



Univerzitet u Nišu
Prirodno-matematički fakultet
Departman za hemiju
Katedra za neorgansku hemiju



Hemija prelaznih metala sa koordinacionom hemijom

Školska: 2018/2019. godina

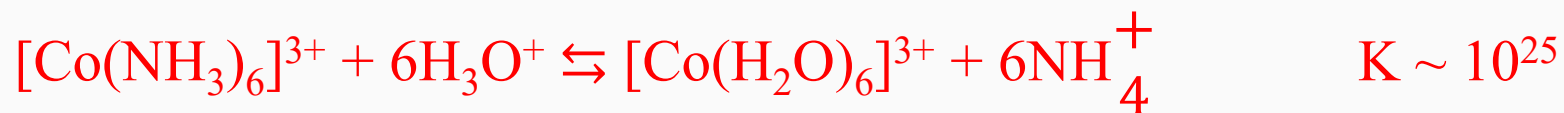
Prof. dr Nenad S. Krstić

K5_P7

Reakcije kompleksa

- Sposobnost kompleksnog jona da učestvuje u reakcijama koje vode do zamene jednog ili više liganada u njegovoj koordinacionoj sferi naziva se ***labilnost***.
- ***labilni kompleksi*** (reakcije teku vrlo brzo)
- ***inertni kompleksi*** (reakcije teku jako sporo, ili se opšte ne odigravaju)

Primer: Ilustracija stabilnosti i inertnosti kompleksa



- Kompleks $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$ jon je stabilan u kiseloj sredini nekoliko dana pošto je kinetički inertan (nije labilan), a iz vrednosti K ravnoteže vidi se da je nestabilan.

- Kompleks $[\text{Ni}(\text{CN})_4]^{2-}$ je vrlo stabilan:



- Sposobnost izotopske izmene liganda $^{12}\text{CN}^-/^{13}\text{CN}^-$ je visoka i ne može se registrovati uobičajenim metodama.

➤Joni metala I prelazne serije, osim Cr(III) i Co(III), grade labilne O_h komplekse koji lako zamenjuju ligande u koordinacionoj sferi kompleksa metala Cr(III) i Co(III) vreme polureakcije izmene liganada na $t = 25\text{ }^\circ\text{C}$ meri se satima i nedeljama.

➤Reakcije zamene liganada razmatraju se u okviru dva granična tipa mehanizama:

1) S_{N1} mehanizam i

2) S_{N2} mehanizam.

S_{N1} mehanizam

- kompleks prvo disosuje i oslobađa ligand koji će biti zamenjen, a potom novi ligand iz rastvora zauzima slobodno mesto u koordinacionoj sferi metala

sporo

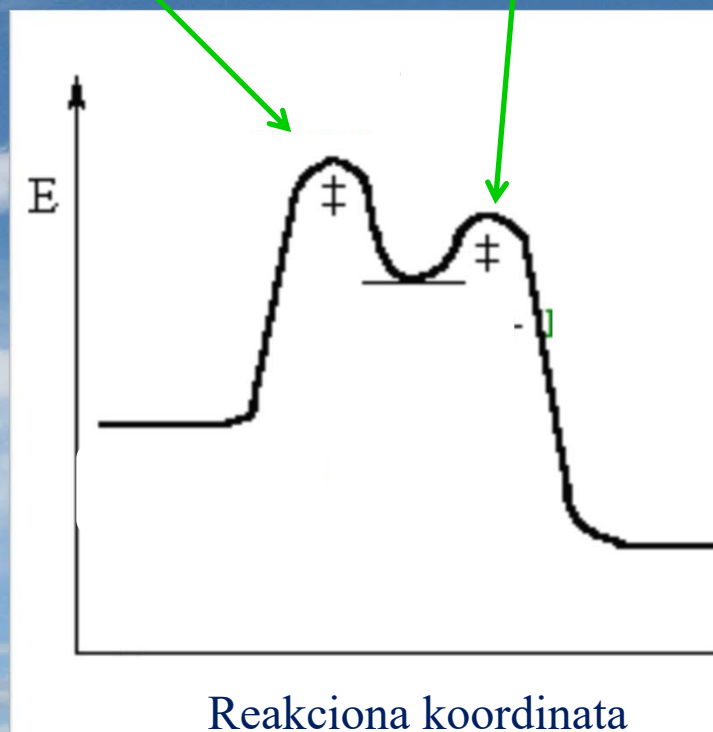
+ Y^- brzo



Brzina reakcije:

$$v = k[L_5MX]^{n+}$$

proporcionalna je koncentraciji početnog kompleksa i ne zavisi od koncentracije liganda Y^- .



Energetski
dijagram S_{N1}
mehanizma

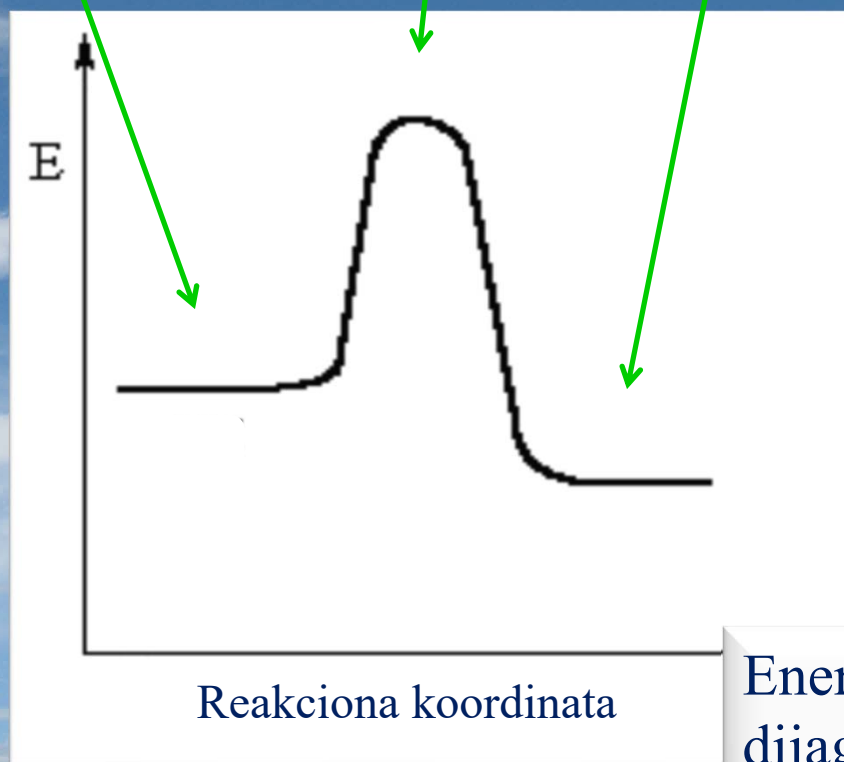
S_{N2} mehanizam

➤ U prvoj fazi reakcije ligand se veže za kompleks pri čemu se gradi prelazno stanje, a zatim u drugoj fazi dolazi do otpuštanja liganda



Brzina izmene liganada zavisi od koncentracije reagujućih čestica:

$$v = k[L_5MX][Y^-]$$



Energetski
dijagram S_{N2}
mehanizma

➤ Aktiviranje O_h kompleksa za izmenu liganada može se izvršiti:

1) uz korišćenje stereochemijskih efekata promenom geometrijske strukture,

2) preko hidrolize,

3) preko red-oks reakcija između dve kompleksne čestice jona metala u različitim oksidacionim stanjima,

