

Spørsmål 1

8 av 10 poeng

Gi en kort beskrivelse av krystallfeltteorien for tetraedriske d-metallkomplekser. Kan tetraedriske komplekser både ha høyspinn og lavspinn?

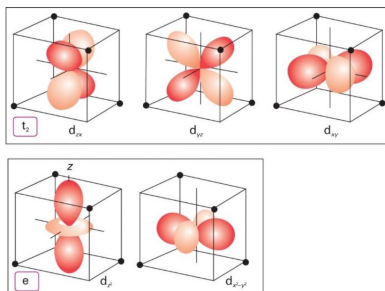
Valgt svar: Slik som på oktaedere så ser vi for oss at det plasseres negative punktladninger der ligandene ville blitt plassert. Vi kan se for oss en terning hvor det blir plassert punktladninger i to hjørner på topp og to på bunn s.a. det dannes et tetraeder når man trekker opp plan/linjer mellom punktene.
Hvilke orbitaler som har høy energi og lav er motsatt av for oktaedere.
Vi får høy energi i gruppen t_2 , som består av: d_{xy} , d_{xz} , d_{yz}
Vi får lav energi i gruppen e som består av $d_{x^2-y^2}$ og d_{z^2}

Tilbakemelding på respons: Bra, mangler forklaring om at tetraedriske komplekser bare har høyspinn, fordi Δ_T er liten.

Spørsmål 2

10 av 10 poeng

Vis hvordan d-orbitalene splittes opp i et tetraedrisk kompleks ved å lage en skisse.



Spørsmål 3

10 av 10 poeng

Hva er elektronkonfigurasjonen for Co^{2+} i det tetraedriske komplekset CoCl_4^{2-} ? Beregn LFSE for Co^{2+} i CoCl_4^{2-} og angi dette med benevnning Δ_T og Δ_O .

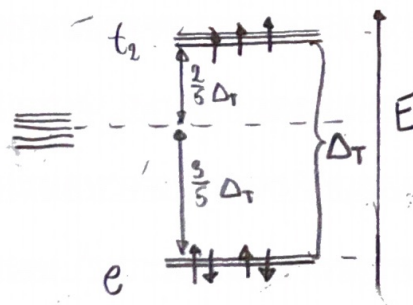
Valgt svar: Elektronkonfigurasjon Co^{2+} : $[\text{Ar}]3d^7 \Rightarrow d^7$ - ion
Dette er en tetraedrisk forbindelse
De aller aller fleste tetraedriske forbindelser er høyspinn, så jeg antar at dette er tilfellet her også.
Dette gir elektronkonfigurasjon i komplekset: $(e)4(t_2)3$
 $\text{LFSE} = (0.6 \times 4 - 0.4 \times 3) \Delta_T = (0.6 \times 4 - 0.4 \times 3) \Delta_T = 1.2 \Delta_T = 0.53333 \Delta_O$
(Siden Δ_T er tilnærmet $4/9 \Delta_O$)

Tilbakemelding på respons: [Ingen gitt]

Spørsmål 4

10 av 10 poeng

Gi en illustrasjon av elektronkonfigurasjonen i det tetraedriske krystallfeltet til CoCl_4^{2-} .



Spørsmål 5

10 av 10 poeng

Hva er elektronkonfigurasjonen for Co^{3+} i det oktaedriske komplekset CoF_6^{3-} når du vet at CoF_6^{3-} er paramagnetisk? Hva kalles spinnstilstanden?

Valgt svar: Elektronkonfigurasjon Co^{3+} : $[\text{Ar}]3d^6 \Rightarrow d^6$ - ion
Paramagnetisk: Det finnes uparede elektron.
Siden vi har et partall med elektroner i d-orbitalene, betyr dette at vi må ha høyspinn for at det skal være uparede elektron, dette gir at konfigurasjonen i komplekset blir: $(t_{2g})^4(eg)^2$

Tilbakemelding på respons: [Ingen gitt]

Spørsmål 6

8 av 10 poeng

Forklar krystallfeltteorien for plankvadratiske komplekser. På hvilken måte splittes d-orbitalene?

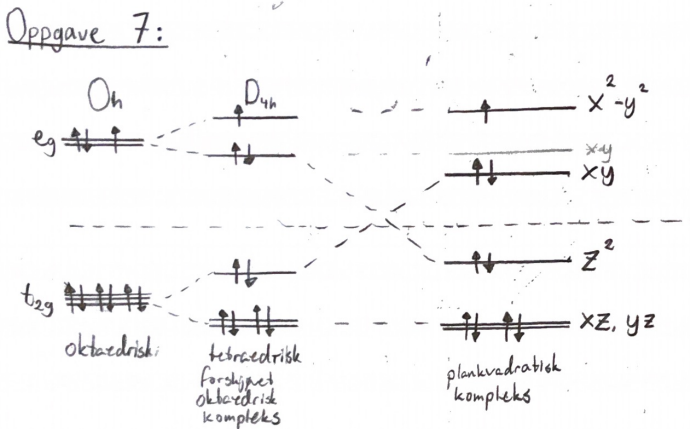
Valgt svar: Man ser for seg at du starter med et oktaedrisk kompleks. Så fjerner du ligandene langs z-aksen. Dette fører til at eg og t_{2g} splittes opp. Man får da MO-diagram slik at orbitalene fra lavest energi blir: (xz og yz er samlet på lik energi) ($dxz + dyz$), dxy, dz^2 og $d(x^2 - y^2)$

Tilbakemelding på respons: Bra, kan kort utdype litt mer og spesifisere at det er de orbitalene som inneholder z-aksen, dz^2 , dxz og dyz som går ned i energi.

