

Aufbau von Molekül-Orbitalen

- 1) Die Wechselwirkung von zwei (Atom-)Orbitalen führt zur Bildung einer bindenden (energetisch günstigen) und einer anti-bindenden (energetisch ungünstigen) Kombination.
- 2) Nur Orbitale gleicher Symmetrie können miteinander wechselwirken.
- 3) Die Wechselwirkung ist um so stärker, je grösser die Überlappung ist.
- 4) Die Wechselwirkung ist um so stärker, je geringer die Energiedifferenz der wechselwirkenden Orbitale ist.
- 5) Bei Wechselwirkung von (Atom-)Orbitalen unterschiedlicher Energie dominiert das niedriger liegende (Atom-)Orbital die Form der günstigeren Kombination und das höher liegende (Atom-)Orbital die Form der ungünstigeren Kombination.
- 6) Die Kombination von n Atomorbitalen ergibt n Molekülorbitale.