

Tinc curiositat per saber si els meus instints químics són correctes o no. Us envio aquest extracte i el valoreu:

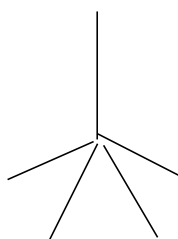
Altres nocions d'inorgànica:

Si volem aclarir la hibridació de metalls en les diferents simetries de grup:

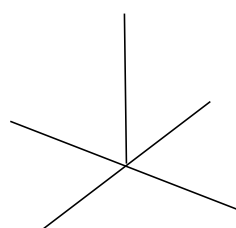
Grup	Hibridació
T_d	sp^3
D_{4h}	$dsp^2 (?)$
O_h	$d^2 sp^3$
D_{2d}	$d^4 sp^3$ o $d^5 sp^2 (?)$
D_{3h}	$d^3 sp^2 (?)$
C_{4v}	$sp^3 d$
D_{5h}	$sp^3 d^3$

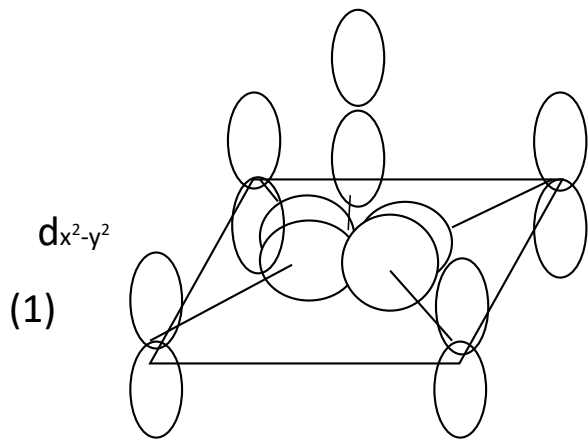
Un exemple d'orbitals més populars en contacte entre el metall i el lligand pot ser:

C_{4v}

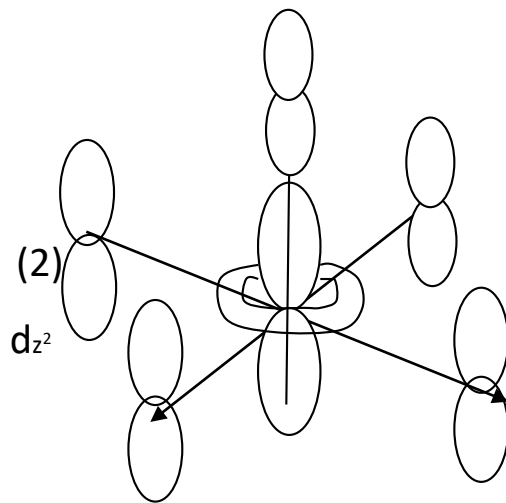
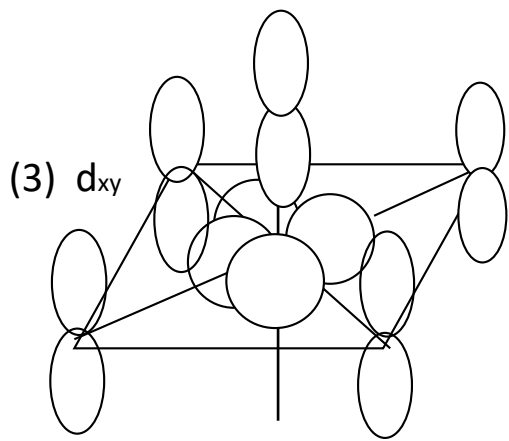


