

L28- KRİSTAL ALAN TEORİSİ

Evet. Geçen ders geçiş metallerinden bahsettik. Bilmeniz gereken isimlendirmelere ve d orbitallerine geçiş yaptık. Eğer geçiş metallerinden bahsediyorsak d orbitallerinden bahsediyoruz demektir. d orbitallerinin bir özetini yapalım. Belki bazılarınız biliyor. Burada d orbitalleri hakkında bilmeniz gerekenler var. d orbitallerinin isimlerini bilmelisiniz, şekillerini çizebilmelisiniz. Çıtamız çok yüksek değil. Elinizdeki notlarda şekiller var, çok güzel şekiller çizmenize gerek yok. Şekilleri çizebilmelisiniz. Farklı d orbital şekilleri gördüğünüz zaman onun hangisi olduğunu tanıyabilmelisiniz ve isimlendirebilmelisiniz. d orbitallerinin şekillerinin nasıl olduğunu tekrar edelim. Bu sınıf için bir referans koordinat sistemi seçelim. z eksenini yukarı ve aşağı, y eksenini paralel, x eksenini de sayfa düzleminin içine ve dışına doğru. Koordinat sistemini biz hep bu şekilde kullanacağız fakat bu genelde soruda size verilir. Eğer verilmezse koordinat sistemini anlattığımız şekilde seçin. İnceleyeceğimiz ilk d orbitali d_z^2 . Büyüklüğünün en fazla olduğu yer z eksenini üzerindedir, xy düzlemi üzerinde de halka şeklindedir. $d_x^2 - y^2$ nin büyüklüğünün en fazla olduğu yer x ve y eksenlerinin üzerindedir. Bu özel orbital direk x ve y eksenleri üzerindedir. Sıradaki d orbitalleri grubunun büyüklüklerinin en fazla olduğu yer direk eksenler üzerinde değildir. Bahsettiğimiz eksenlerle çakışmazlar. Eksenlerle 45 derecelik açı yaparlar. Burada d_{yz} görülüyor. Burada da d_{xz} var, x ve z eksenleriyle 45 derecelik açı yapmış. Burada da d_{xy} , x ve y eksenleriyle 45 derecelik açı yapmış. Bunların hepsini aynı eksen düzeninde gördük. Bu kısım biraz zor.

Bu şekillerde biraz daha iyi görebilirsiniz. Şimdi bunları inceleyelim. Bu nedir? d_z^2 . Peki büyüklüklerin en fazla x ve y eksenleri üzerinde olduğu bu şekil neyi temsil ediyor. $d_x^2 - y^2$. Bu şekillerin farklı versiyonlarını da görebilirsiniz. Bu, onları tanımanız için sadece bir pratik. Peki burada da eksenlerle 45 derece açı yapmış, bu nedir? Evet d_{xy} . Peki bu nedir? d_{yz} . Sonuncusu? d_{xz} . Yukarı aşağı yönde. Biraz daha pratik yapalım. Üç boyutlu düşüneceksiniz. Kağıtta ve sunuda üç boyutlu düşünemeyebilirsiniz. Burada bir video var. Çok net görebilirsiniz. Buradaki d_z^2 orbitalinin büyüklüğü en fazla z eksenini üzerindedir ve xy düzlemi üzerinde de halka şeklindedir. Buradaki de $d_x^2 - y^2$ orbitali. Maksimum büyüklükler eksenler üzerinde bu, onu d_{xy} den ayırmanızı sağlar. Eksenler üzerinde ise $d_x^2 - y^2$. Sıradaki ise d_{xy} . Bu, eksenler üzerinde değildir. Bu orbitaller eksenlerle 45 derecelik açı yapmış. Orbitaller eksenlerin arasında. Buradaki ise d_{xz} orbitali. Eksenlerle 45 derecelik açı yapmışlar. Sonuncusu d_{yz} . eksenlerle 45 derecelik açı yapmış. y ve z eksenleri arasında. Umarım bu videolar d orbitallerinin şekillerini aklınızda tutmanıza yardımcı olur.

