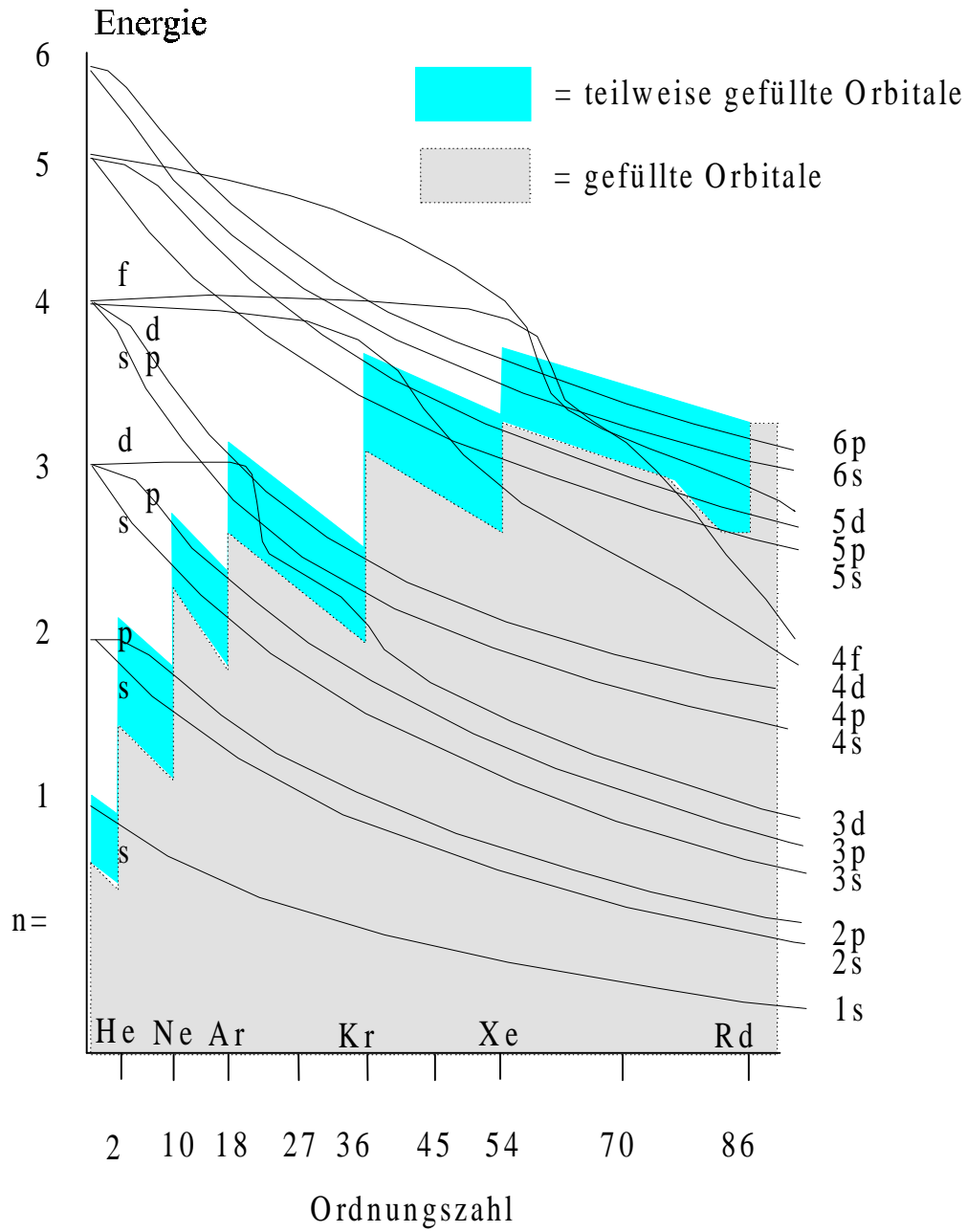


G6: Die Energie von Atomorbitalen



G8: Kombination von Atomorbitalen zu Molekülorbitalen und ihre relative energetische Lage

Die Kombinationen erfolgen hier systematisch. Aus jedem bestehenden Molekülorbital von n Atomen werden zwei Molekülorbitale von $n+1$ Atomen konstruiert, indem ein weiteres Atomorbital einmal positiv und einmal negativ mit dem bestehenden MO kombiniert wird. Zur Charakterisierung wird das Orbital mit einer Buchstabenfolge aus a und b versehen: a = antibindende, b = bindende AO-Kombination. Die Reihenfolge spielt für die energetische Lage keine Rolle: $aab = aba$. Schlussendlich entscheidet die Zahl der Netto-Bindungen (Total b - total a) über die energetische Lage. Wie die MO unter Berücksichtigung grösstmöglicher Symmetrie aussehen, ist der Grafik 9 zu entnehmen.

Man beachte: Bei sehr grossem n nähern sich die Energien einem konstanten Wert an.