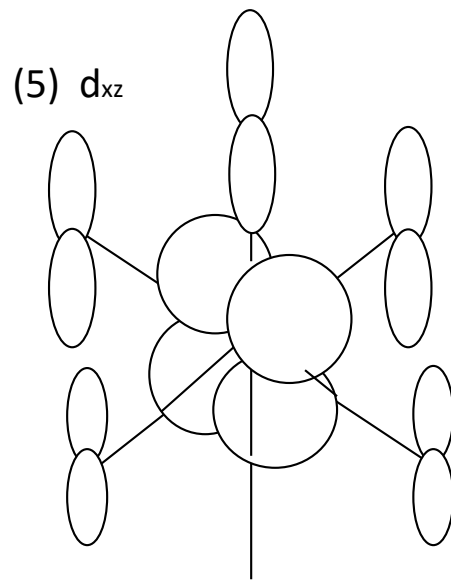
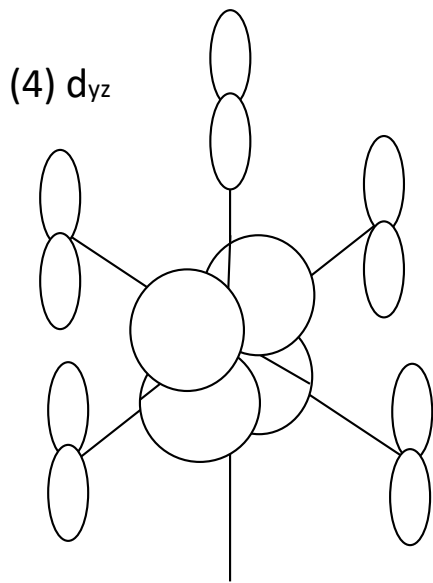
o





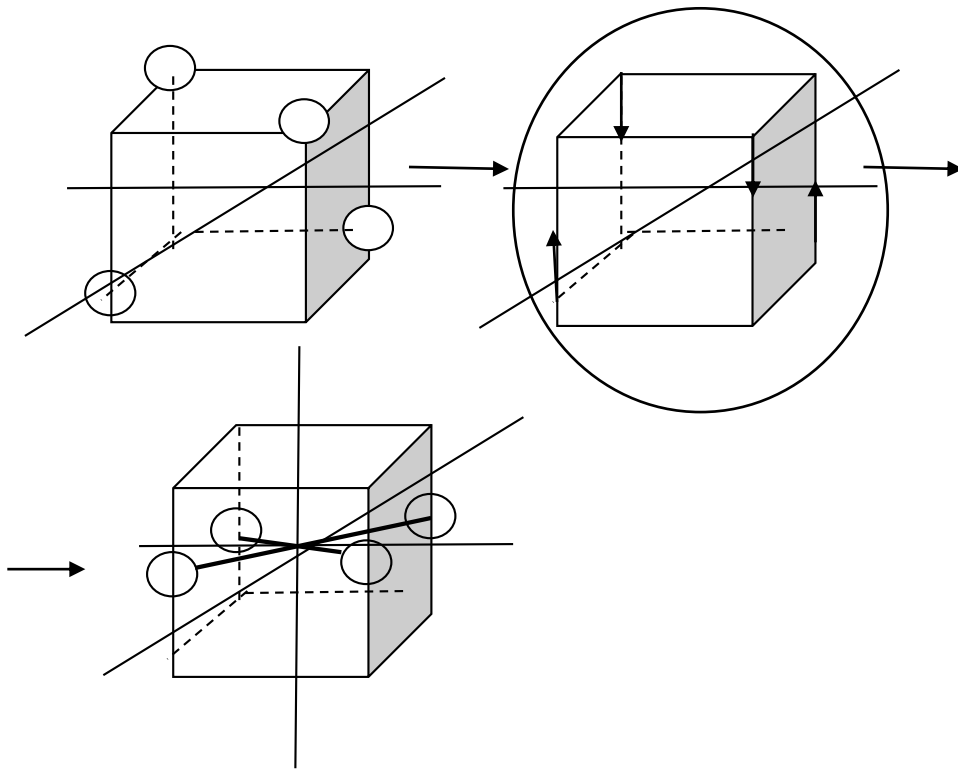
amb 5 lligands usant p_z



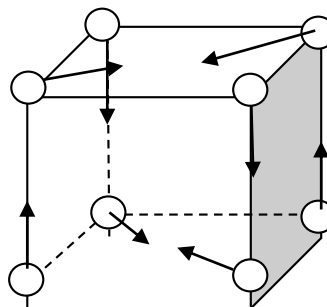


I per estabilitats: (1) (4) (5) > (2) > (3) segons el grau de solapament.

