

# Bindungstypen

- kovalente Bindung (Austausch gemeinsamer Elektronen, Überlapp)
- ionische Bindung: wenn Elektronenaustausch zu erhöhter Elektronendichte auf Atom A und zu erniedrigter Elektronendichte auf Atom B führt → Anziehung der Ladungen  
 Bsp. 1. Spalte Periodensystem (H + Alkaliometalle)  
 + 7. Spalte:  $H^+Cl^-$ ,  $Na^+I^-$ ,  $Na^+Cl^-$   
 WW:  $\frac{1}{R}$  langreichweitig
- Van-der-Waals, zwischen neutralen, polarisierbaren Atomen schwach, kurzreichweitig  $\frac{1}{R^6}$
- Wasserstoffbrücken Anziehung zw. zwei Atomen durch ein  $H^+$  Ion  
 Proton polarisiert die beiden Atome → anziehende Kraft  
 Stärke: zw. VdW und Formisch

## Van-der-Waals Potential

Bei großen Kernabständen  $R > \langle r_A \rangle + \langle r_B \rangle \rightarrow$  kein Überlapp, Austausch kann auch gna behandelt werden (2. Ordnung Störungsrechnung), aber Physik ist hier klassischer Natur (d.h. das Prinzip braucht keine QM)

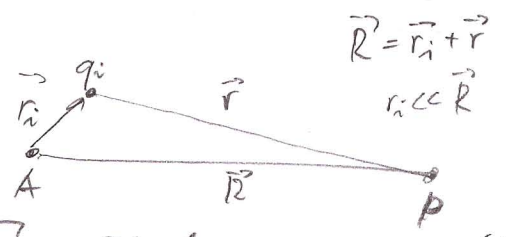
Anwesenheit Atom B verändert Ladungsverteilung Atom A  $\rightarrow$  polarisiert / koulombiert, Multipolentwicklung Coulomb WW entstehen und können Anziehend sein

Multipolentwicklung

$$\phi(R) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_i \frac{q_i(r_i)}{|\vec{R} - \vec{r}_i|}$$

$$r_i = (x_i, y_i, z_i)$$

$$R = (x, y, z)$$



$$\stackrel{\text{Taylor}}{=} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \sum_i q_i + \frac{1}{R} \left[ \frac{x}{R} \sum_i q_i x_i + \frac{y}{R} \sum_i q_i y_i + \frac{z}{R} \sum_i q_i z_i \right] \right\} \leftarrow \text{Dipol} \tag{89}$$

$$+ \frac{1}{2R^2} \left[ \left( \frac{3x^2}{R^2} - 1 \right) \sum_i q_i x_i^2 + \text{d.h. } y \text{ und } z \right] + O\left(\frac{1}{R^3}\right)$$

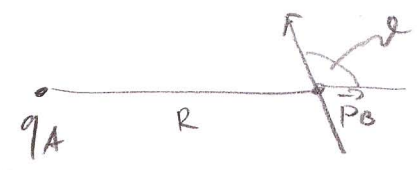
Quadrupol

$$= \phi_M(\sum q_i) + \phi_D(\sum p_i) + \phi_{QP}(\sum Q_{ij}) \tag{90}$$

Setze nun Atom B an Ort P, Atom A: Gesamtladung  $q_A$   
 Dipolmoment  $P_B$   
 Quadrupolmom.  $QM_B$

$$E_{pot} = q_B \cdot \phi(P) + \vec{P}_B \cdot \vec{\nabla} \phi + \underset{\text{matrix}}{QM_B} \cdot \vec{\nabla}^2 \phi + \dots \quad (91)$$

Monopol term  $\sim \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_A q_B}{R}$  (zwei Ionen)  
 Dipol term  $\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_A P_B \cos \theta}{R^2}$   
 Ion + Dipol  $\neq$  Verbindungspadze



$$(92)$$

Dipol + Dipol  
 $-\vec{P}_A \cdot E(P_B) \propto -\frac{P_A P_B}{4\pi\epsilon_0 R^3}$  (winkel funktion)  
 siehe Übung

$$(93)$$

Induziertes Dipolmoment zw. zwei neutralen Atomen:

$$\vec{P}_A^{ind} = \alpha_A \cdot \vec{E} \quad \alpha_A: \text{Polarisierbarkeit} \quad \vec{E}: \text{gegebenes Feld} \quad (94)$$

$$E_{pot} = -\vec{P}_A^{ind} \cdot \vec{E} = -\alpha_A \vec{E} \cdot \vec{E} \quad (95)$$