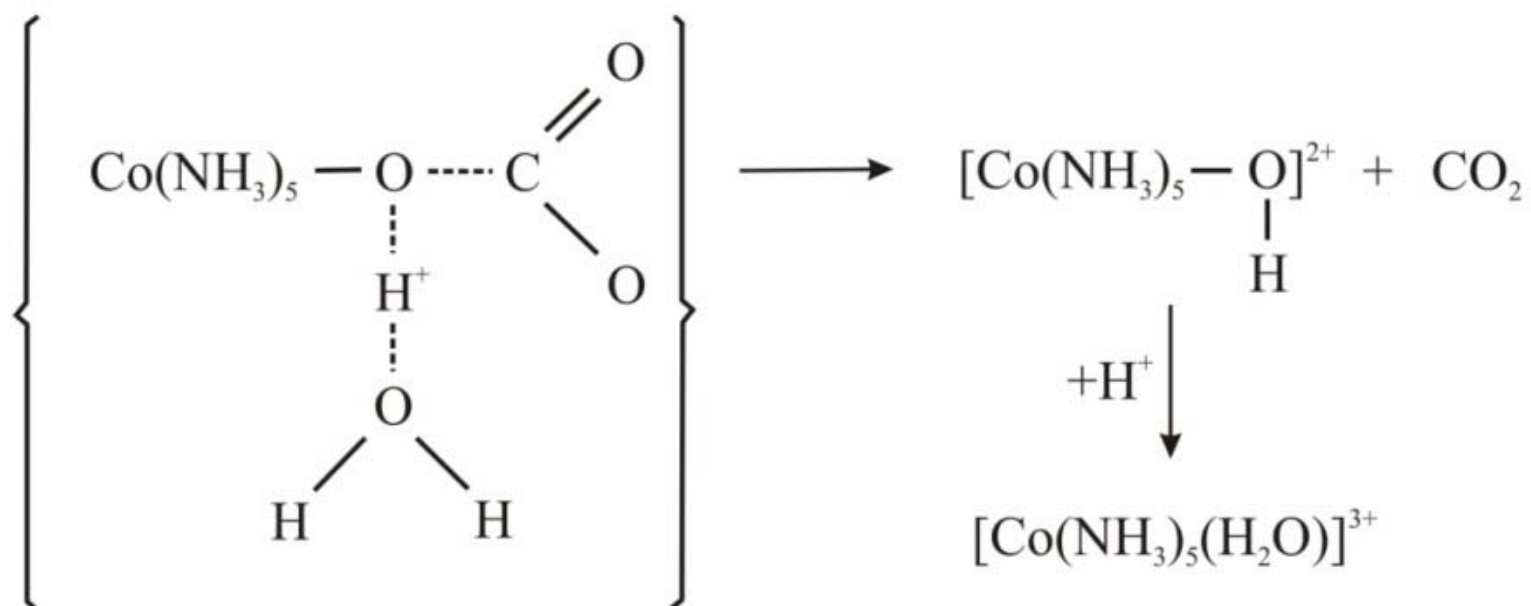
4) preko izomerizacije,

5) fotochemijskim reakcijama.

Reakcije zamene molekula vode i formiranja kompleksa iz hidratisanih jona metala

- Brojne reakcije kompleksiranja odvijaju se u vodenim rastvorima.
- Rastvaranjem uobičajenih soli soli d-metala u vodi katjoni metala se hidratišu, najčešće u obliku čestica $[M(H_2O)_6]^{2+}$ i $[M(H_2O)_6]^{3+}$.
- Reakcije kompleksiranja odvijaju se zamenom molekula H_2O drugim ligandima brzinama koje se mogu razlikovati međusobno i do 10^{10} puta.
- Brzina izmene liganada u formiranoj kompleksnoj čestici zavisi od:
 - prirode jona metala
 - veličine jona
 - strukture liganda
 - elektrofilnih karakteristika liganda

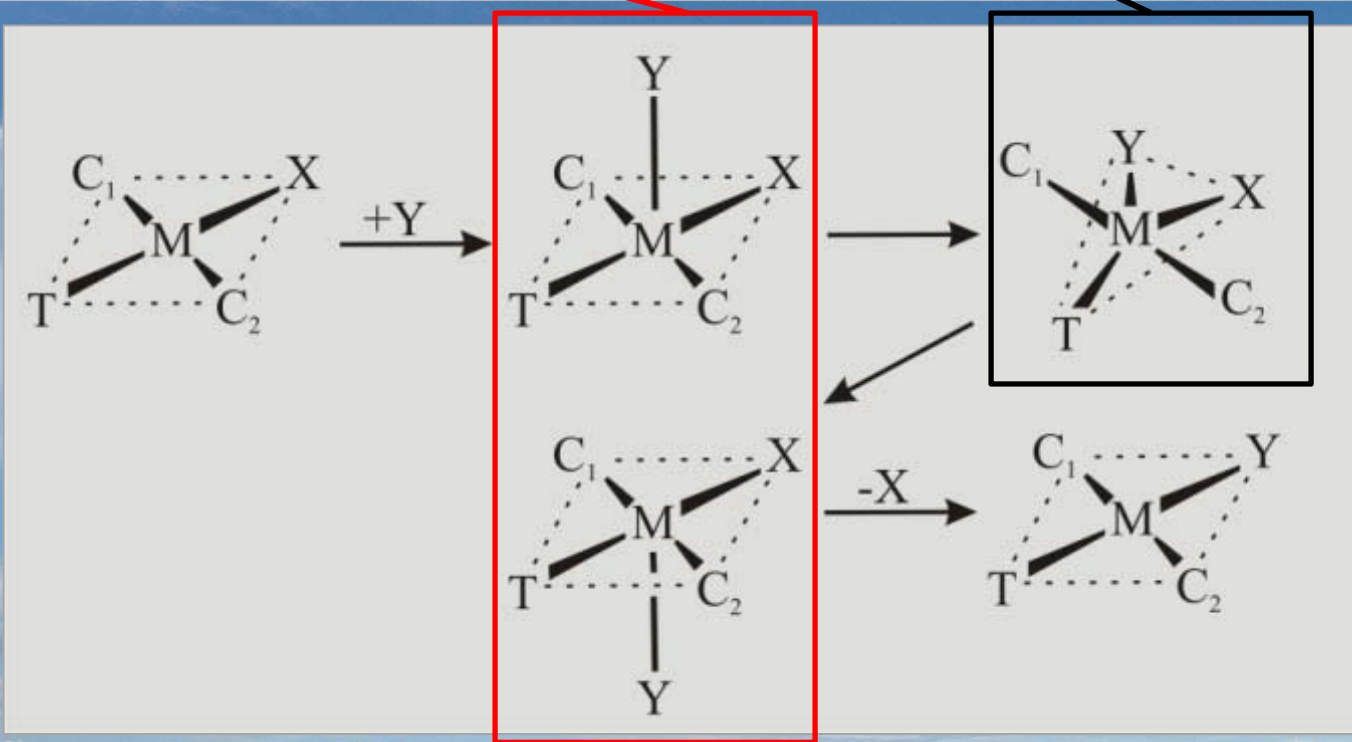
- Izmena liganda u pentaamminkobalt(III)acetato kompleksu u kiseloj sredini vezivanjem vode uz dekarboksilaciju, prikazana je na sledećoj šemi:



Zamena liganada u kompleksima kvadratno-planarne strukture

- Zamena liganada u koordinacionoj sferi metala u kompleksima kvadratno-planarne strukture M(Pt(II), Ni(II), Rd(II), Au(III)), jona d^8 konfiguracije može se odvijati po S_{N2} mehanizmu uz učešće molekula rastvarača, H_2O najčešće, pri čemu se menja koordinacioni broj metala i struktura kompleksa preko intermedijarne

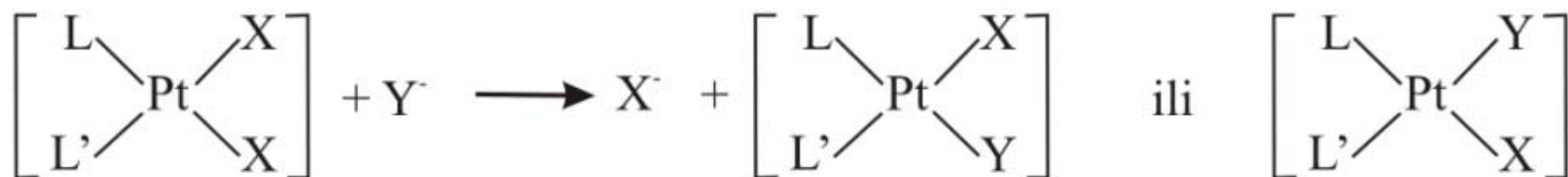
kvadratno-piramidalne i trigonalno-bipiramidalne strukture



- Ovo je stereospecifičan proces. Prema „lakoći“ ulaska u koordinacionu sferu kompleksnih jona Pt(II), ligandi su poređani u nizu:

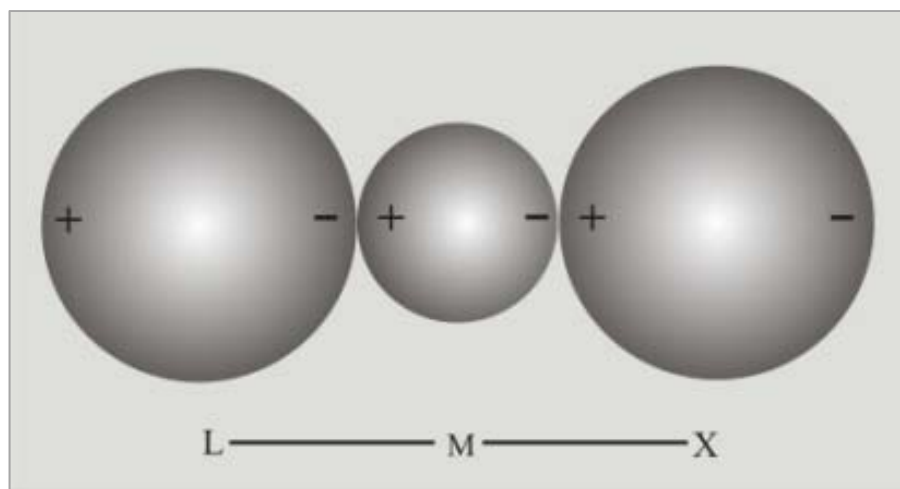


- Pri zameni liganada u kompleksima ovog tipa jasno se manifestuje čisto kinetička pojava poznata pod imenom ***trans-efekat***, a odnosi se na mogućnost nastajanja *cis*- ili *trans*- izomera u odnosu na ligand L koji biva zamenjen:



- Ovaj efekat se ispoljava kao uticaj koordinacije liganda na brzinu zamene liganda u ***trans-položaju***.

- Jon metala indukuje dipole na ligandu, potom ligand (hloridni jon, na primer) može polarizovati elektronski oblak katjona metala pa isti privlači novi ligand X u *trans*- položaju.
- *Trans*- efekat liganda L vezan je za njegovu sposobnost polarizacije koja dovodi do slabljenja veze M–X i zamene liganda X

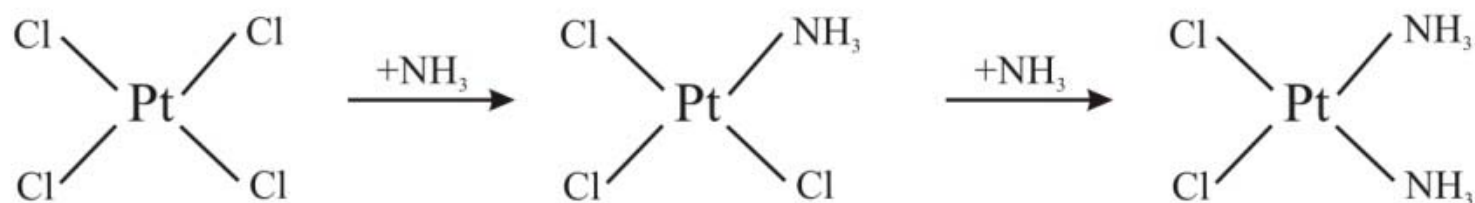


- Prema sposobnosti da ispolje *trans*- efekat ligandi čine niz u kome su na početku oni koji imaju najveću sposobnost polarizacije:

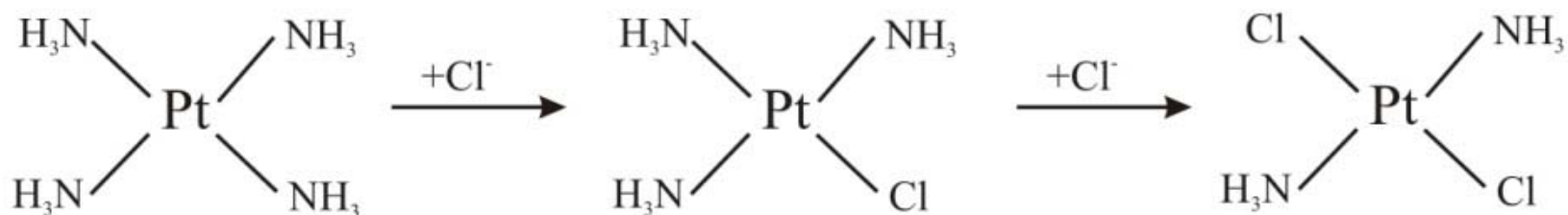


Primer: Nastajanje cis- i trans- izomera diammindihloroplatine(II)

- 1) Sinteza *cis*- izomera ostvaruje se dejstvom amonijaka na $[\text{PtCl}_4]^{2-}$ -jon zato što jon Cl^- ima jači *trans*- efekat u odnosu na NH_3 :



- 2) *trans*- izomer nastaje tretiranjem $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$ hloridima:



Reakcije sa prenosom elektrona

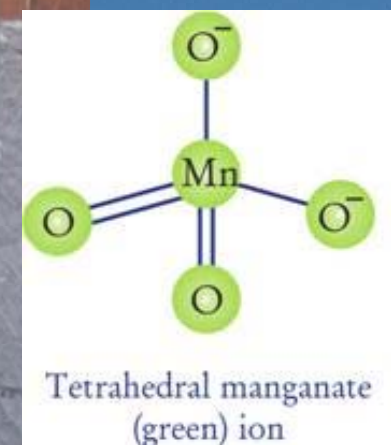
Primer: *Oksidacija cijanidnog kompleksa gvožđa(II) iridijum(IV) heksahloridom*



*izotopsko obeleženo gvožđe(II) iz cijanidnog kompleksa oksiduje se gvožđem(III) iz takođe cijanidnog kompleksa.