Saber que D_{2d} es pot entendre com a grup entre T_d i D_{4h} :

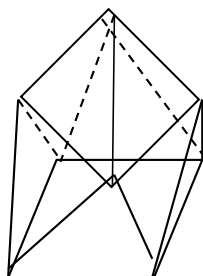


El grup D_{2d} també pot descriure aquest estat intermig:

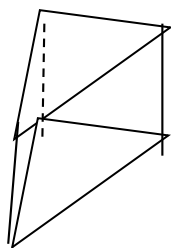


depenen del grau de solapament entre els orbitals $2s$, $3p$ i $5d$ (que sabem quina imatge mostra) i el valor energètic dels seus nivells capaços de construir hibridació ; De vegades, la diferència entre energies és massa alta com per ser considerada.

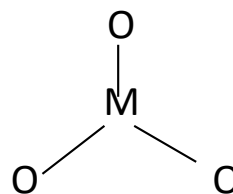
D_{4d} també existeix:



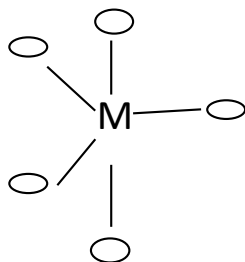
El D_{3h} :



igual que:

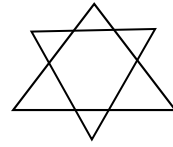


i que:

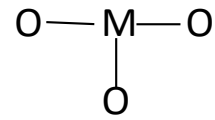


i que el "prisma tricornonat".

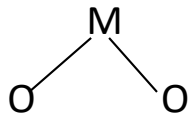
Té 6 vèrtexs, cosa que
 el converteix en un octaedre
 si bé pertany a C_{3v} .



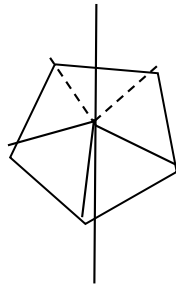
A més: C_{2v} : descriu el
 “prisma monocoronat”:



i:



D_{5h} :

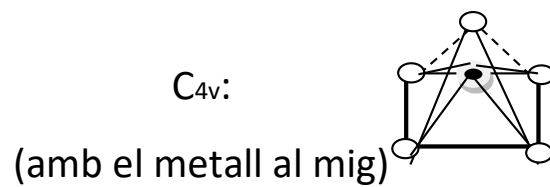


C_{2h} :



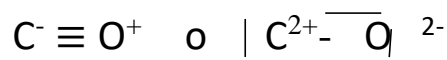
$D_{\infty h}$:

C_{4v} :

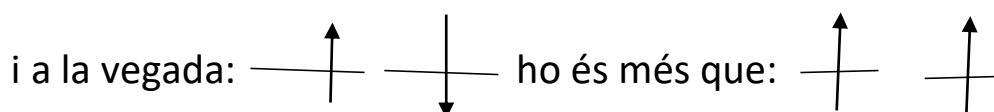
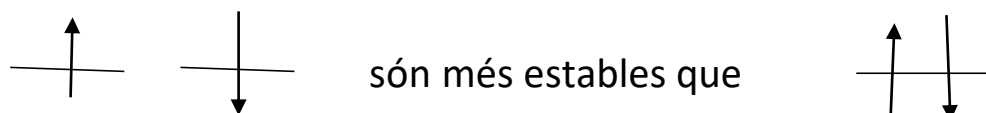


I per acabar diré que es pot passar de D_{3h} a C_{4v} !!.

