

## Stichpunkte zur Lösung zum Übungsblatt 3

1. Orbitalskizze s. Vorlesung Kapitel zur „Jahn-Teller-Verzerrung“

Im Grundzustand für z.B. folgende Konfigurationen relevant:  $d^9$  ( $\text{Cu}^{2+}$ );  $d^7$  ( $\text{Co}^{2+}$ ,  $\text{Ni}^{3+}$ );  $d^4$  ( $\text{Cr}^{2+}$ ,  $\text{Mn}^{3+}$ ).

2. Je größer die Ox.-stufe, desto größer die Feldaufspaltung:  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$ , 22900;  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$ , 10200; Die Feldaufspaltung im Tetraeder beträgt nur ca. 4/9 vom Oktaeder, deshalb:  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$ , 5900.

3. Praktisch wird im Tetraeder nur der hs-Fall beobachtet! Berechnung der Magnetmomente mittels der spin-only-Formel.

Berechnung LFSE, Bsp.:  $e^2 t_{2g}^2 (d^4)$ .  $\text{LFSE} = 2 \times (-3/5) + 2 \times (2/5) = -4 \text{ Dq}$ ; relativ zum Oktaeder:  $(-4 \text{ Dq}) \times 4/9 = -1.78 \text{ Dq}$ .

4. für  $\text{Cr}^{2+}$  und  $\text{Mn}^{3+}$  (jeweils  $d^4$ ).

5. vgl. im Vorlesungsskript: oktaedrischer Komplex für  $\sigma$ -gebundenen Komplex.

6. LMCT-Übergänge; es handelt sich hierbei um *erlaubte* Übergänge, daher steigen die Extinktionskoeffizienten auf Größenordnungen von  $100 - 10^6 \text{ L mol}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ , Bsp.  $[\text{Fe}^{\text{III}}(\text{SCN})(\text{H}_2\text{O})_5]^{2+}$  zeigt schon eine blutrote Farbe.