Für eine im zeitlichen Mittel kugelsymmetrische Ladungsverteilung der Elektronenhülle (z.B. H-Atom,  $1s, 2s$ )  $\rightarrow \langle \vec{P}_A \rangle = 0$ , aber momentanes Dipolmoment  $\vec{P}_A \neq 0$  mit Feld  $\vec{E}_A = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 R^3} (\vec{P}_A)$ .  
 Dieses Feld induziert in Atom B ein Dipolmoment  $\vec{P}_B^{ind} = \alpha_B \vec{E}_A$ , welches wiederum ein Feld  $\vec{E}_B$  am Ort A erzeugt. etc.  $\rightarrow \langle \vec{P}_A \rangle = \langle \vec{P}_B \rangle \neq 0$   
 induzierte Dipolmomente // Kernachse (z.B. 2-Atomiges Objekt)

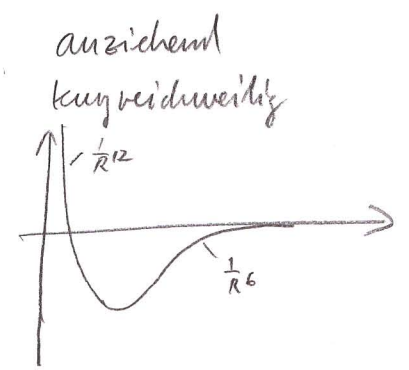
$$E_A = \frac{2P_A}{4\pi\epsilon_0 R^3} \hat{R} \quad E_B = \frac{2P_B}{4\pi\epsilon_0 R^3} \hat{R} \quad \text{Feld} \quad (96)$$

$$E_{pot} = -\vec{P}_B^{ind} \cdot \vec{E}_A = -\vec{P}_A \cdot \vec{E}_B \propto \alpha_A \alpha_B |E|^2 \propto -\frac{C}{R^6} \quad (97)$$

Weitere (höhere Ordnung) Terme Multipolentw.

$$\rightarrow R^{-8}, R^{-10}, R^{-12}, \dots$$

empirisch  $E_{pot} = \frac{a}{R^{12}} - \frac{b}{R^6}$  Lennard-Jones Potential  $(98)$



Born-Oppenheimer Näherung:  $\Psi(r, R) = \chi(R) \cdot \psi(r, R)$  (99)

$\uparrow$                        $\uparrow$   
 Kern                      Elektronen

mit Kerngleichung:  $\{T_N + \epsilon_n(R)\} \chi(R) = E \chi(R)$  (100)

ausgeschrieben:  $\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M_A} \Delta_A - \frac{\hbar^2}{2M_B} \Delta_B + E_{pot}(R) \right\} \chi = E \chi$

2-Atomig  $\uparrow$   
nur  $|R\rangle$  abhängig

wieder wie H-Atom: Schwerpunktsystem, reduzierte Masse

$$M = \frac{M_A M_B}{M_A + M_B} \quad (101)$$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + E_{pot}(R) \right\} \chi(R) = E \chi \quad (102)$$

$$\chi = \chi(R, \vartheta, \varphi) = S(R) Y(\vartheta, \varphi) \rightarrow \text{quantenzahl } J \quad (103)$$

Radial gl.:  $\frac{1}{R^2} \frac{d}{dR} \left( R^2 \frac{dS}{dR} \right) + \frac{2M}{\hbar^2} \left[ E - E_{pot}(R) - \frac{J(J+1)\hbar^2}{2MR^2} \right] S = 0 \quad (104)$

Winkel gl.:  $\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial Y}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} + J(J+1)Y = 0 \quad (105)$

Starrer Rotator

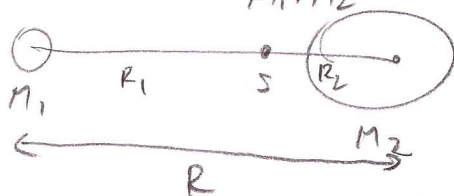
starr  $\rightarrow R = \text{fix}, \frac{d}{dR} = 0 \rightarrow [ ] \text{ in } (104) = 0, E = E_{kin} + E_{pot} = E_{rot} + E_{pot}$

$\rightarrow E_{rot} = \frac{J(J+1)\hbar^2}{2MR_0^2} \quad J = 0, 1, 2, \dots$  diskrete Energien (106)

erhält man auch „klassisch“  $E_{rot} = \frac{1}{2} I \omega^2$   $\omega$ : Winkelgeschw. (107)

$I = \text{Trägheitsmoment} = M_1 R_1^2 + M_2 R_2^2 = MR^2$  (108)

$M = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$  reduzierte Masse



Drehimpuls  $|J| = I \omega$  (109)

$J^2 = J(J+1)\hbar^2$  H-Atom Formel (110)

$\rightarrow E_{rot} = \frac{1}{2} I \omega^2 = \frac{1}{2} \frac{J^2}{I}$