

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 (Cu^{2+}); d^7 (Co^{2+} , Ni^{3+}); d^4 (Cr^{2+} , 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 Cr^{2+} und Mn^{3+} (jeweils d^4).

5. vgl. im Vorlesungsskript: oktaedrischer Komplex für σ -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. $[\text{Fe}^{III}(\text{SCN})(\text{H}_2\text{O})_5]^{2+}$ zeigt schon eine blutrote Farbe.