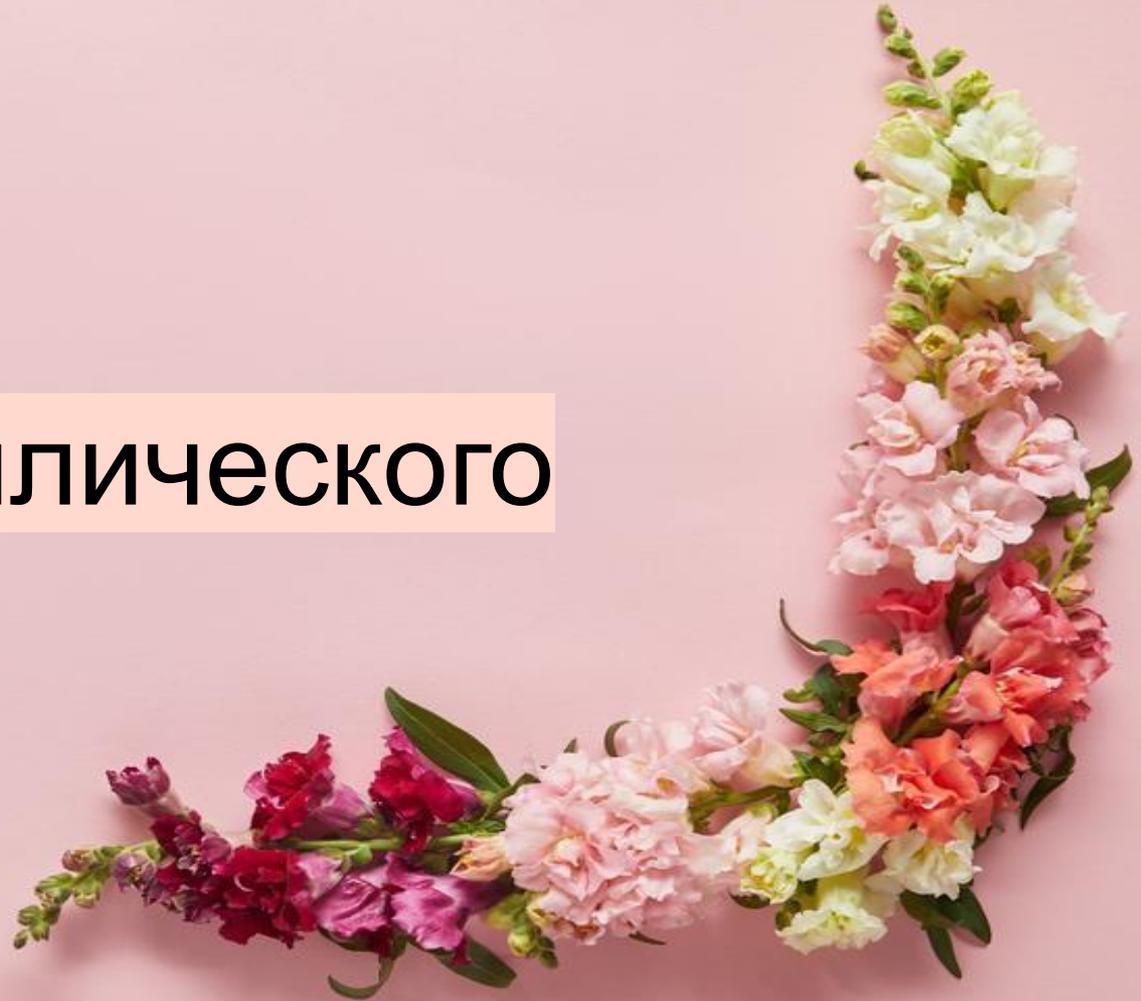


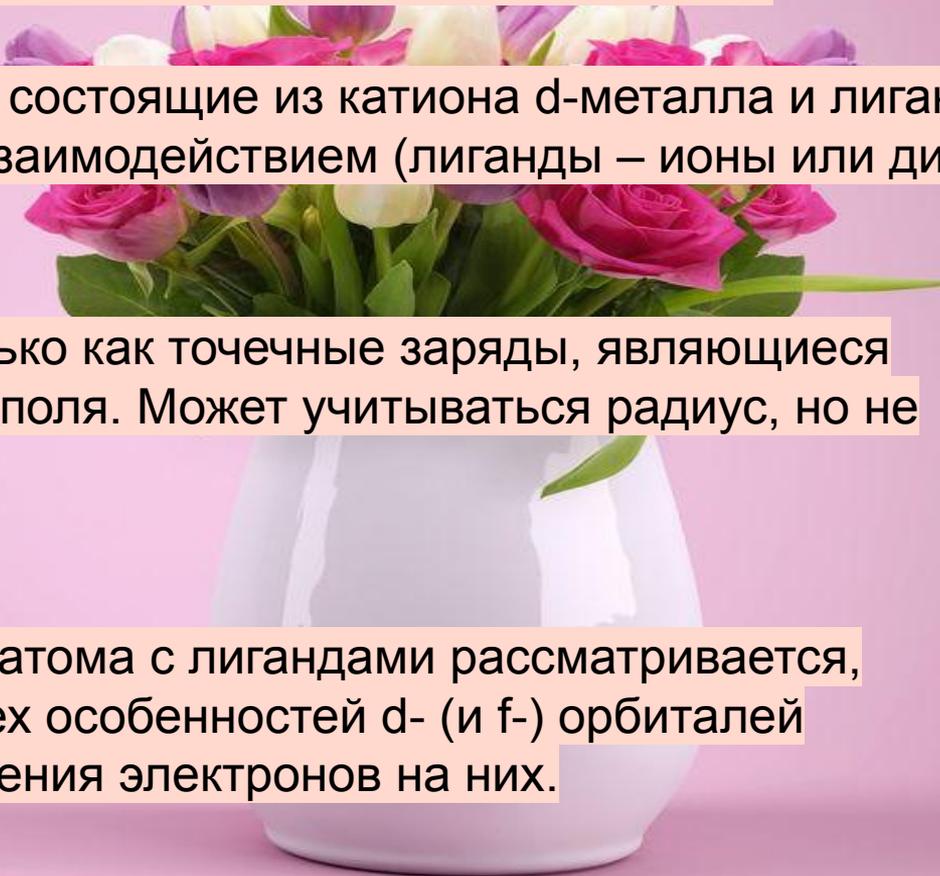


Теория  
Кристаллического  
Поля



# Общие положения ТКП

- ♥ 1. Рассматриваются соединения, состоящие из катиона d-металла и лигандов, связанных электростатическим взаимодействием (лиганды – ионы или диполи).
- ♥ 2. Лиганды рассматриваются только как точечные заряды, являющиеся источником электростатического поля. Может учитываться радиус, но не структура.
- ♥ 3. Взаимодействие центрального атома с лигандами рассматривается, напротив, подробно: с учетом всех особенностей d- (и f-) орбиталей центрального атома и распределения электронов на них.