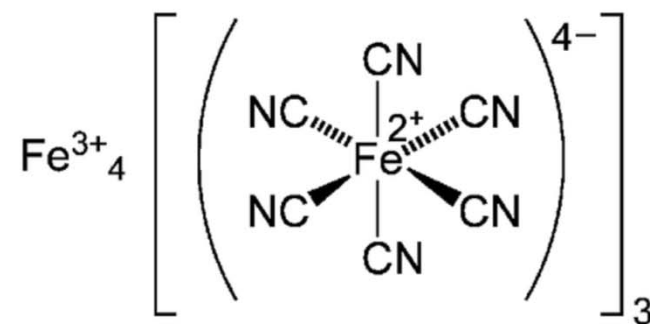
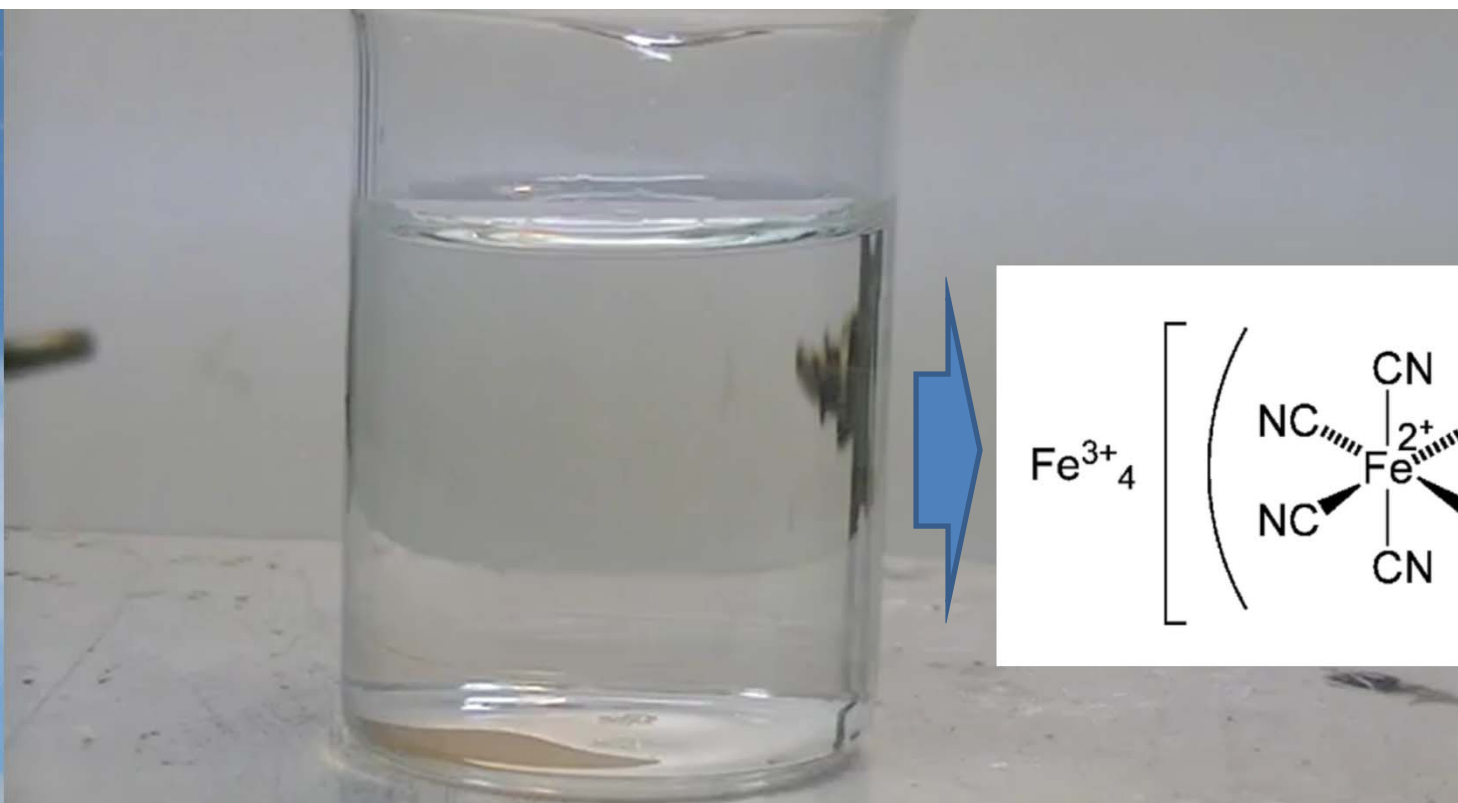
- Ova reakcija se odvija u baznoj sredini u prisustvu redukujućeg agensa. Cijanidni kompleks Fe(III) je jako otrovan jer brzo disosuje i lako izmenjuje ligande, oslobađa CN^- jone u rastvoru (kinetički razlozi) dok cijanidni kompleks Fe(II) reaguje vrlo sporo i stoga nije otrovan.

Primer: Redukcija permanganata (tetraoksomanganat(VII)-jona) do manganata (tetraoksomanganat(VI)-jona)



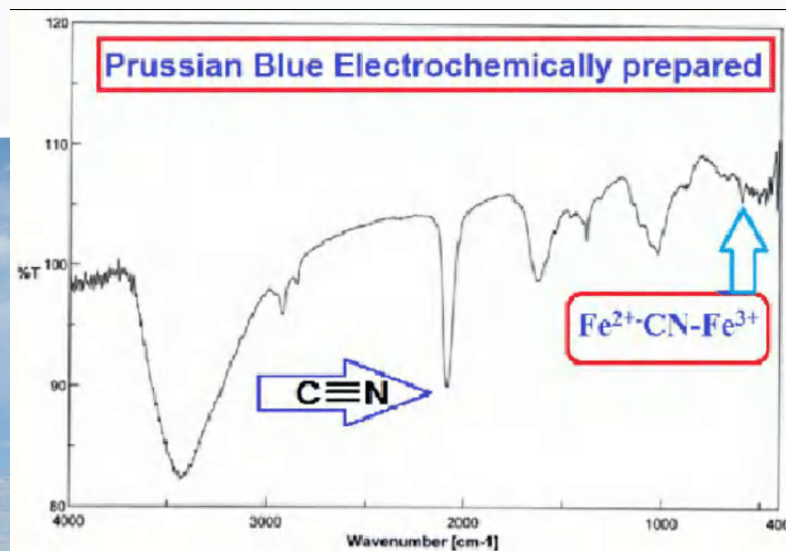
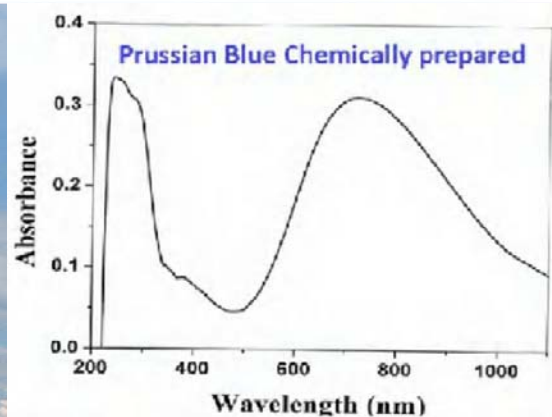
Primer: Berlinsko plavo & turbulensko plavo

- Pažljivim slivanjem rastvora Fe(III) u $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$ gradi plavi talog – *berlinsko plavo*.



