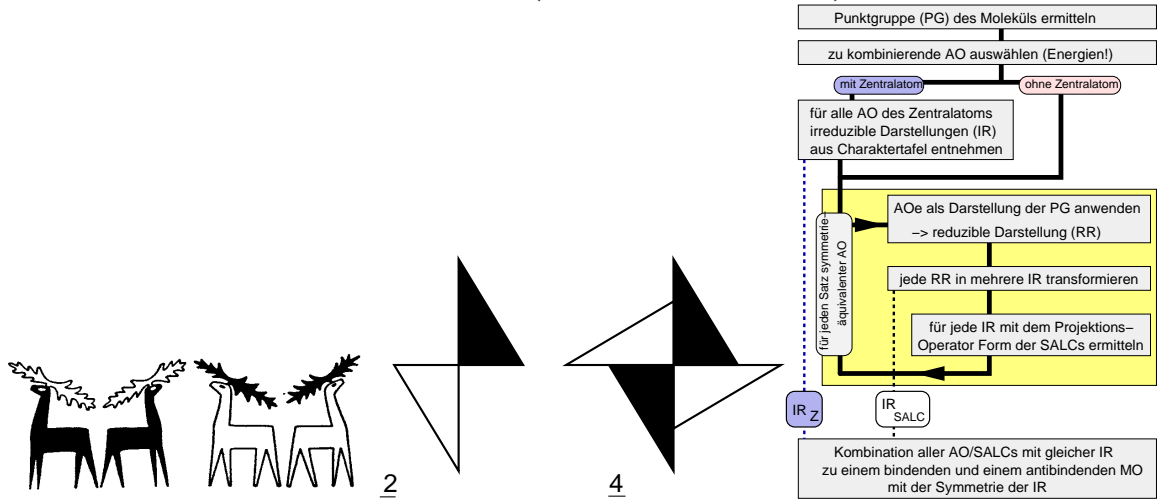


2.9. Anwendungen IV: MO-Theorie (Basis: Atomorbitale)



Antisymmetrie

Beispiel: H₂O

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=	3-1-2=	3+1-2=	3-1+2=		
	6	0	2	4		↪ 3 a ₁ , 1 b ₁ , 2 b ₂

Ergebnis: MOs: 3 a₁, 1 b₁, 2 b₂

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 ↪ AO haben Symmetrieeigenschaften einer irred. Darstellung)
$\varphi_1 = s_1 + s_2$	a ₁	2s, 2p _z
$\varphi_2 = s_1 - s_2$	a ₂	
	b ₁	2p _x
	b ₂	2p _y