# Метод ТКП объясняет и предсказывает:

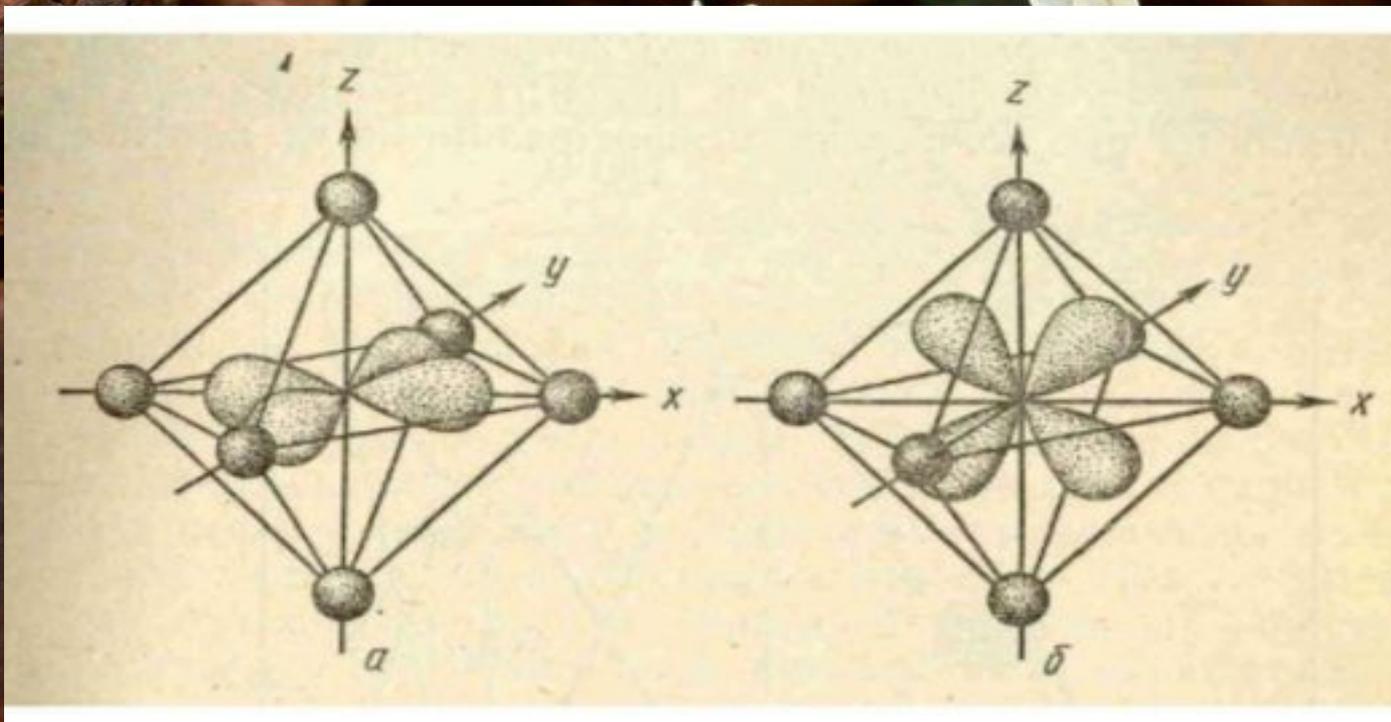
- ♥ Геометрическое и электронное строение комплексов
- ♥ Магнитные свойства комплексов
- ♥ Окраску комплексов
- ♥ Т/Д устойчивость комплексов

♥ Не объясняет и не предсказывает:

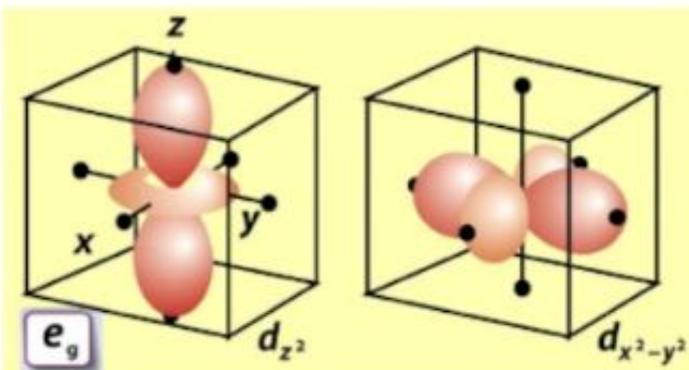
- ♥ Положение металлов и лигандов в спектрохимических рядах
- ♥ Образование кратных связей М-М, М-Л.

# Октаэдрическое окружение центрального атома лигандами

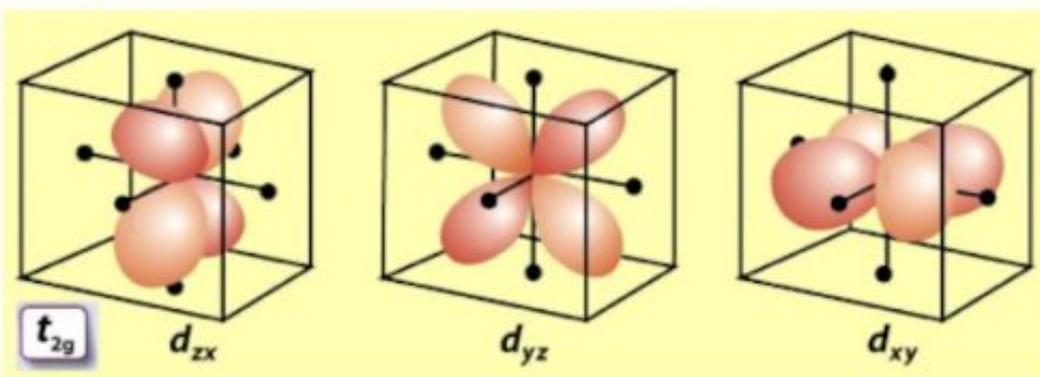
- Различные d-орбитали по-разному взаимодействуют с точечными зарядами первой координационной сферы:



# Октаэдрическое поле

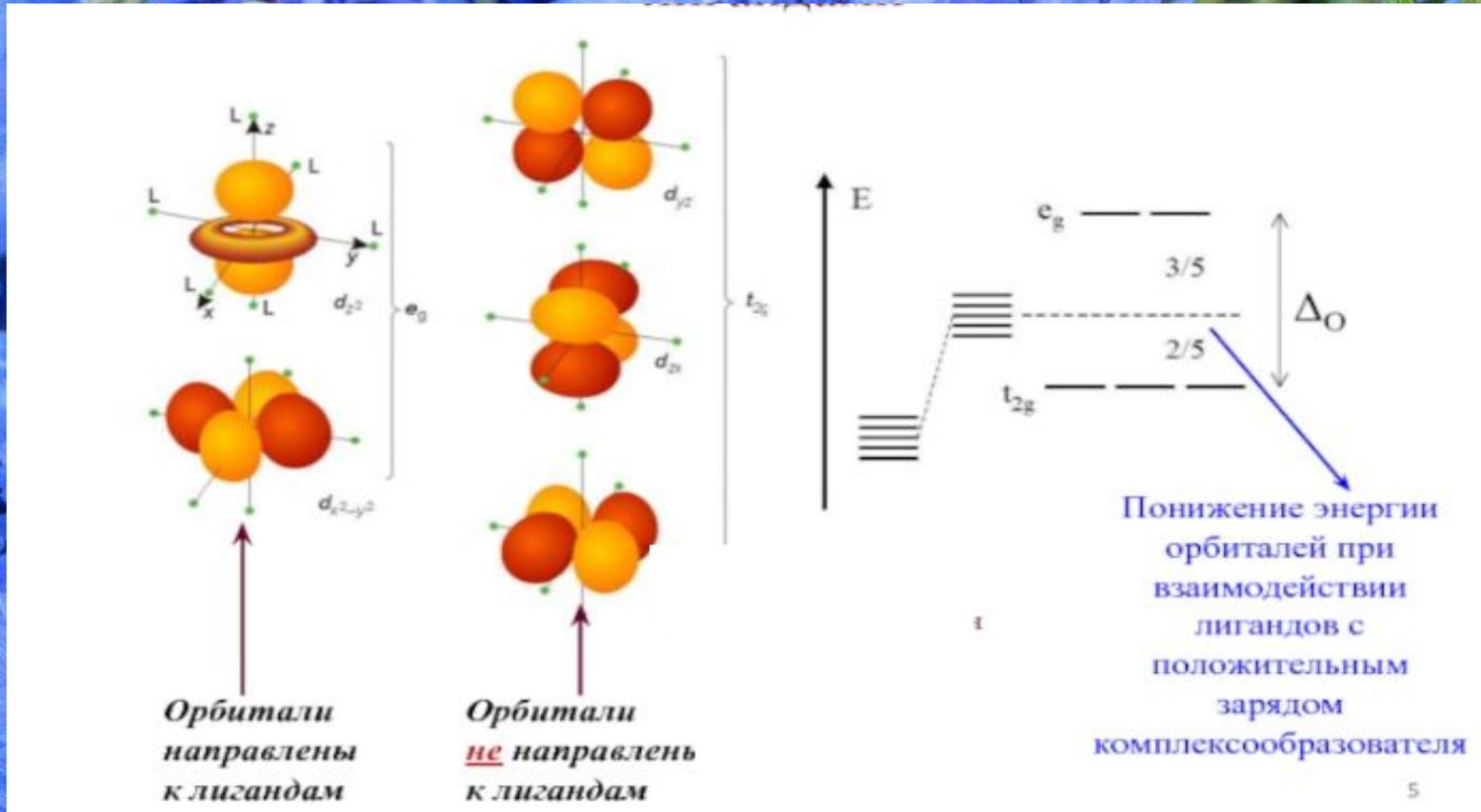


Орбитали направлены к лигандам

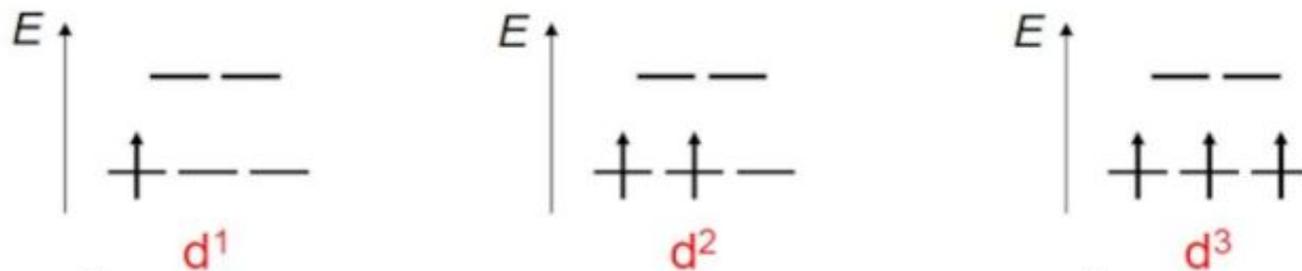