Bunlar d orbitalleri. Her derste d orbitallerinden bahsedeceğiz. d orbitallerinin şekillerini öğrenmeniz lazım. Bugünün konusu kristal alan teorisi. Burada duyacağınız ve kitapta bahsedilen iki teori var. Kristal alan teorisi ve ligand alan teorisi. Kimyadaki çoğu şey gibi teoriler deneysel bilgileri açıklamak için geliştirilirler. Koordinasyon bileşiklerinin bazı özellikleri vardır. Ortada geçiş metali, etrafında da ligandlar vardır. Bunlar koordinasyon bileşikleridir ve bazı özellikleri vardır. Bu özellikleri akli temelde açıklamak için iki teori geliştirilmiştir. Bu teorilerin arkasındaki temel düşünce; belirli yükseltgenme basamağına

sahip bir metal iyonunu koordinasyon bileşiminin ortasına koyarsanız ve bu metal iyonun etrafında da ligandlar varken, d orbitallerinin enerjisi o ligandların durumuna göre değişir. Bu tamamen d orbitalleri ile ilgili. Metali çevreleyen ligandlar d orbitallerini etkilerler. d orbitallerinin nasıl etkilendiğini açıklayan bu iki teoriden, kristal alan teorisi iyonik açıklama temellidir. Bu modelde ligandlar noktasal negatif yükler olarak kabul edilir. Oldukça basit bir modeldir. Fakat ligand alan teorisi koordinasyonu, kovalent ve iyonik açılardan ele alır. Bu, daha güçlü ve kullanışlı bir teoridir. Ve daha karmaşıktır. O yüzden bu derste işlemiyoruz. Eğer devam ederseniz ve inorganik kimyayı alırsanız, kitapta da bölüm 5.03, bunu daha ayrıntılı incellersiniz. Çok basit olsa da bu derste kristal alan teorisini işleyeceğiz. Oldukça donanımlı bir modeldir. Bu basitleştirilmiş modeli kullanarak koordinasyon bileşiklerinin bazı özelliklerini açıklayabilirsiniz. Evet kristal alan teorisi gerçekten çok basit. Bu teori, metal ile ligandlar arasındaki etkileşimi iyonik kabul ederek açıklar. Ligandları noktasal negatif yükler olarak kabul eder. Temel prensip; ligandlar noktasal negatif yüklerdir. Ligandlar d orbitallerine yaklaşırlarsa, aralarında itme kuvveti oluşur. Burada bir çizim var. Metal M olarak kısaltılmış, metalin yükseltgenme basamağı ise +n .Metalin etrafında ligandlar var. Buradaki geometri nedir? Oktahedral geometri. z eksenini boyunca yukarıda ve aşağıda , y eksenini boyunca ve x ekseninde sayfa düzleminin içine ve dışına doğru ligandlarımız var. Burada aynı molekülün başka bir resmi var. Metal ortada . NH₃ ligandlarımız noktasal negatif yükler . Dört tane ekvatoryal, bir tane yukarıda bir tane de aşağıda ligandlar var. Bu, oktahedral geometridir . Bu ligandlardan her birini noktasal negatif yükler olarak kabul edebilirsiniz. Eğer noktasal negatif yükler d orbitallerine yaklaşıyorsa aralarındaki itme kuvveti artar uzaklaşıyorsa azalır. Kristal alan teorisinin temel prensibi budur. Burada başka bir resim var. Tüm d orbitallerinin şekli ve ligandların konumu hakkında bilgi sahibi olabilirsiniz. Bugün oktahedral geometri ile ilgili konuşacağız. Daha sonra da tetrahedral geometriden bahsedeceğiz. Burada bir oktahedral geometri var. d orbitallerinizi çevreleyen noktasal negatif yüklerin yerini düşünün. Eğer d orbitalleri, ligandlar gibi eksenler üzerinde ise aralarındaki itme kuvveti daha fazla olacak. Burada görebilirsiniz. Burada itme kuvveti çok büyük . Çünkü d orbitalleri ve ligandlar eksenler üzerinde. Eğer ligandlar eksenler üzerinde ve d orbitalleri eksenler üzerinde değilse itme kuvveti daha düşük olur. Temel prensip budur.

