

Modul Anorganische Chemie – 242. Koordinationschemie – Prof. C. Janiak

Übungsbogen 3 – Kristallfeld-Theorie

Aufgabe 1: Schätzen Sie die Größe der Oktaeder-Kristall/Ligandenfeldaufspaltung für die folgenden Komplexe nach $\Delta_o = f \times g$ ab:

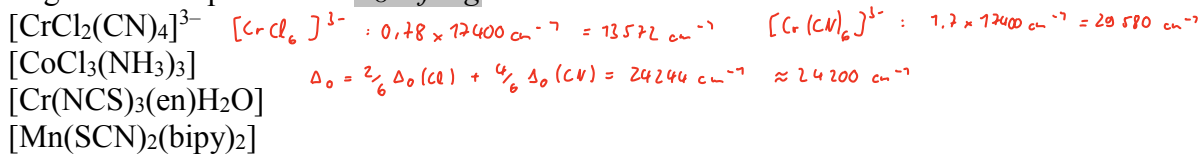
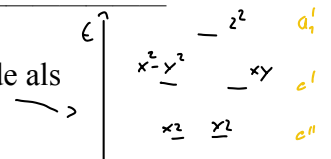


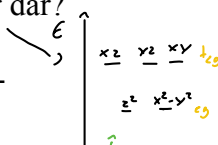
Tabelle. f - und g -Werte von ausgewählten Liganden und Metallionen.

Ligand	f	Ligand	f	Metallion g [cm^{-1}]	Metallion g [cm^{-1}]
6 Br^-	0.72	6 NCS^-	1.02	V^{2+}	12 000
6 SCN^-	0.73	6 py	1.23	Mn^{2+}	8 000
6 Cl^-	0.78	6 NH_3	1.25	Co^{2+}	9 300
6 F^-	0.9	3 en	1.28	Ni^{2+}	8 700
6 H_2O	1.00	3 bipy	1.33	Ru^{2+}	20 000
		6 CN^-	1.7	Cr^{3+}	17 400
				Fe^{3+}	14 000
				Co^{3+}	18 200
				Rh^{3+}	27 000
				Ir^{3+}	32 000
				Mn^{4+}	23 000
				Pt^{4+}	36 000

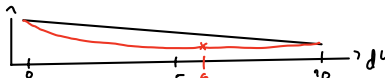
Aufgabe 2: Leiten Sie die Kristallfeldaufspaltung für eine trigonale Bipyramide als Koordinationspolyeder her.



Aufgabe 3: Wie stellt sich die Kristallfeldaufspaltung beim Würfel als Koordinationspolyeder dar?



Aufgabe 4: Skizzieren Sie den erwarteten Kurvenverlauf für die Radien von zweiwertigen 3d-Metallionen mit low-spin Konfiguration.



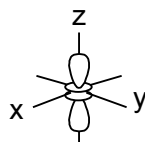
Aufgabe 5: Leiten Sie die Aufspaltung der f-Orbitale im oktaedrischen Kristallfeld her. (Für eine Abbildung aller sieben f-Orbitale siehe C. Becker, *J. Chem. Ed.* **1964**, 41, 358.)

Mitler wie Tchebyscheff
der gut die
Aufgabe

v_g, a_n

t_{1g}

t_{1g}

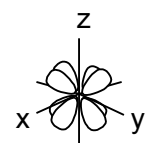


f_z^3 , in gleicher Weise liegen f_x^3 und f_y^3 entlang der jeweiligen Achsen

Am höchsten

t_{2g}

t_{2g}

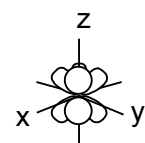


$f_{(x^2-y^2)z}$, mit den 8 Orbitallappen entlang der 8 Winkelhalbierenden zwischen z- und x- sowie zwischen z- und y-Achse; entsprechend liegen auch die 8 Orbitallappen von $f_{(z^2-y^2)x}$ und $f_{(z^2-x^2)y}$ entlang solcher Winkelhalbierenden

Mitte

a_{2g}

a_{1g}



f_{xyz} mit 8 Orbitallappen entlang der 8 Raumdiagonalen

Am niedrigsten

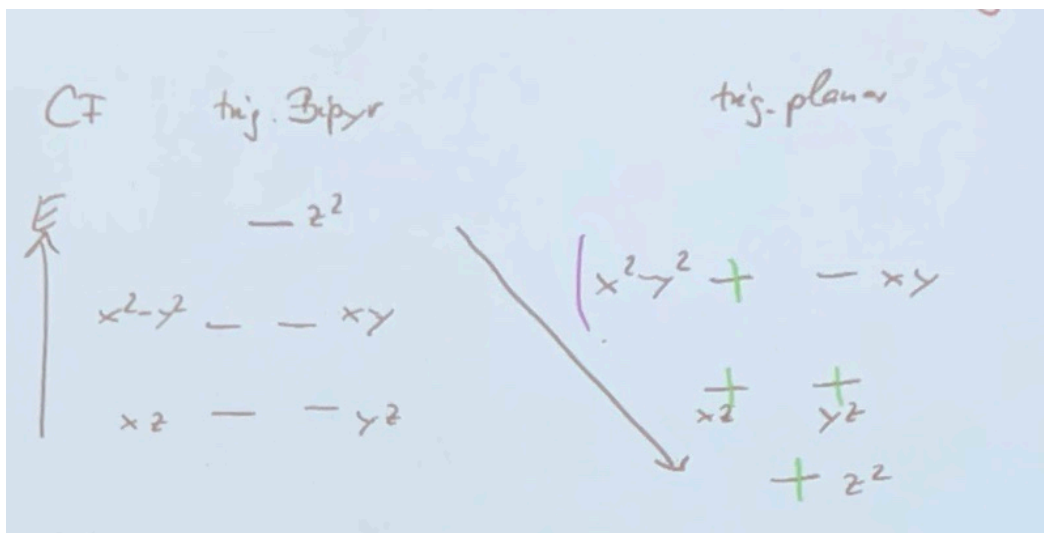
Aufgabe 6: Zeigen Sie, dass man für ein D_{3h} -symmetrisches MnF_3 -Molekül eine Jahn-Teller-Verzerrung erwarten sollte.

d^4

III d^4
Schwacher Ligand \rightarrow ht

Aufgabe 7: Man kennt bei Chrom(II)-Komplexen mit Halogenido-, O- und O/N-Donorliganden stabile quadratisch-planare Komplexe. Erklären Sie das Zustandekommen dieses Koordinationspolyeders für Cr(II).

d^8 aber h_s



oder $x^2 - y^2$ and xy

!!

J.T. - Verzerrung