Орбитали не направлены к лигандам

# Октаэдрическое окружение центрального атома лигандами

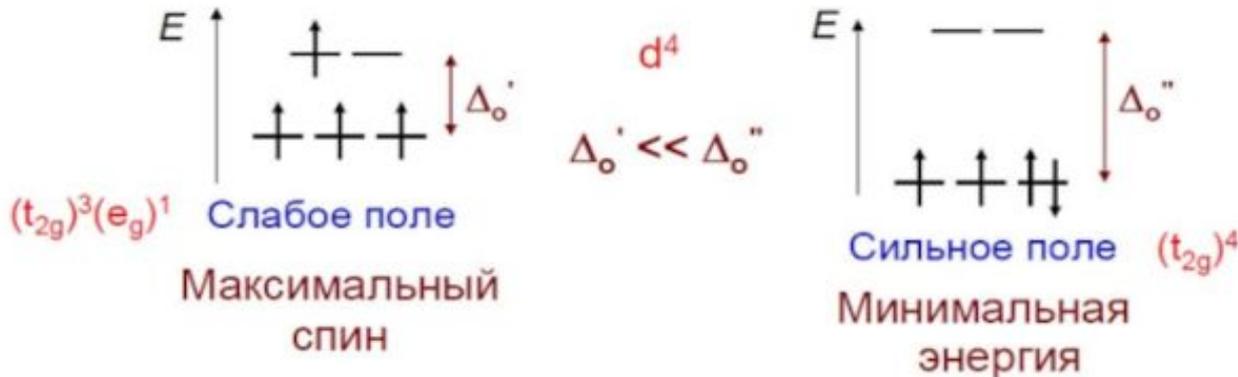