Spørsmål 7

10 av 10 poeng

Illustrer overgangen fra oktaedrisk oppsplitting av krystallfeltet via tetragonalt forskyvet oktaedrisk kompleks til plankvadratisk kompleks.



Spørsmål 8

8 av 10 poeng

Definer basissettet til et oktaedrisk kompleks. Hvilke atomorbitaler kan danne σ -overlapp og π -overlapp med hverandre?

Valgt svar: Oppgave 4, 7 og 8 - Øving 10 - UK.pdf

Tilbakemelding på respons: Bra, de tre orbitalene som ikke danner sigma-overlapp har faktisk mulighet for å danne pi-overlapp selvom vi noen ganger ser bort ifra dette.

Oppgave 8:

For sentralatomet: $s, p_x, p_y, p_z, dz^2, dx^2 - y^2, dxy, dxz, dyz$

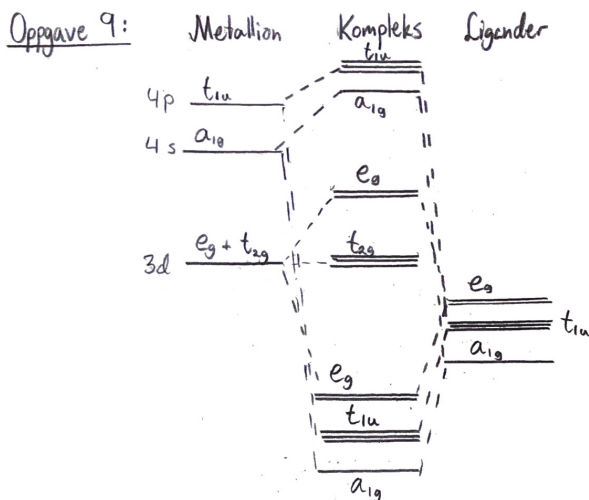
Kan danne σ -overlapp med ligander: $s, p_x, p_y, p_z, dz^2, dx^2 - y^2$

Kan ikke danne σ -overlapp: dxy, dxz, dyz

Ligandene: Ser på en og en orbital fra hver av de 6 ligandene og ser hvilke som kan danne σ -symmetri (også σ -orbitaler) ved å se på dette, får vi:

a_{1g}, t_{1u}, e_g

Skisser MO-diagrammet for et oktaedrisk kompleks som beskrevet i oppgave 8. Se bort fra π -overlapp hvis du vil.



Spørsmål 10

10 av 10 poeng

Hva mener vi med en π -donor- og en π -akseptorligand? Er energinivået til AO for en π -donor og π -akseptor høyere eller lavere enn energien til d-orbitalene til sentralatomet? Hvilken type ligand gir størst Δ_O : en π -donor eller en π -akseptor?

Valgt svar: Donor: har fulle orbitaler med π -symmetri, og kan danne overlapp med dxy, dxz og dyz orbitalene til sentralatomet. Energinivået til en AO fra donor ligger lavere energien fra d-orbitalene til sentralatomet.
 Akseptor: har tomme orbitaler med π -symmetri, og kan danne overlapp med dxy, dxz og dyz orbitalene til sentralatomet. Energinivået til en AO fra donor ligger lavere energien fra d-orbitalene til sentralatomet.
 Vi får størst Δ_O ifra en akseptor.

Tilbakemelding på respons: [Ingen gitt]

Spørsmål 11

10 av 10 poeng

Benytt ligandfeltteorien til å diskutere hvordan MO-diagrammet til et oktaedrisk kompleks endres ved Jahn-Teller-forskyvning.

Valgt svar: Jahn-Teller forskyvning: f.eks: Dra i ligandene som ligger langs z-aksen. Avstanden mellom ligandene og sentralatomet øker, hvilket gjør at interaksjonene mellom orbitalene går ned. Dette medfører at ligandene som har elektrontetthet ved z-aksen vil gå ned i energi, altså d_{z^2} , dxz og dyz. Dette gjør igjen at $d_{x^2-y^2}$ og dxy går opp i energi. Vi får dermed en oppsplitting av eg og t2g grupperingene. Denne oppsplittingen er skissert i skissen lagt ved til Oppgave 7, i mellomsteget mellom oktaedrisk og plankvadratisk. (Det kan være litt vanskelig å se navnene på orbitalene, men de står på høyre siden, så det er bare å følge linjene)

Tilbakemelding på respons: Bra, noen ganger ser vi bort ifra π -overlapp, men er fortsatt teoretisk riktig å si at vi får oppsplitting i t2g også.