

3.5 The Salem-Klopman Equation

Using perturbation theory, Klopman and Salem¹⁴ derived an expression for the energy (ΔE) gained and lost when the orbitals of one reactant overlap with those of another. Their equation has the following form:

$$\Delta E = \underbrace{-\sum_{ab} (q_a + q_b)\beta_{ab}S_{ab}}_{\text{first term}} + \underbrace{\sum_{k<l} \frac{Q_k Q_l}{\epsilon R_{kl}}}_{\text{second term}} + \underbrace{\sum_r^{\text{occ.}} \sum_s^{\text{unocc.}} - \sum_s^{\text{occ.}} \sum_r^{\text{unocc.}} \frac{2(\sum_{ab} c_{ra} c_{sb} \beta_{ab})^2}{E_r - E_s}}_{\text{third term}} \quad 3.4$$

q_a, q_b	<i>Elektronenpopulationen in den Atomorbitalen</i>
β	<i>Resonanzintegral</i>
S	<i>Überlappungsintegral</i>
Q_k, Q_l	<i>Gesamtladungen an den Atomen k und l</i>
R_{kl}	<i>Abstand der Atome k und l</i>
c_{ra}	<i>Koeffizient des Atomorbitals a im Molekülorbital r des einen Reaktionspartners</i>
c_{sb}	<i>Koeffizient des Atomorbitals b im Molekülorbital s des anderen Reaktionspartners</i>

- 1. Term: Abstoßung der besetzten Orbitale*
- 2. Term: Coulomb-Abstoßung oder -Anziehung*
- 3. Term: Wechselwirkung der gefüllten und ungefüllten Orbitale korrekter Symmetrie*