# Сильное и слабое октаэдрическое поле

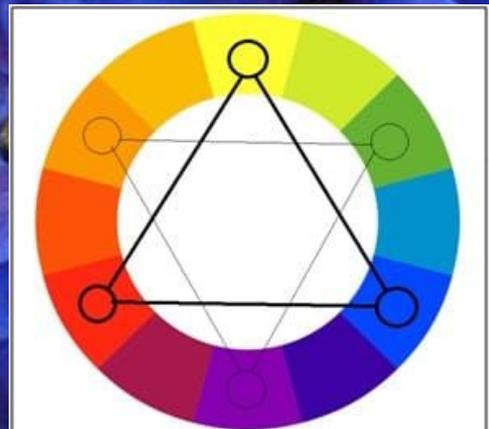
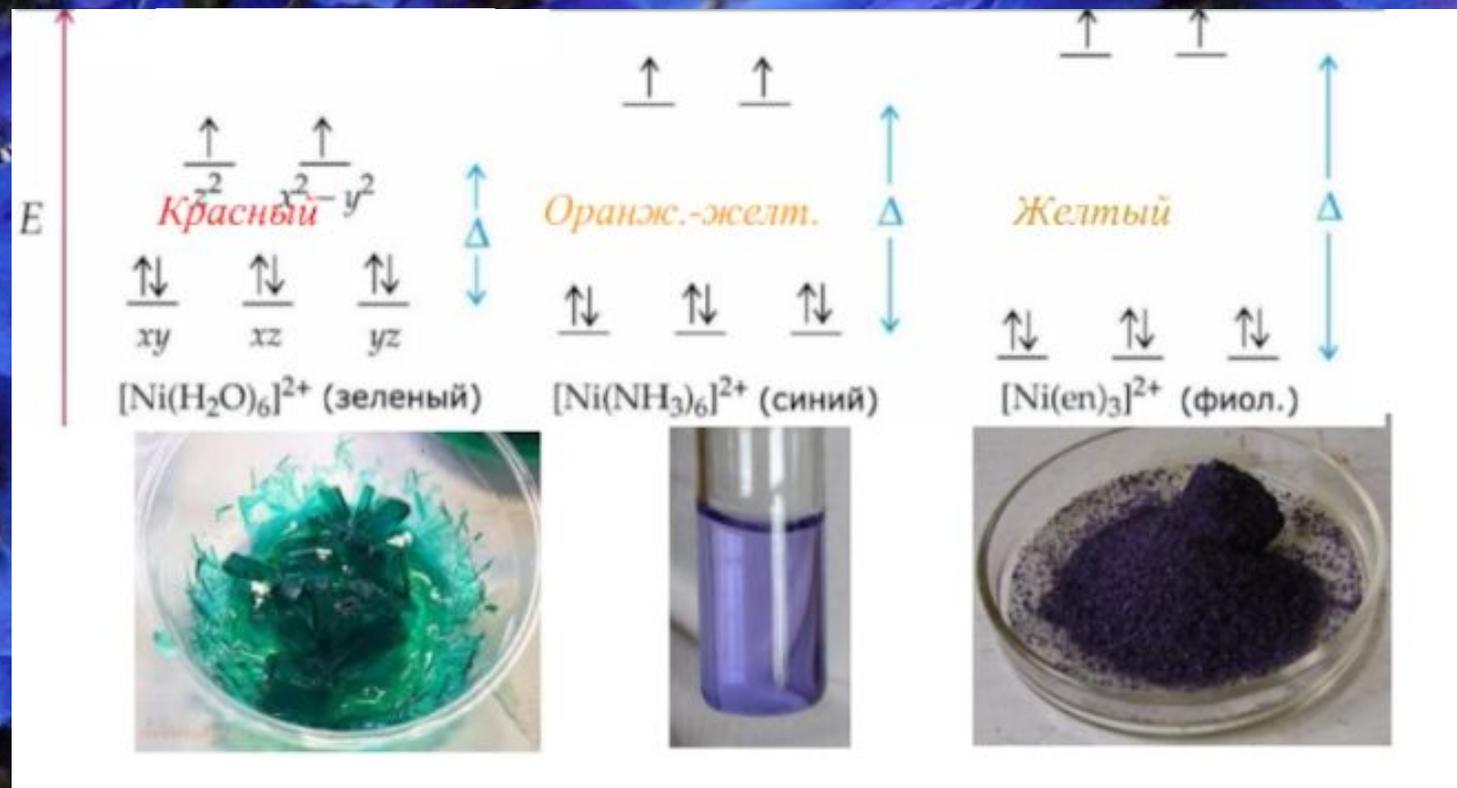


Борьба двух противоположных тенденций:

