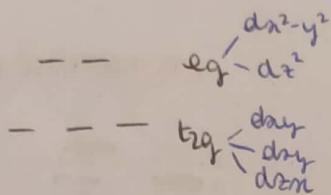


INORGANIKA KONZEPTEU NAGUSIAK

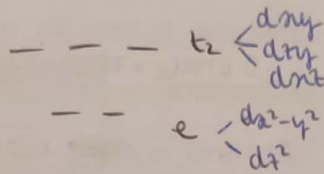
I - KRISTAL EREMLA

↳ Ligandoak karga puntualak alderapenak sortu.

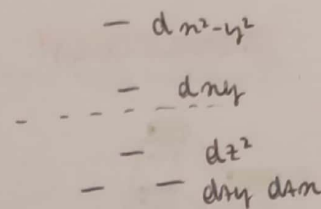
EREMU OKTAEDRIKO



EREMU TETRAEDRIKO



KARRATU-LAUA



↳ $10Dq \neq \Delta_o$ geom, karga, L arabera

- $\Delta_t < \Delta_o$ ze karga ↓ ald ↓ ($\Delta_t = \frac{4}{9} \Delta_o$)
- M^+ : + handiago, L^- hurbelago: $\Delta_o \uparrow$

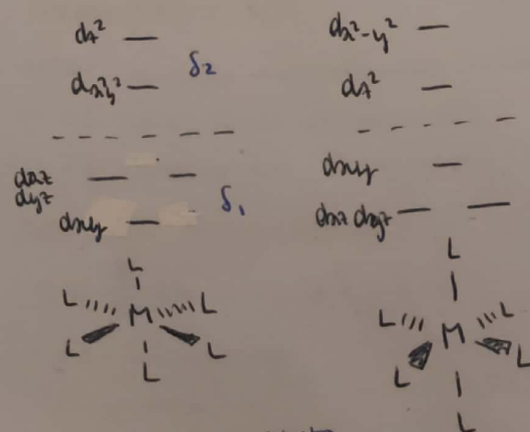
BARIZENTROA MANTENTZEN DA!!!

ZEIN GEOMETRIA?

- ↳ 1. T.S: Ligandoak jarri, salku Co^{3+} : E.A. (spin ↓)
- ↳ 2. + 3. T.S: Eremu altua inposatu (e^- asko dituzte)
- ↳ K.L. itatuko: d^8 + eremu altua
- ↳ E.A. koek ML_6 indatzi E.B. ek ML_4
- ↳ Oh-en EA eta EB
- ↳ Td-en EB (d^{10} Td ze Mk ya nahiko e, d^5 S.A ere)
- ↳ lau karratuak d^8 + E.A.

JAHN-TELLER

- ↳ Animetrikoki bihurtuko orbitaletan
- ↳ Endekapene kaurri = egonkortu



- ↳ kizaketa > murrizketa
- ↳ $S_2 > S_1$
- ↳ Spina EE ALDATU

NEURKETA MAGNETIKOA

$$\mu_s = \sqrt{n(n+2)} \quad n: e^- \text{ desp}$$

$$\mu_{ef} = 2\sqrt{S(S+1)}$$

LIGANDOAK

↳ Suposatzen da - diren $Dq \uparrow$ kauria eta da hola gertatzen

Triskelotako inkompatibel ΔT .
efektuarekin, ze kizaketa zuzena,
erri da deformatu.

II - ORBITAL MOLEKULARRAK

→ Simetria + E beretiko orbitalekin konbinaketa linealak

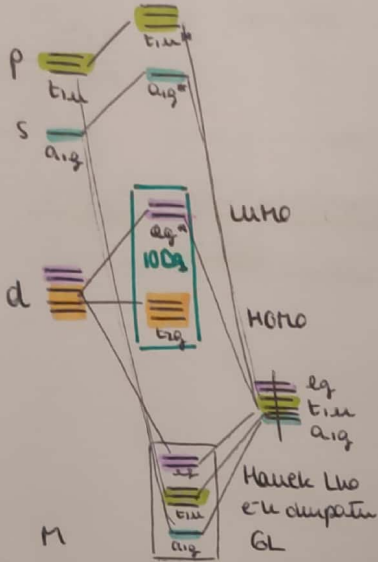
→ Ligendoetara guztiak konbinatu a_{1g} ; t_{2g} ; e_g ematen

• a_{1g} : s-ren konbi.
↳ 1 a_{1g}

• t_{2g} : p-ren konbinaketa
↳ 3 t_{2g}

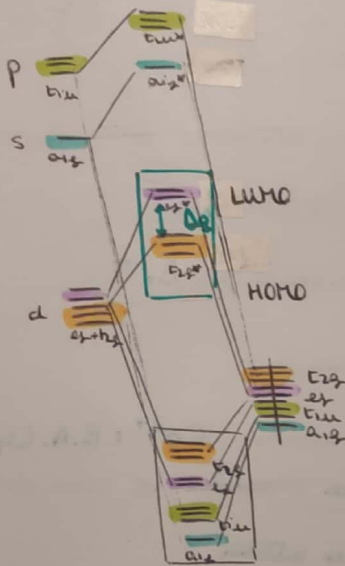
• e_g : d-ren konbi.
↳ 2 e_g

O EMALE (E.E.)