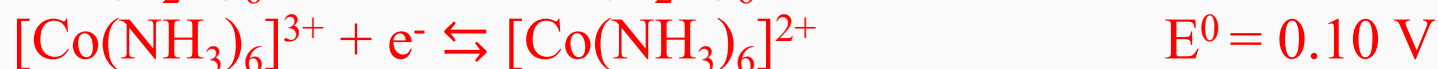
- Dodavanjem rastvora Fe(II) u rastvor $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-}$ formira se, takođe, talog plave boje – *turbulensko plavo*.

- Vrlo je verovatno da su te supstance različite i imaju formulu $M'FeFe(CN)_6$, u kojoj je $M' = Na, K, Rb$. Struktura tih soli je slična strukturi ftalocijanida gvožđa(III) $K_2FeFe(CN)_6$ – bele boje.
- U berlinskom plavom joni $Fe(II)$ su okruženi atomima ugljenika iz cijanidnog liganda, a joni $Fe(III)$ atomima azota. Apsorpcioni spektar i intenzivna boja tog jedinjenja je rezultat prelaza sa prenosom naelektrisanja $L \rightarrow M$.

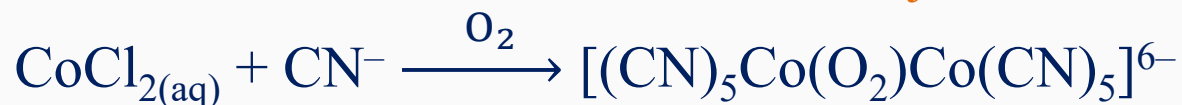
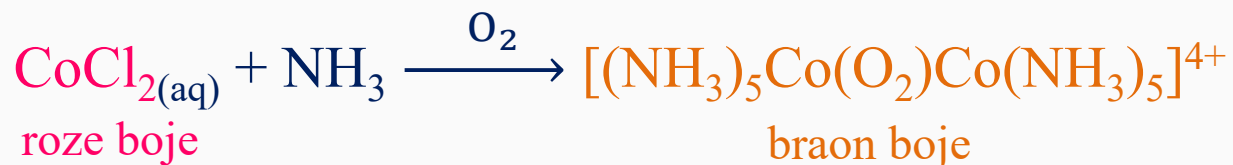


Reakcije sa prenosom elektrona

Primer: Formiranje amonijačnog kompleksa Co(III)



- Oksidaciju može izvršiti i molekularni kiseonik koji se intenzivno proizvodi kroz reagujući sistem (jedinjenje Co(II) + kompleksirajući ligand) pri čemu nastaju intermedijeri, binuklearni kompleksi sa peroksidnim O_2^{2-} ili superoksidnim ligand mostom O_2^-

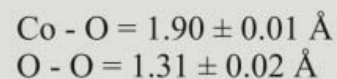
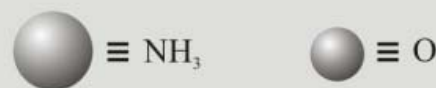
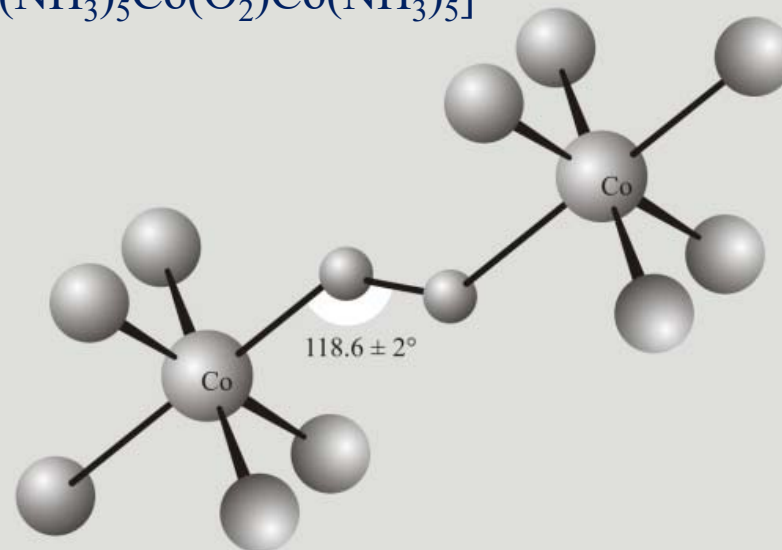


➤ Peroksidni kompleksi Co(III) mogu se oksidovati do kompleksnog jona $[(\text{NH}_3)_5\text{Co}(\text{O}_2)\text{Co}(\text{NH}_3)_5]^{5+}$ zelene boje, sa ekvivalentnim jonima Co (prema podacima rentgeno strukturne analize) i jednim nesparenim elektronom (ESR spektroskopijom utvrđena paramagnetičnost).

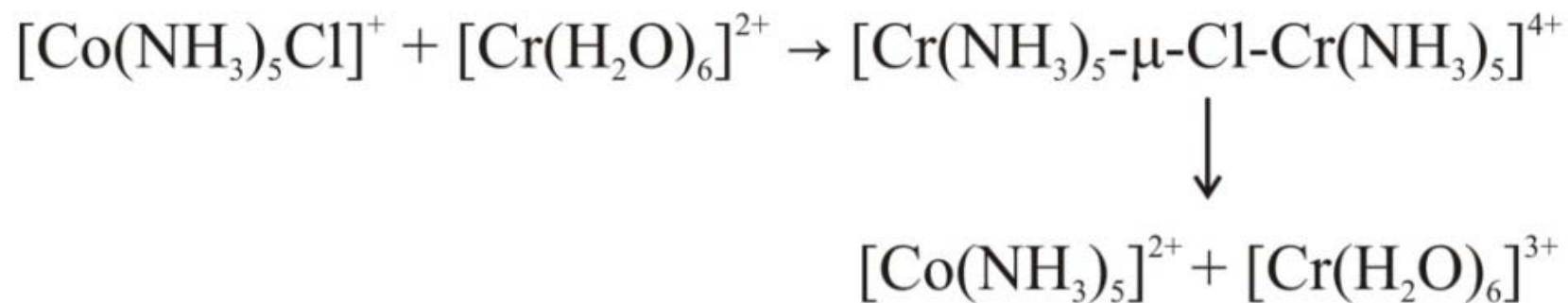
➤ Binuklearni kompleksi Co nastaju i nestaju u procesu homogenog hidriranja konjugovanih diena sa kompleksnim solima kobalta kao katalizatora, npr., $\text{K}_6[\text{Co}_2(\text{CN})_{10}]$ zelene boje koji sadrži fragmente $[\text{Co}(\text{CN})_5]^{2-}$ i $[\text{Co}(\text{CN})_4]^{2-}$.

➤ Ovi rastvori apsorbuju molekulski vodonik pri čemu nastaje $[\text{HCo}(\text{CN})_5]^{3-}$ žute boje.

➤ Katalitičko dejstvo ovih kompleksa Co ispoljava se i pri redukciji aldehida i nitrobenzena.