Şimdi her orbitali daha detaylı inceleyelim. Ve d orbitaline yönelen ligandın itme kuvvetini nasıl etkileyeceğini düşünelim. Ligandlar noktasal negatif yükler ve burada d_z^2 ve $d_x^2 - y^2$ orbitallerine yaklaşmışlar. Ligandlar ile d orbitalleri arasında büyük bir itme kuvveti oluşur. Eğer z eksenini üzerinde ligand varsa bu yakın bir etkileşim demektir. Burada ise x ve y eksenleri üzerinde ligandlar var. Ve ligandlar d orbitallerine yönelmişler. Burada büyük bir itme kuvveti oluşur. Bu konuya tekrar döneceğiz. Şu şekilde düşünebilirsiniz. Oktahedral geometrimiz var ve ligandların pozisyonları belli. Kuramsal olarak şöyle düşünebilirsiniz. Ortada metalimiz var ve her yönden ligandlarla çevrilmiş.Yani ligandlar her yerde. Ligandın metalin etrafında her yerde olduğu durumda bütün d orbitalleriniz aynı enerjiye sahiptir. Ancak ligandları izole edip belirli pozisyonlara yerleştirirseniz d orbitallerinin farklı şekillerinin nasıl etkilendiğini düşünebilirsiniz. Buna tekrar döneceğiz. Buradaki durum ligandlar ya da d orbitalleri eksenler üzerinde ise bu, büyük itme kuvveti demektir. d_z^2 ve $d_x^2 - y^2$ orbitalleri

ligandlardan daha çok etkilenir. Ancak etkilenme eşittir. Yani aynı miktar enerjiyle etkilenirler. Burada bir itme var. Aynı miktar enerjiyle etkilenirler. Orbitalerin aynı enerjide olması ne demektir? d_z^2 ve $d_x^2 - y^2$ orbitalleri eş enerjilidir. d_z^2 ve $d_x^2 - y^2$ orbitalleri diğer üç orbitalden daha yüksek enerjili olmuştur. Şimdi bunun neden doğru olduğunu düşünelim. Burada başka bir grup orbital var. Burada; ligandlar eksenler üzerinde iken orbitalerin büyüklüklerinin en fazla olduğu yerler eksenlerle 45 derecelik açı yapmış. Ligandlar; d_{xy} , d_{xz} , ve d_{yz} orbitalleri ile aynı yönde değildir. Bunlar kuramsal örneğe göre daha düşük enerjilidir. Küresel simetrik alanda ligandlar metal atomuna her yönden yaklaştığı için d orbitalleri eş enerjilidir. Ancak oktahedral geometride; d_{xy} , d_{xz} , ve d_{yz} orbitalleri, d_z^2 ve $d_x^2 - y^2$ ye göre daha düşük enerjilidir. Bu üç orbital de eş enerjilidir yani d_{xy} , d_{xz} , ve d_{yz} dejeneredir. Şimdi bir özet yapalım. 2 tane d_z^2 ve $d_x^2 - y^2$ orbitali var. Bunlarla ligandlar arasında büyük itme kuvveti oluşur. Yani ligandlar ile d orbitalleri aynı eksen üzerindedir. Bu orbitallerin enerjileri d_{xy} , d_{xz} , ve d_{yz} 'e göre daha yüksektir. d_{xy} , d_{xz} , ve d_{yz} 'ye gelince, bunlar ile ligandlar arasındaki itme kuvveti daha küçüktür. Çünkü bu orbitaller ligandlar ile aynı eksenler üzerinde değildir. Bu 3 orbitalin enerjisi daha düşüktür. Kristal alan teorisinin oktahedral geometri için temel prensibi budur. Başka bir yoldan da bakabiliriz. Resimler size yardımcı olacak. Burada ligandlar orbitallerle aynı eksen üzerinde. Aşağıda ise aynı eksen üzerinde değildir. Farklı şekiller ama aynı şeyi gösteriyorlar. Bazıları anlamanıza daha yardımcı olur.

