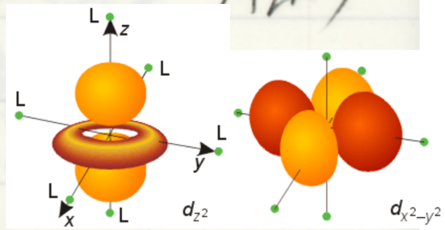
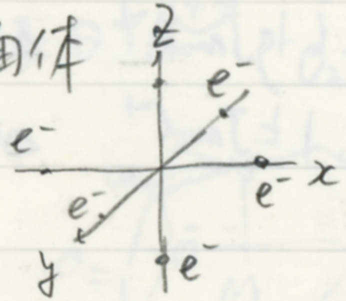
§5.4 結晶場 CF.) 定性的には同じ結果の説明
配位子場 LF.

(MO法に基づくLFの方が modern, π配位などに対応)

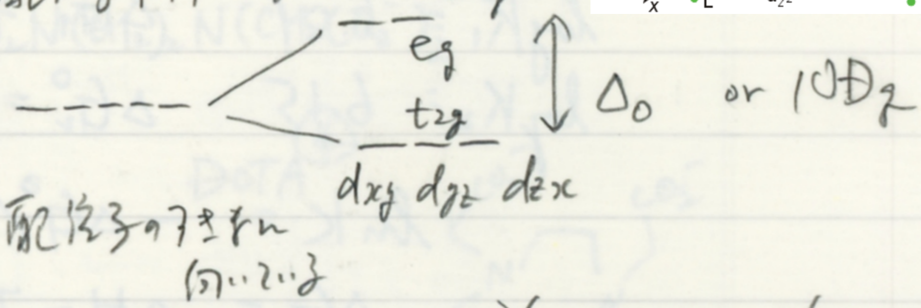


CF.

§5.4.1 八面体



配位子に向いている d_{z^2} $d_{x^2-y^2}$



クーロン反発を考えるのだ

重心は変えない(重心則)ので $\frac{3}{5}\Delta_o$ 上がり $\frac{2}{5}\Delta_o$ 下がる

CFSE 結晶場安定化エネルギー

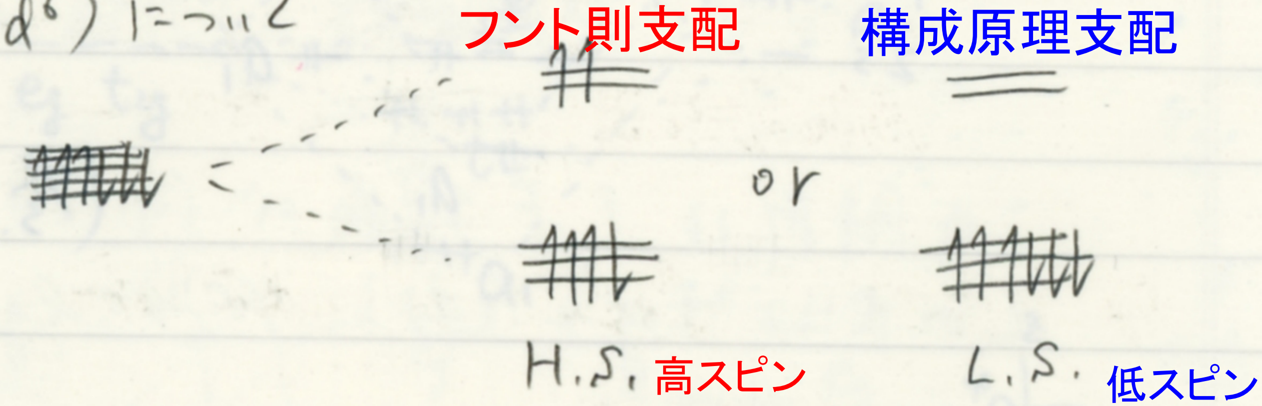
		弱い場	CFSE	強い場	
例	d^1	t_{2g}^1	$-\frac{2}{5}\Delta_o$	t_{2g}^1	$-\frac{2}{5}\Delta_o$
	d^5	$t_{2g}^3 e_g^2$	0	t_{2g}^5	$-2\Delta_o+2P$
	d^8	$t_{2g}^6 e_g^2$	$-\frac{6}{5}\Delta_o+3P$	$t_{2g}^6 e_g^2$	$-\frac{6}{5}\Delta_o+3P$

ただし Pは 電子対形成エネルギー

§5.6 結晶場（配位子場）の強さと磁気的性質・電子スペクトル

Δ_o（配位子場分裂エネルギー）と P（フント則）の競争
or 結晶場
↑対形成に必要なエネルギー

例：Fe^{2+} $(3d^6)$ について



$$E(\text{H.S.}) = \text{CFSE} + \text{Hund}$$
$$= \left(-\frac{2}{5}\Delta_o \times 4 + \frac{3}{5}\Delta_o \times 2\right) + P$$
$$= -\frac{2}{5}\Delta_o + P$$
$$E(\text{L.S.}) = \left(-\frac{2}{5}\Delta_o \times 6\right) + 3P$$
$$= -\frac{12}{5}\Delta_o + 3P$$

注：Δ と P は正値の扱い

§ 5.6 （$3d^6$ イオン（例えばFe^{2+}）ケーススタディ続き）

E(H.S) < E(L.S.) なら

$$-\frac{2}{5}\Delta_o + P < -\frac{12}{5}\Delta_o + 3P$$

$$\Delta_o < P$$

だから Δ_oが Pより 小さいと 常磁性 (S=2)　d-dギャップ小

Δ_oが Pより 大きいと 反磁性 (S=0)　d-dギャップ大

定量的に大小の目安がP

H.S.またはL.S.が好まれるのはどういう条件か？
似た考察を、d^1〜d^9 のすべてで検討すれば良い。

練習問題：八面体型 $3d^4$ イオン（例えばMn^{3+}） について、

(a) L.S. とH.S. のそれぞれの電子配置を描き、
(b) それぞれの電子配置についての CFSE を Δ_O と P で表し、
(c) 最後に L.S. とH.S. の電子配置を与える条件を求めよ。