Primer: *Aktiviranje O_h kompleksa za izmenu liganda preko red-oks reakcije i binuklearnog kompleksa*



Energetska stanja jona metala

- Jedno stacionarno stanje u atomu (*term*) koje je posledica različitih interakcija u atomu, karakteriše se:
- *kvantnim brojem L* i
 - *multipletnošću $2S+1$* .
- Prema vrednostima kvantnog broja ukupnog orbitalnog momenta impulsa L određuju se oznake termova:

Vrednost L	0	1	2	3	4	5	6
Simbol stanja (term)	S	P	D	F	G	H	I

- Opšta oznaka nekog terma je:

$$2S+1L_J$$

gde je:

- $2S+1$ – multipletnost,
 - L – kvantni broj orbitalnog momenta,
 - J – kvantni broj unutrašnjeg (ukupnog) uglovnog momenta.
- Postoji više načina za određivanje energetske stanja elektrona u atomu i identifikaciju osnovnog stanja, terma.
- Isti se može odrediti i za dati broj valentnih elektrona.
- Najjednostavniji načini za određivanje su:
- prema J. Gormanu,
 - preko L maksimalnog (L_{\max})

Primer: Određivanje terma osnovnog stanja atoma prema J. Gormanu

➤ Određivanje terma osnovnog stanja atoma prema Gormanu može se pokazati na primeru jona Cr^{3+} :

1) Najpre se napiše elektronska konfiguracija datog elementa, a potom jona



2) U horizontalnom redu napiše se niz vrednosti magnetnih kvantnih brojeva (m_l) za odgovarajuće delimično nepopunjene energetske nivoe s , p , d i f , i to tako da se počinje sa najvećom vrednošću, pa nadalje niže vrednosti, a to je za stanje:

$$s \quad m_l = 0;$$

$$p \quad m_l = 1, 0, -1;$$

$$d \quad m_l = 2, 1, 0, -1, -2;$$

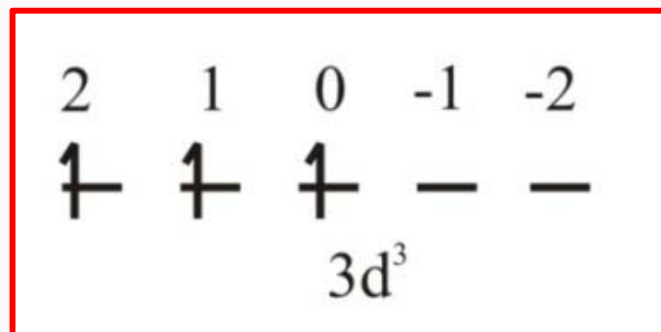
$$f \quad m_l = 3, 2, 1, 0, -1, -2, -3$$

2	1	0	-1	-2
↑	↑	↑	—	—
$3d^3$				

Ispod vrednosti m_l pišu se s` leva na desno elektroni prema I Hundovom pravilu (maksimalan broj nesparenih elektrona).

3) Saberu se vrednosti m_l nesparenih elektrona algebarski, a uzima se pozitivna vrednost za L.

$$|L| = \sum m_l$$



Vrednost L	0	1	2	3	4	5	6
Simbol stanja (term)	S	P	D	F	G	H	I

$$|L| = \sum m_l$$

$$|L| = 2+1+0 = 3$$

Prema tome oznaka terma za ovaj jon je: **F**.

4) Spinska multipletnost terma $(2S+1)$ određena je brojem za jedan većim od broja nesparenih elektrona.

$$2S+1 = 3+1 = 4, \text{ ili}$$

$$S = 3 \cdot \frac{1}{2} \Rightarrow 2 \cdot \frac{3}{2} + 1 = 4$$

Prema tome ovde je reč o termu *kvadrilet* $F \Rightarrow$ **$4F$**

5) Unutrašnji kvantni broj J određuje se na sledeći način:

$$J = \vec{L} + \vec{S}, J = \vec{L} - \vec{S} \text{ i } J = \vec{L}$$

$$J = \vec{L} + \vec{S}, J = \vec{L} - \vec{S} \text{ i } J = \vec{L}$$

$$J = 3 + 3/2, J = 3 - 3/2, J = 3/2$$

$$J = \frac{6}{2} + \frac{3}{2}, J = \frac{6}{2} - \frac{3}{2}, J = \frac{3}{2}$$

$$J = \frac{9}{2}, J = 3, J = \frac{3}{2}$$

Prema tome za jon Cr^{3+} određena su tri terma: ${}^4F_{9/2}$, 4F_3 , ${}^4F_{3/2}$.

6) Osnovni term (term najniže energije) određuje se na osnovu Hund-ovih pravila.

Hund-ova pravila

I Hundovo pravilo.

- Najniže po energiji je stanje sa najvećom multipletnošću

II Hundovo pravilo.

- Ako su dva stanja iste multipletnosti, niže po energiji je stanje kod koga je L veće (osnovno stanje je enegetski najpovoljnije).

III Hundovo pravilo.

- Kod više stanja istog L, najniže je stanje kod koga su \vec{L} i \vec{S} antiparalelni (najmanje J) za stanja koja u podnivou imaju manje od polovine mogućeg broja elektrona.
- Kod stanja gde je u podnivou smešteno više od polovine mogućeg broja elektrona najniži je term za koji je J najveće vrednosti (\vec{L} i \vec{S} paralelni).
- Ako u podnivou imamo tačno polovinu od mogućeg broja elektrona posmatra se kao za slučaj stanja sa manje od polovine mogućeg broja elektrona.

Prema tome, osnovni term za Cr^{3+} jon je ${}^4\text{F}_{3/2}$.

Primer: Određivanje terma osnovnog stanja atoma preko $L_{\text{maksimalnog}}$

- Ovaj postupak određivanja svih termova biće ilustrovan na jonu V^{3+} elektronske konfiguracije $V^{3+}: [] 3d^2$.

Prvi korak. Odredi se stanje za koje je $L = L_{\text{max}}$

$$\begin{array}{cccccc} 2 & 1 & 0 & -1 & -2 \\ \updownarrow & - & - & - & - \end{array}$$

$3d^2$

$$L_{\text{max}} = 4$$

$$S = 0$$

$$2S + 1 = 1$$

$$L = 4, S = 0, J = 4$$

term: 1G_4

Drugi korak. Odredi se stanje za koje je $L = L_{\max} - 1$

$$L_{\max} - 1 = 3$$

$$2 \quad 1 \quad 0 \quad -1 \quad -2$$

$$\uparrow \quad \uparrow \quad - \quad - \quad -$$

$$L = 3 \quad 3d^2$$

$$S = 2 \cdot 1/2 = 1$$

$$2S + 1 = 3$$

$$L = 3, S = 1, J = 4, 3, 2$$

termovi: ${}^3F_4, {}^3F_3, {}^3F_2$

Treći korak. Odredi se stanje za koje je $L = L_{\max} - 2$

$$L_{\max} - 2 = 2$$

$$\begin{array}{cccccc}
 2 & 1 & 0 & -1 & -2 & \\
 \uparrow & - & \uparrow & - & - & \text{ili} & - & \updownarrow & - & - & -
 \end{array}$$

$$L = 2 \quad 3d^2$$

$$S = 2 \cdot 1/2 = 1$$

$$2S+1 = 3$$

$$L = 2, S = 1, J = 3, 2, 1$$

termovi: ${}^3D_3, {}^3D_2, {}^3D_1$

$$L = 2 \quad 3d^2$$

$$S = 1/2 + (-1/2) = 0$$

$$2S+1 = 1$$

$$L = 2, S = 0, J = 2$$

term: 1D_1

Četvrti korak. Odredi se stanje za koje je $L = L_{\max} - 3$

$$L_{\max} - 3 = 1$$

$$\begin{array}{cccccc}
 2 & 1 & 0 & -1 & -2 & \\
 - & \uparrow & \uparrow & - & - & \\
 & & 3d^2 & & &
 \end{array}
 \quad \text{ili} \quad
 \begin{array}{cccccc}
 2 & 1 & 0 & -1 & -2 & \\
 \uparrow & - & - & \uparrow & - & \\
 & & & 3d^2 & &
 \end{array}$$