Şimdi bazı diyagramlar çizelim. Şu taraftan başlayalım. Kristal alan yarıma diyagramı. Oktahedral durum için . Geometrilere göre diyagramlar farklılık gösterirler. Diyagramı çizelim. Enerji yukarı yönde. Küresel simetrik alanda 5 tane d orbitali ile başlayalım. d orbitallerinin ortalama enerjisi eşittir. Bu çizilen tamamen küresel alan için. Henüz oktahedral alan için değil . Oktahedral diyagramımız bu tarafta olacak . Bu şekilde gösterim yapıyoruz. Eğer bütün ligandlar metal etrafında homojen olarak dağılmış ise d orbitallerinin enerjileri eşittir. Ligandlar metal etrafında homojen ve simetriktir olarak dağılmıştır.

İtiraf etmeliyim ki bunu görünce çok heyecanlandım. Uzun bir süredir bu konuyu öğretiyorum. Daha önce hiç metalin etrafında gerçek küresel kristal alanım olmamıştı. Bir gün Walgreens'e gittim. Walgreens'in küresel kristal alan satması beni çok sevindirdi. Neyle karşılaşacağınızı bilemiyorsunuz. Bu oyuncağın hayranıyım. Örneğin benim köpeğim için harika bir oyuncak. Ama bu gerçekten muhteşemdi. Kasiyere küresel kristal alan sattıklarının farkında olup olmadıklarını sordum, farkında değillerdi. Neyle karşılaşacağınızı tahmin edemiyorsunuz.

Ligandlar metal etrafında homojen olarak dağılmış ise d orbitallerinin enerjileri aynıdır. Eğer bir oktahedral kristal alanda iseniz d orbitallerinin enerjilerinde farklılıklar olur. Bazı orbitaller diğerlerine göre ligandlardan daha çok etkilenir. Enerjileri artar. $d_x^2 - y^2$ ve d_z^2 orbitalleri daha yüksek enerjili hale gelir. 3 orbitalimizin ise enerjileri daha düşük olur. Bunlar d_{xy} , d_{xz} , ve d_{yz} orbitalleridir . Bu enerji farkı oktahedral alan yarıma enerjisidir. Bu