Vull explicar en termes de Lewis la molècula CO:



Veiem que en nivells d'energia ocupats,



Recordem en un article anterior el significat de **singlet**, **doblet** i **triplet** .

Sabem que el **moment d'spin** $M_s = \sum m_s$ de cada "individu".

El número de M_s 's, òbviament, $2S + 1$, o sigui: que va de $-S, -S + 1, -S + 2, \dots, 0, \dots, S-1, S$.

També estem dotats d' impulsos **angulars** : M_l , que va de $+L$ a $-L$ (igualtat que passa al mesurar M_s); el seu nº són $2L + 1$.

I ara farem un **acoblament spin-òrbita** i veurem com es produeix un altre desdoblament: (heu de comprendre que els òrbites L , en absència de \vec{H} extern, are degenerades, però no ho són quan s'hi aplica el camp magnètic; apareixen M_j 's i cada $j = l + s$. El seu número va de $[-j, -j + 1, \dots, 0, \dots, j-1, j]$, suma $2j + 1$ valors.


Ara farem un exemple amb valors de L: si $L = 0 \rightarrow \xi$

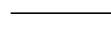
$L = 1 \rightarrow P$

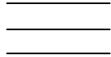
1 fa Referència al nº de M_s 's.

$L = 2 \rightarrow D$

$L = 3 \rightarrow F$

Quan ens trobem amb 1D : ----- 

$^1\xi$: ----- 

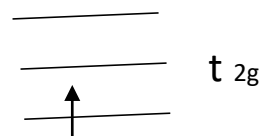
3P : ----- 

Recordem **Regles de Hund** .

He concebut les diferents opcions d'una combinació

$(t_{2g})^2 (e_g)^0$ "d²" nº's quàntics o $(t_{2g})^1 (t_{2g})^1$

$(t_{2g})^1 (e_g)^1$ "d²" nº's quàntics també, però amb un electró a cada nivell:



$$(t_{2g})^0 (e_g)^2$$

$$o (e_g)^1 (e_g)^1$$

si ens trobem amb $(t_{2g})^1 (e_g)^1$ O_h $(a_g, a_g', b_g)^1 (b_g, a_g)^1$ C_{2h}

Sabent que el nom exacte dels nivells és a_{1g} , a_{1g}' i b_{1g} (resultants del traspàs del grup de simetria):

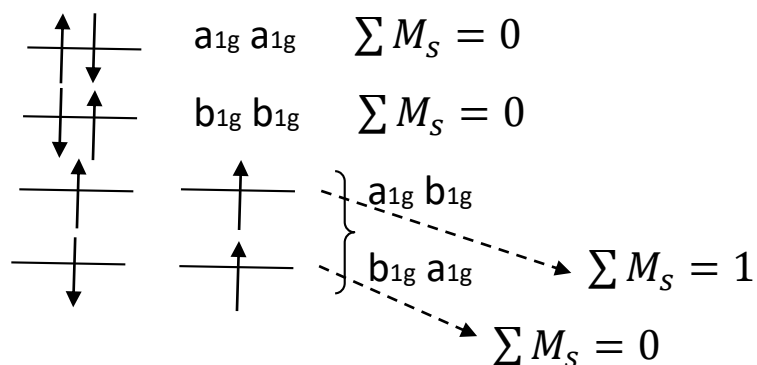
$$(A) O_h \longrightarrow D_{4h}$$

$$(e_g)^2 \equiv (a_{1g} b_{1g})^2$$

$$(B) O_h \longrightarrow C_{2h}$$

$$(t_{2g})^2 \equiv (a_{1g} a'_{1g} b_{1g})^2$$

(A): 4 opcions possibles:



Cal reconeixer que els metall de transició tenen diferents configuracions electròniques segons l'ordre s, p, d i segons el nº d'electrons a cada orbital.