$$L = 1$$

$$S = 2 \cdot 1/2 = 1$$

$$2S + 1 = 3$$

$$L = 1, S = 1, J = 2, 1, 0$$

termovi: ${}^3P_2, {}^3P_1, {}^3P_0$

Peti korak. Odredi se stanje za koje je $L = L_{\max} - 4$

$$L_{\max} - 4 = 0$$

$$2 \quad 1 \quad 0 \quad -1 \quad -2$$

$$- \quad - \quad \updownarrow \quad - \quad - \quad \text{ili}$$

$$3d^2$$

$$L = 0$$

$$S = \frac{1}{2} + (-\frac{1}{2}) = 0$$

$$2S+1 = 1$$

$$L = 0, S = 0, J = 0$$

term: 1S_0

$$2 \quad 1 \quad 0 \quad -1 \quad -2$$

$$- \quad \updownarrow \quad - \quad \updownarrow \quad -$$

$$3d^2$$

$$L = 0$$

$$S = 2 \cdot \frac{1}{2} = 1$$

$$2S+1 = 3$$

$$L = 0, S = 1, J = 1, 0$$

termovi: $^3S_1, ^3S_0$

Hund-ova pravila

I Hundovo pravilo.

- Najniže po energiji je stanje sa najvećom multipletnošću

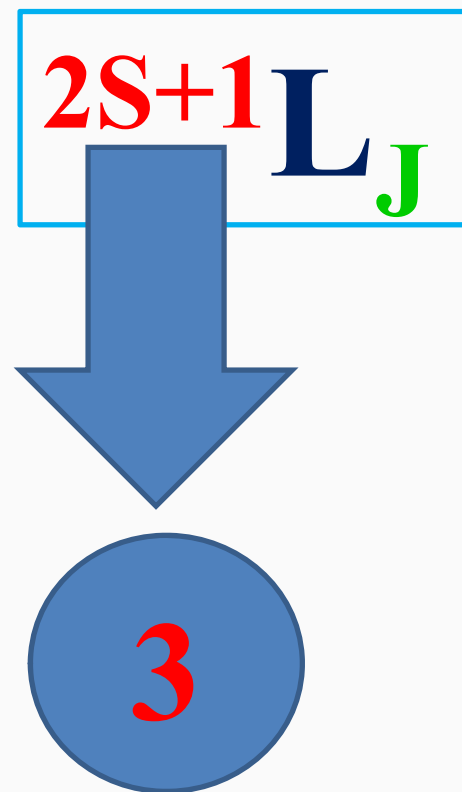
~~$1S_0$~~ , $3S_1$, $3S_0$

$3P_2$, $3P_1$, $3P_0$

~~$1D_1$~~ , $3D_3$, $3D_2$, $3D_1$

$3F_4$, $3F_3$, $3F_2$

~~$1G_4$~~



II Hundovo pravilo.

- Ako su dva stanja iste multipletnosti, niže po energiji je stanje kod koga je L veće (osnovno stanje je enegetski najpovoljnije).

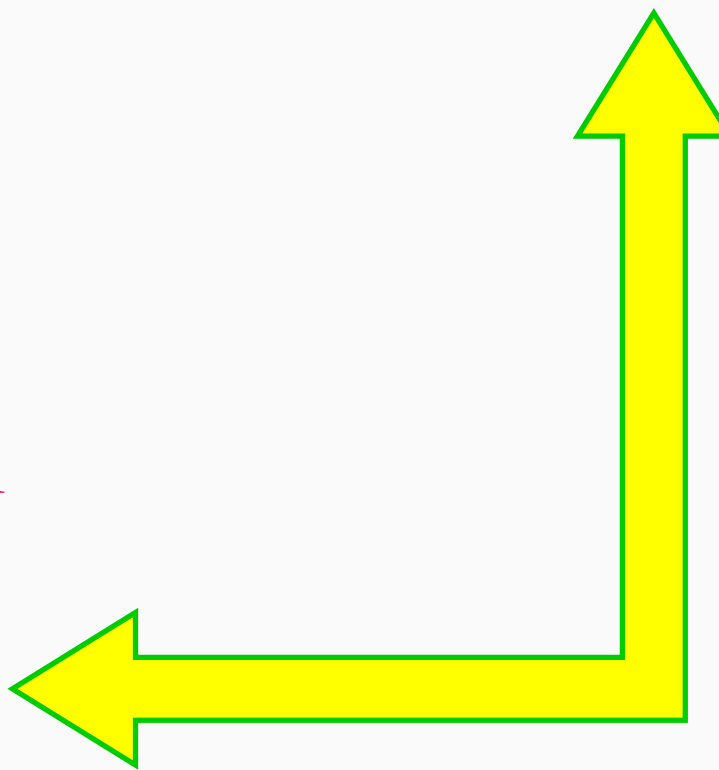
Vrednost L	0	1	2	3	4	5	6
Simbol stanja (term)	S	P	D	F	G	H	I

${}^3S_1, {}^3S_0$

${}^3P_2, {}^3P_1, {}^3P_0$

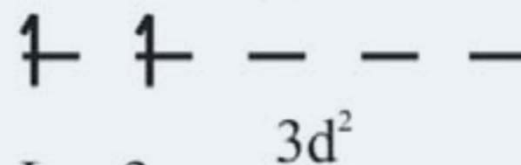
${}^3D_3, {}^3D_2, {}^3D_1$

${}^3F_4, {}^3F_3, {}^3F_2$



III Hundovo pravilo.

- Kod više stanja istog L, najniže je stanje kod koga su \vec{L} i \vec{S} antiparalelni (*najmanje J*) za stanja koja u podnivou imaju manje od polovine mogućeg broja elektrona.
- Kod stanja gde je u podnivou smešteno *više od polovine mogućeg broja elektrona najniži je term za koji je J najveće vrednosti* (\vec{L} i \vec{S} paralelni).
- Ako u podnivou imamo *tačno polovinu od mogućeg broja elektrona posmatra se kao za slučaj stanja sa manje od polovine mogućeg broja elektrona.*



manje od ½ mogućeg broja e⁻
(2e⁻ < 5e⁻)
J najmanje

Konfiguracija	Osnovni term
d^1, d^9	2D
d^2, d^8	3F
d^3, d^7	4F
d^4, d^6	5D
d^5	6S

Atom	Z	Electron Configuration	Term Symbol
H	1	1s	$^2S_{1/2}$
He	2	1s ²	1S_0
Li	3	[He]2s	$^2S_{1/2}$
Be	4	[He]2s ²	1S_0
B	5	[He]2s ² 2p	$^2P_{1/2}$
C	6	[He]2s ² 2p ²	3P_0
N	7	[He]2s ² 2p ³	$^4S_{3/2}$
O	8	[He]2s ² 2p ⁴	3P_2
F	9	[He]2s ² 2p ⁵	$^2P_{3/2}$
Ne	10	[He]2s ² 2p ⁶	1S_0
Na	11	[Ne]3s	$^2S_{1/2}$
Cl	17	[Ne]3s ² 3p ⁵	$^2P_{3/2}$
Ar	18	[Ne]3s ² 3p ⁶	1S_0
K	19	[Ar]4s	$^2S_{1/2}$
Ca	20	[Ar]4s ²	1S_0
Sc	21	[Ar]4s ² 3d	$^2D_{3/2}$
Ti	22	[Ar]4s ² 3d ²	3F_2
V	23	[Ar]4s ² 3d ³	$^4F_{3/2}$
Cr	24	[Ar]4s3d ⁵	7S_3
Mn	25	[Ar]4s ² 3d ⁵	$^6S_{5/2}$
Fe	26	[Ar]4s ² 3d ⁶	5D_4
Co	27	[Ar]4s ² 3d ⁷	$^4F_{9/2}$
Ni	28	[Ar]4s ² 3d ⁸	3F_4
Cu	29	[Ar]4s3d ¹⁰	$^2S_{1/2}$
Zn	30	[Ar]4s ² 3d ¹⁰	1S_0
Ga	31	[Ar]4s ² 3d ¹⁰ 4p	$^2P_{1/2}$
Br	35	[Ar]4s ² 3d ¹⁰ 4p ⁵	$^2P_{3/2}$
Kr	36	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶	1S_0