enerji farkını gördüğümüzde oktahedral alanda yarıma olmuş demektir. Δ_o , oktahedral kristal alan yarıma enerjisini gösterir. Bazı orbitallerin enerjisi artar bazılarınınki azalır. Toplam enerji sabittir. 2 orbitalin enerjisi artar, 3 orbitalin enerjisi azalır. Yukarıdaki her bir orbitalin enerjisi $+3/5 \Delta_o$ kadar artarken aşağıdaki her bir orbitalin enerjisi $-2/5 \Delta_o$ kadar azalır. Ancak toplam enerji korunur. Bu, oktahedral durum için kristal alan yarıma diyagramı. Şimdi bazı örneklere bakalım. Krom, 3 tane NH_3 , 3 tane de bromdan oluşan bileşiğe bakalım. Değerlik elektron sayısının kaç olduğunu söyleyin. Son 10 saniye. Çok yüksek bir rakam değil ama doğru anlayanlarınız daha fazla. Bir bakalım. Bromun yükseltgenme basamağı kaçtır? Kaçtır? Brom? Bir brom (-1)'dir. 3 brom var. Peki NH_3 'ün yükseltgenme basamağı kaçtır? 0. $3 \times 0 = 0$. toplam yük 0. Peki Cr kaç olmalı. +3. d elektron sayısı için elementlerin grup numaralarını bilmeliyiz. Kromunki kaçtır? 6. $6 - 3$ (çünkü yükseltgenme basamağı 3) = 3. ve bu bir d^3 sistemidir. Bunu yanlış anlamayın. Sorunun cevabı ile yükseltgenme basamağı tesadüfen aynı çıktı, yükseltgenme basamağını 3 bulup bırakabilirdiniz. Bu bir d^3 sistemi. Şimdi 3d elektronlarını düşünelim ve yarıma diyagramına yerleştirelim. Eğer bir küresel kristal alanımız varsa elektronlarınız bu yönde yerleştirilecek. Şimdi oktahedral durumda ne olduğuna bakalım. Buraya gelelim. İlk elektronumu aşağıya mı yukarıya mı yerleştirelim. Aşağıya. Diyagrama iki şey yazmadığımı fark ettim. Bunlar notlarınızda var. Bu diyagramda orbital enerji seviyeleri için iki tane kısaltma var. Bunlar e_g ve t_{2g} ; orbital gruplarının isimleri. Evet elektronları aşağıda gösteriyoruz. 2 elektronu ilk orbitale aynı yönlü mü yerleştirmeliyiz? Hayır. Bu aynı kuantum numarası demektir ve yanlış olur. Peki aynı orbitale farklı yönler de yerleştiresek? Hayır. Enerjileri aynı olduğuna göre hepsini birer birer yerleştirmeliyiz. Dolayısıyla 3 tane elektronu 3 tane orbitale yerleştirmiş olduk. Şimdi birkaç terimden daha bahsedelim. Size sık sık d^n elektron konfigürasyonunu soracaklar. Orbitaller için kısaltmaları kullanabilirsiniz. 3 elektronu t_{2g}^3 orbitallerine yerleştiririz. Bu t_{2g} orbitallerinde 3 elektron var demektir. Yani oktahedral kristal alandaki düşük enerjili orbital grubunda 3 elektronunuz vardır. Şimdi CFSE'nin ne olduğunu düşünelim. Bu kristal alan kararlılık enerjisi demektir, yarıma enerjisi değil. Kuramsal küresel kristal alanda olmak yerine oktahedral kristal alanda olmakla elektronlar ne kadar kararlı olmuşlar? Burada ne yaparız? Düşük enerji düzeyinde 3 elektron var. $[3(-2/5) \Delta_o]$ oktahedral kristal alan yarıma enerjisi] kadar kararlı hale gelmiş. İşlemin sonucunu $-6/5 \Delta_o$ buluruz. Bu elektronların ne kadar kararlı olduğunu gösterir. Enerjileri düşük, ortalama enerji bundan çok yüksek; fakat bu, oktahedral geometri olduğu için söz konusu 3 elektron kararlı hale gelir. Bu soru için Δ_o değeri ne kadersa, elektronlar, $-6/5 \Delta_o$ kadar kararlı olurlar.

Şimdi başka bir örneğe bakalım. Bu sorudaki koordinasyon bileşiğinde; Mn, 6 H_2O ligandı ve 3 Cl^- var. Peki Mn'in yükseltgenme basamağı kaçtır? Değerlik elektronlarını değil yükseltgenme basamağını soruyorum. Son 10 saniye. Buna kısaca bakalım. Burada çoğunuz iyisiniz. Bu koordinasyon bileşiğindeki toplam yük kaçtır? Şu şekilde yazalım. Burada toplam yük +3, çünkü 3 tane Cl^- iyonu var. Bu, koordinasyon bileşiğinin toplam yükünün +3 olduğunu gösterir. H_2O sıfır, Mn +3. Bunda çok başarılısınız. Peki d- elektron sayısı kaçtır? 4, doğru. $7 - 3 = 4$. Bu bir d^4 sistemi. Buraya bakarsanız, bu 4 elektron için bir seçim yapmalıyız.

