

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 gm behandelt werden (2. Ordnung Störungsrechnung), aber Physik ist hier klassischer Natur (d.h. das Prinzip braucht keine QM)

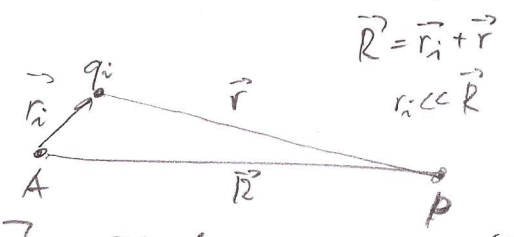
Anwesenheit Atom B verändert Ladungsverteilung Atom A \rightarrow polarisiert / koulombiert, Multipolentwicklung Coulomb WW entstehen und können Anziehend sein

Multipolentwicklung

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

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

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



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

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

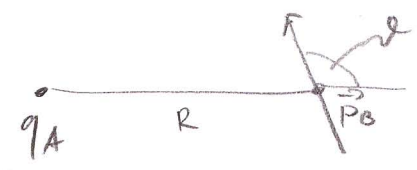
Quadrupol

$$= \phi_M(\sum q_i) + \phi_D(\sum p_i) + \phi_{QP}(\sum Q_i \vec{m}_i) \tag{90}$$

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

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

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:

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

\vec{E} : gegebenes Feld

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

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 E_B am Ort A erzeugt. etc. $\rightarrow \langle P_A \rangle = \langle P_B \rangle \neq 0$
 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 $E_{pot} = \frac{a}{R^{12}} - \frac{b}{R^6}$ (98)
 Lennard-Jones Potential

