

第三章 络合物结构

一、填空题

- 1、Jahn-Teller 效应的内容为_____。
- 2、 $\text{Fe}(\text{CN})_6^{3-}$ 的 LFSE=_____。
- 3、铁的两种络合物：(A) $\text{Fe}(\text{CN})_6$ ，(B) Na_3FeF_6 ，它们的摩尔磁化率大小关系为 χ_A ____ χ_B ，它们的紫外可见光谱d-d跃迁的波长大小关系为 λ_A ____ λ_B 。
- 4、晶体场稳定化能定义_____。
- 5、分裂能
- 6、成对能
- 7、晶体场理论的主要内容

二、选择题

- 1、下列哪个络合物的磁矩最大？ -
(A) 六氰合钴(III)离子 (B) 六氰合铁(III)离子
(C) 六氨合钴(III)离子 (D) 六水合锰(II)离子
(E) 六氨合钴(II)离子
- 2、 推测下列三种络合物的 $d-d$ 跃迁频率大小顺序： -
(1)六水合铁(III) (2)六水合铁(II) (3)六氟合铁(II)
(A) $\nu_1 > \nu_2 > \nu_3$ (B) $\nu_1 > \nu_3 > \nu_2$ (C) $\nu_3 > \nu_2 > \nu_1$
(D) $\nu_3 > \nu_1 > \nu_2$ (E) $\nu_2 > \nu_1 > \nu_3$
- 3、 下列络合物的几何构型哪一个偏离正八面体最大？
(A) 六水合铜(II) (B) 六水合钴(II) (C) 六氰合铁(III)

(D) 六氰合镍(II) (E) 六氟合铁(III)

4、单核羰基络合物 $\text{Fe}(\text{CO})_5$ 的立体构型为:

(A) 三角双锥 (B) 四面体 (C) 正方形

(D) 八面体 (E) 三角形

5、四羰基镍的构型应为

(A) 正八面体 (B) 平面三角形 (C) 四面体 (D) 正方形

三、简答题

- 1、第一过渡系列二价金属离子在八面体弱场作用下和在八面体强场作用下，离子半径变化规律有何不同，简述之。
- 2、试解释为什么 $d^7 \sim d^{10}$ 组态的过渡金属原子或离子难以形成稳定的八面体配合物。
- 3、为什么在过渡元素的配位离子中，八面体构型远较四面体构型多？

四、计算题

- 1、对于电子组态 d^4 八面体过渡金属离子配合物，计算 (1) 分别在高低自旋时基态的能量。(2) 当高低自旋的构型具有相同能量时，成对能 P 和晶体场分裂能 $10Dq$ 的关系。
- 2、计算 d^6 组态的晶体场稳定化能。
- 3、已知 $[\text{Co}(\text{CN})_6]^{3-}$ 的分裂能为 34000cm^{-1} ，成对能为 21000cm^{-1} ，计算其 CFSE。