1. Стремление к максимальному спину
2. Стремление к минимуму энергии



# Пример расщепления в октаэдрических комплексах Ni<sup>2+</sup>



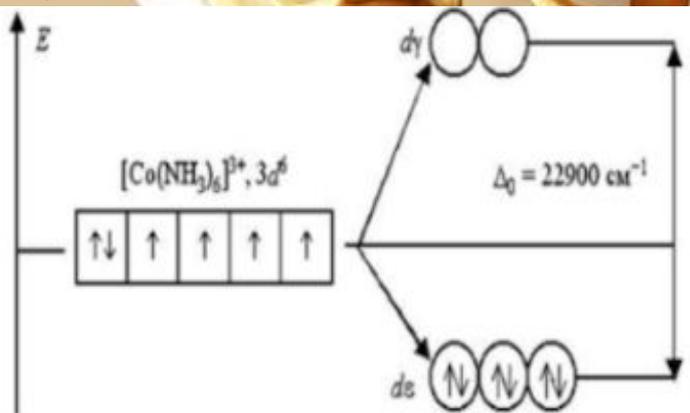
Триада цветов

# Зависимость $\Delta$ от лиганда

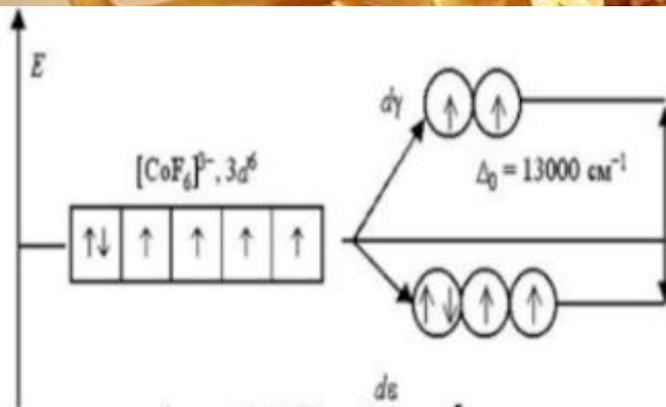
## Спектрохимический ряд лигандов

$\text{CO}, \text{CN}^- > \text{NO}_2^- > \text{этилендиамин} > \text{NH}_3 > \text{NCS}^- > \text{H}_2\text{O} > \text{OH}^- \rightarrow \text{F}^- \rightarrow \text{SCN}^- \rightarrow \text{Cl}^- \rightarrow \text{Br}^- \rightarrow \text{I}^-$