3elektron kolaydı, 4 işleri biraz karıştırıyor. Dördüncü elektronu aşağıya mı yerleştirmeliyiz yoksa yukarıya mı? Burada iki ihtimal var. Dolayısıyla burada iki diyagram çizdim. Kristal alan yarıma enerjisinin düşük ya da yüksek olduğu 2 durum var. Yani elektronların yerleşmesi için 2 durum. Burada, kristal alan yarıma enerjisi düşük yani bu bir zayıf alan. Enerji yüksekse bu bir kuvvetli alandır. Zayıf alanda, iki gruba ayrılmış d orbitalleri arasındaki enerji farkı çok fazla değildir. İlk 3 elektronu her zamanki gibi yerleştirirsiniz. Bu durumda olduğu gibi enerji farkı çok düşükse yani bu bir zayıf alansa 4. elektronu üst enerji düzeyine yerleştirirsiniz. “Elektronları eşleştirmek mi yoksa bir üst enerji düzeyine çıkarmak mı daha çok enerji gerektiriyor?” sorusunu sormalısınız. Zayıf alanda, kristal alan yarıma enerjisi eşleşme enerjisinden yani PE’den küçüktür. Elektronları eşlemek daha çok enerji gerektirdiğinden elektron bir üst enerji düzeyine çıkar. Zayıf alanda durum bu şekildedir.

Kuvvetli alanda ise, yarıma enerjisi çok büyüktür. Bu durumda, kristal alan yarıma enerjisi PE’ den fazladır. Yani elektronları eşleştirmek, üst enerji düzeyine çıkarmaktan daha kolaydır. Bakın, oraya ulaşamıyorum bile. Bu nedenle, 3 elektronu yerleştirdikten sonra dördüncüyü de düşük enerji düzeyine yerleştiriyorum, ulaşabildiğim yere. Yukarıya çıkarmak için yeterli enerjim yok. Bu, kuvvetli alan. Zayıf alanı halledebiliyorum, kuvvetli alanda hepsini eşleştirmeliyim. Bu ikisi için farklı d- elektron konfigürasyonu yapalım. Bu yukarıda kalsın.

Zayıf alanda d^4 elektron konfigürasyonu için 3 elektron t_{2g} ’ de. e_g ’ de ise 1 elektron var. Kuvvetli alanda ise, e_g ’ de elektron yok. t_{2g} de 4 elektron var. Bunu burada bırakalım. Yüksek spin ve düşük spin terimleriyle tanışalım.

İki durum burada. Kristal alan yarıma enerjisinin eşleşme enerjisine yani elektron çiftlerini bir arada tutmak için gerekli olan enerjiye oranla ne kadar büyük olduğunu düşünelim. Zayıf alanda yarıma enerjisi düşük olduğundan elektronlar orbitallere birer birer yerleştirilir, yerleştirilen elektronların spinleri paraleldir. Kuvvetli alanda ise, eşleşme enerjisi yarıma enerjisinden düşüktür- kuvvetli alanda yarıma enerjisi çok büyüktür- elektronlar t_{2g} doluncaya kadar yerleştirilir ve eşleştirilir, t_{2g} dolmadan e_g ye elektron yerleştirilmez. Buradan çıkan sonuç, zayıf alanda eşleşmemiş elektron sayısı maksimumdur. Dört elektronun dördü de eşleşmemiştir. Maksimum sayıda eşleşmemiş elektron yüksek spin demektir. İkinci durumda ise, eşleşmemiş elektron sayısı minimumdur. Bu da düşük spin e karşılıktır.

Bu iki durumun kararlılık enerjisinden de bahsedelim. CFSE, kristal alan kararlılık enerjisi. Peki zayıf alanda kararlılık enerjisi nedir? Son 10 saniye. Çok iyi. Soruya bakalım. Alt enerji düzeyinde kaç elektron var? 3. Bu elektronların her biri $(-2/5 * \Delta_o)$ kadar kararlı yani düşük enerjili olurlar. Üst enerji düzeyinde bir elektron var. $+3/5 * \Delta_o$ kadar. Sonuç $-3/5 \Delta_o$. A şıkkı neden doğru değil? Oktahedral kristal alan yarıma enerjisinin sembolü yok. Testlerde bu terimi yazmayı unutmayın. Bu terimi unutmanız için bir hatırlatma olduğunu umuyorum. Peki kuvvetli alan için durum nedir? 4 elektron var. $4 * (-2/5 * \Delta_o)$. Sonuç $-8/5 * \Delta_o$. Bazı kitaplarda sonuç $-8/5 * \Delta_o + PE$ olarak geçer. Buradaki eşleme enerjisini belirtmek için kullanılır. Bu çok avantajlı değil. Düşük enerji düzeyinde çok elektron var bazılarını

eşleştirmelisiniz. Eğer iki eşleşmiş elektron varsa PE nin katsayısı 2 olur. Bazı kitaplar bu şekilde gösterir. 2 çözümün de doğru olduğunu belirtmeliyim. Eğer soruda “eşleşme enerjisini kullanın” derse cevabı hangi şekilde yazmanız gerektiğini anlarsınız. Kuvvetli alanda PE ‘yi kullanırsınız.