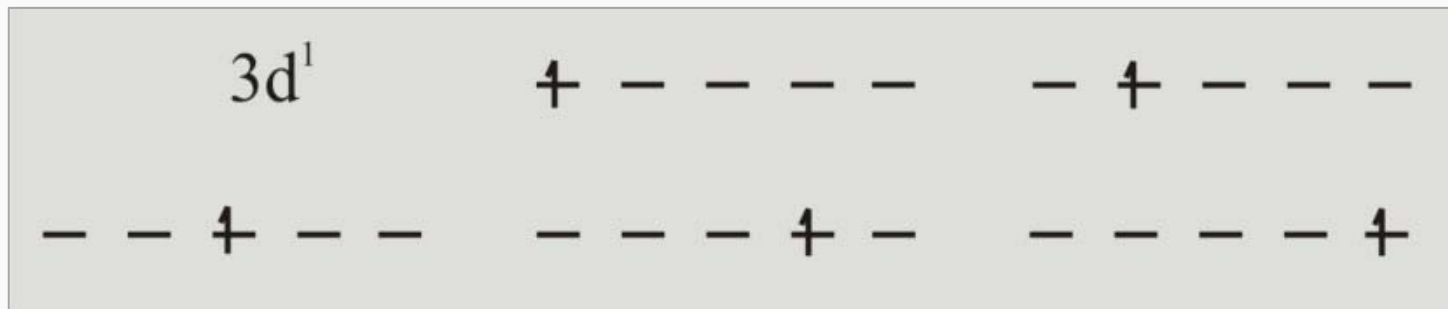
- Kada se centralni jon metala nađe u ligandnom polju i biva izložen uticaju liganada, kao posledica toga dolazi do ukidanja degeneracije između energetske nivoa i cepanja energetske nivoa.
- Svakom razmeštanju elektrona na odgovarajućim nivoima/podnivoima odgovaraju različiti spektralni termovi.
- Razlika energije cepanja termova u oktaedarskom (O_h) i tetraedarskom (T_d) ligandnom polju dato je u tabeli

Term slobodnog jona	O_h ligandno polje	T_d ligandno polje
S	A_{1g}	A_1
P	T_{1u}	T_1
D	$E_g + T_{2g}$	$E + T_2$
F	$A_{2g} + T_{1u} + T_{2g}$	$A_2 + T_1 + T_2$
G	$A_{1g} + E_g + T_{1u} + T_{2g}$	$A_1 + E + T_1 + T_2$
H	$E_g + 2T_{1u} + T_{2g}$	$E + 2T_1 + T_2$

- Nakon ukidanja degeneracije između nivoa osnovnog stanja zadržava se multipletnost, tako da su sva novonastala stanja iz osnovnog terma nepromenjene multipletnosti.

Mikrostanja

- Svaki pojedinačno mogući raspored valentnih elektrona na odgovarajućim podnivoima je **jedno mikrostanje**.
- Ako se posmatra jedan elektron koji ima $m_s = \frac{1}{2}$ u 3d podnivou, on se može rasporediti u pet d energetskih podnivoa na pet različitih načina. Svaki od tih načina raspoređivanja je **mikrostanje**.
- U odsustvu spoljašnjeg električnog ili magnetnog polja pet mikrostanja su degenerisana.
- Međutim, postoji još pet pobuđenih stanja kojima odgovara vrednost $m_s = -\frac{1}{2}$. Ovih deset mikrostanja formira desetostruku degenerisanost terma 2D .



- Broj mikrostanja (BMS) za datu elektronsku konfiguraciju određuje se prema formuli:

$$\text{BMS} = \frac{N_p!}{N_e! \cdot N_s!}$$

gde je:

N_p – broj mesta za raspoređivanje elektrona na podnivoima jednog nivoa,

N_e – broj elektrona u podnivoima,

N_s – broj slobodnih mesta u podnivoima istog nivoa.

- Broj mikrostanja za određeni term, odnosno na koliko se načina vektor orbitalnog i spinskog magnetnog momenta mogu orijentisati jedan prema drugom određuje se kao proizvod:

$$(2L + 1) \cdot (2S + 1)$$

gde je:

L – ukupan orbitalni kvantni broj,

S – ukupan spinski kvantni broj.

Primer 1: Određivanje BMS za elektronsku konfiguraciju

Odrediti BMS za elektronske konfiguracije: a) d^1 i b) d^5 .

a) Broj mikrostanja za elektronsku konfiguraciju d^1

$$\text{BMS} = \frac{N_p!}{N_e! \cdot N_s!}$$

$$\text{BMS} = \frac{10!}{1! \cdot 9!} = \frac{10 \cdot 9 \cdot 8 \cdot 7 \cdot 6 \cdot 5 \cdot 4 \cdot 3 \cdot 2 \cdot 1}{1 \cdot 9 \cdot 8 \cdot 7 \cdot 6 \cdot 5 \cdot 4 \cdot 3 \cdot 2 \cdot 1} = 10$$

b) Broj mikrostanja za elektronsku konfiguraciju d^5

$$\text{BMS} = \frac{N_p!}{N_e! \cdot N_s!}$$

$$\text{BMS} = \frac{10!}{5! \cdot 5!} = \frac{10 \cdot 9 \cdot 8 \cdot 7 \cdot 6 \cdot 5 \cdot 4 \cdot 3 \cdot 2 \cdot 1}{5 \cdot 4 \cdot 3 \cdot 2 \cdot 1 \cdot 5 \cdot 4 \cdot 3 \cdot 2 \cdot 1} = 252$$

Primer 1: Određivanje BMS za term

Odrediti BMS za term 2D .

Term: 2D

$$BMS = (2L + 1) \cdot (2S + 1)$$

$$L = 2, S = \frac{1}{2}$$

$$BMS = (2 \cdot 2 + 1) \cdot (2 \cdot \frac{1}{2} + 1) = 5 \cdot 2 = 10.$$

Na toliko načina (deset) se vektori orbitalnog i spinskog magnetnog momenta elektrona mogu orjentisati jedan prema drugom.

Konfiguracija	BMS
d^1, d^9	10
d^2, d^8	45
d^3, d^7	120
d^4, d^6	210
d^5	252

- Svaki od termova koji nije osnovni predstavlja jedno pobuđeno stanje i on se razlikuje po energiji od bilo kog drugog terma.
- Kao rezultat *elektron-elektron uzajamnih dejstava* termovi osnovnog i pobuđenih stanja se razlikuju po energiji, što je ilustrovano na primeru jona d^2 elektronske konfiguracije (Slika a).
- Pored elektron-elektron uzajamnog dejstva, postoji *spin-orbitalno uzajamno dejstvo* koje dovodi do cepanja energetske nivoa, (Slika b).