$E_{\text{(отталкивания электронов)}}(\text{Co}^{3+}) = 251 \text{ кДж/моль}$



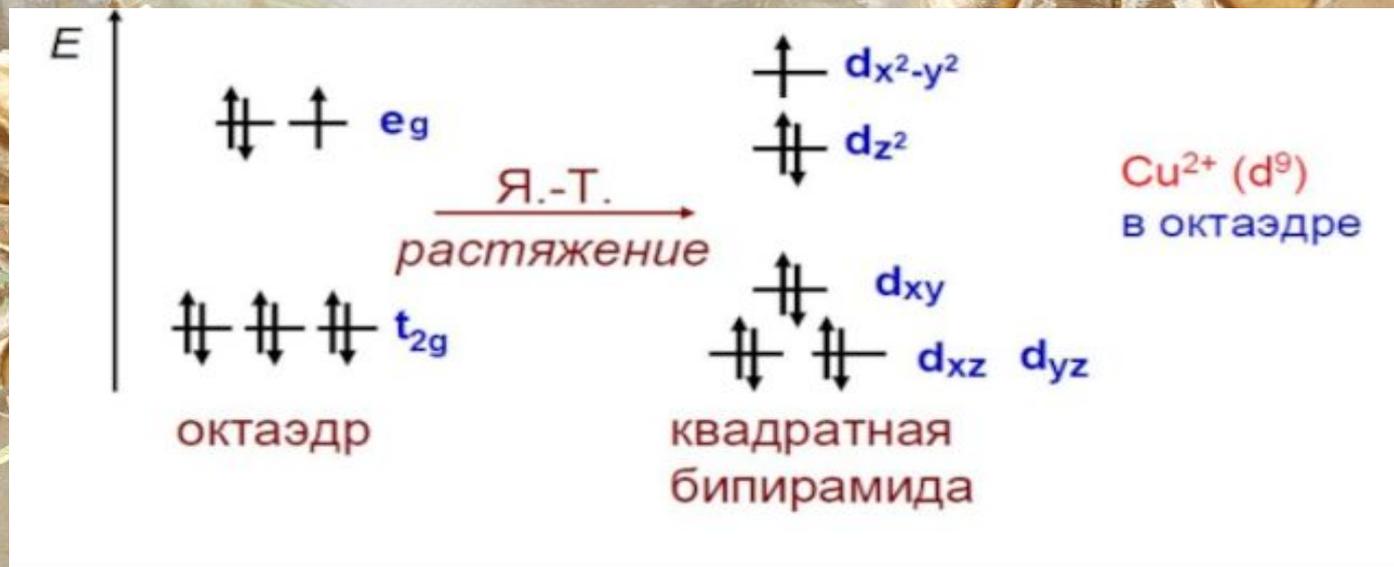
$\Delta = 265 \text{ кДж/моль}$



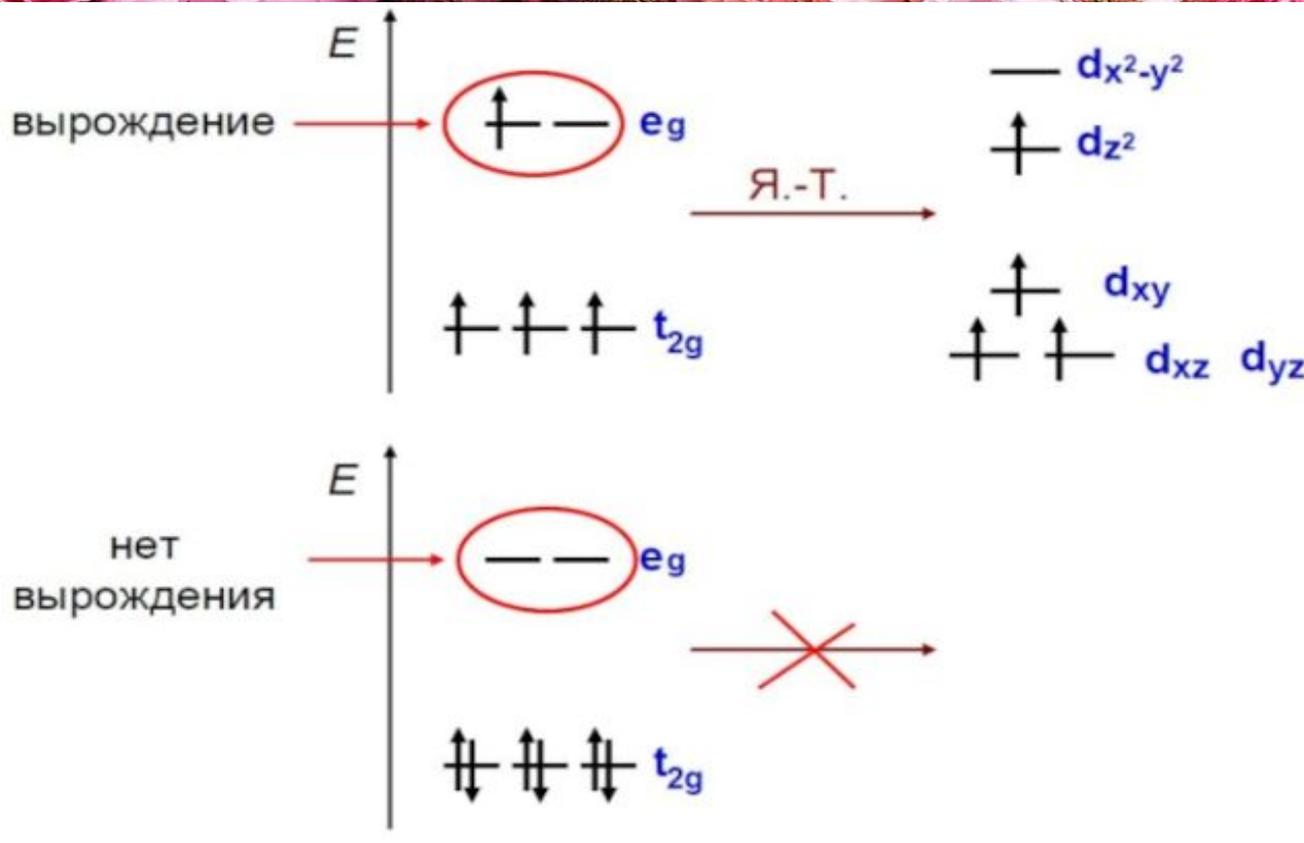
$\Delta = 156 \text{ кДж/моль}$

# Эффект Яна-Теллера

Любая нелинейная молекулярная система в вырожденном электронном состоянии будет искажаться с понижением симметрии, приводящим к снятию вырождения и понижению энергии системы.



# Эффект Яна-Теллера



Спасибо за внимание