Başka bir örneğe bakalım. Böylece oktahedral alanla ilgili soruları yapabilir hale geleceksiniz. Elektronları silelim. Co^{2+} iyonuna bakalım. Kaç elektron yerleştireceğiz? Yükseltgenme basamağı? +2. Peki değerlik elektron sayısı kaçtır? Grup numarası nedir? $9-2=7$. d^7 sistemi. Zayıf alan için elektron dağılımı nasıldır? Son 10 saniye. Çok güzel. Bu bir zayıf alan. Önce tüm orbitallere birer elektron yerleştirmeliyiz. Çünkü yarılma enerjisi eşleme enerjisinden düşük. Eşleştirmeden önce hepsini birer birer yerleştirmeliyiz. 7 elektron var. bir-iki-üç-dört-beş. Şimdi eşlemeliyiz. Kullanılmamış orbital yok. Eşlemeye aşağıdan başlıyoruz. Altı-yedi. Başka seçenek yok. Artık elektronları eşlemeliyiz. Bu bir zayıf alan olduğu için önce elektronları birer birer yerleştirmeliyiz daha sonra da eşlemeliyiz. Peki burada ne yapmamız gerektiğini düşünelim. Unutmayın, bu bir kuvvetli alan, yarılma enerjisi büyük. Elektronları eşlemek için gerekli olan enerji, üst enerji düzeyine çıkarmak için gerekli olandan daha az. Önceki yoldan yapıyoruz. Bir- iki- üç. Eşlemek, yukarı çıkarmaktan daha kolay. Bir-iki- üç. Hepsini eşledik. Şimdi hepsi doldu. Başka seçeneğimiz olmadığı için son elektronu üst enerji düzeyine yerleştiriyoruz.

Yarılma enerjilerine göre 2 farklı durum ortaya çıkar. Yarılma enerjisini belirleyen nedir? Ligandların doğası. Gelecek derste bundan bahsedeceğiz. Yaygın ligandları tanıyacaksanız, yine kuvvetli ve zayıf alanlar olacak. Onlardan bahsetmedik, şimdilik sadece iki durumu gördük. Peki bu sistem bir yüksek spin mi düşük spin mi? Yüksek spin çünkü maksimum sayıda eşleşmemiş elektronu var. Bu ise düşük spin. Eşleşmemiş elektron sayısı minimum. Bunu şimdilik bitirelim. d^n elektron konfigürasyonu ve kristal alan kararlılık enerjisini bulalım. İlk durumda t_{2g} sistemi var. Kaç tane? 5. Peki e_g ? 2. Yarılma enerjisini bulalım. $[5*(-2/5) \Delta_o] + [2*(+3/5)* \Delta_o]$. Sonuç nedir? $(-4/5)* \Delta_o$. Opsiyonel olarak +2PE yazabiliriz. Çünkü 2 çift eşleşmiş elektron var. Kuvvetli alana geçelim. t_{2g} de kaç elektron var? 6. Peki e_g ? 1. Yarılma enerjisini bulalım. $[6*(-2/5)* \Delta_o] + [1*(+3/5)* \Delta_o]$. Sonuç nedir? Eksi kaç? $(-9/5)* \Delta_o$. Kaç tane eşleşme enerjisi? 3 eşleşme enerjisi. Bu kısmı not alın. Gelecek ders işimiz biraz daha zorlaşacak. Ligand türleri, tetrahedral, kare düzlem hakkında konuşacağız. Bu tabi ki çarşamba günkü sınavdan sonra. Herkese sınavda iyi şanslar.