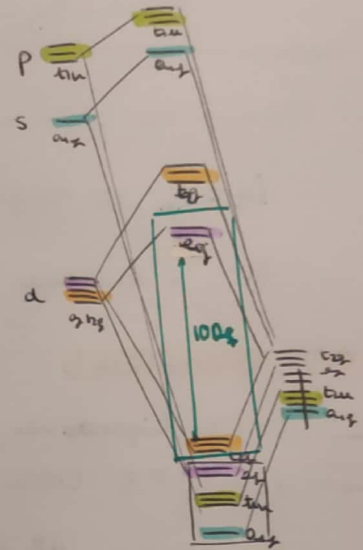
→ Metalaren t_{2g} eta d-ak mugatzen

TI EMALE (E.B.)



→ t_{2g} bete, t_{2g} eta HOMO

TI HARTZAILE (E.A.)



→ t_{2g} eta d-ak dago duntzen: LUMO

CO INFRAGORRIAN

→ M-k \ominus badi, erratago sartu e-k C-N lasturan. C-M \uparrow = CO \downarrow

→ M-k L eneg badien, karga kendu, CH \downarrow = CO \uparrow

SERIE ESPEKTROKIMIKOA

$I < Br < S^{2-} < SCN^- < Cl^- < NO_2^- < N^{3-} < F^- < OH^- < C_2O_4^{2-} < O^{2-} < H_2O <$

$NCS^- < CH_3CN < py < NH_3 < bipy < phen < NO_2 < PPh_3 < CN^- < CO$

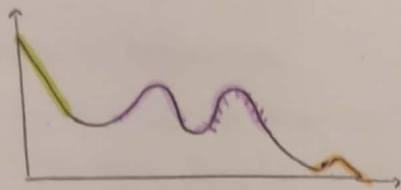
TETRAEDRIKAREN SPINA?

OSEA??

III - ESPEKTRO ELEKTRONIKOAK

↳ $Dq \neq d-d$ renbat $E \neq \rightarrow$ kolore \neq

TRANSIZIOAK



• SPIN + LAPORTE DEBEKATUA:

• SPIN EDO LAPORTEK DEBEKATUA

• SPIN + LAPORTEK BAIMENQUITA: $M \leftrightarrow L$ karga transferentzia

* SPIN: s oinarri = s kofikatzen

* LAPORTE: simetria aldatu

↳ HAUTAN BI MOTA DAUDE

E_t da = t_{2g} -ko d_{xy} -tik d_{z^2} ra edo d_{xy} -tik d_{z^2} ra, non gehiago nabaritzen E aldatuta s. ean atipia gaa.

TERMINOAK

OINARRIEN TERMINOAK KALKULATZEKO

Zenbaki kuantikoak: n ; $l(n-1)$; $m_l = -l \rightarrow 0 \rightarrow +l$; $m_s = +\frac{1}{2}; -\frac{1}{2}$

MIKROESTATUAU

$$M_E = M_L \times \text{MULTIP.}$$

d	+2	+1	0	-1	-2
p		+1	0	-1	
s			0		
orbitale			m_l		

• Ezkerretik beheren hasi

• m_l batura kalkulatu

$L = m_l$ batura

• spin altuera

L	0	1	2	3	4	5	
termino	S	P	D	F	G	H	(-J)

$$S = n \times \frac{1}{2}$$

TERMINOAK: $2s+1$ termino

↳ Energia baxuenekoa da **multiplizitatea** \uparrow eta termino (L) \downarrow

↳ ligando \rightarrow aldarapen \rightarrow terminoak banaketan dira, mikroestatuak talde \neq .

RACAH PARAMETROA

↳ A: aldarapen interelektronikoa (arabarra)

↳ B, C: d e^- arteko aldarapenak.

• e^- gehiago edo n^+ gehiago = B, C \uparrow

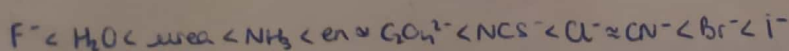
Tareku-Sugaronki: B alera

PARAMETRO NEFELAUETIKOA

$$\beta = \frac{B}{B_0} \text{ (be ioi asuaren racah)}$$

• $\beta \downarrow$ = KOBALENTEAGO

• L- apgarra, wald



MARGA TRANSFERENTZIA

↳ $L \rightarrow M$

• Ox. altua

• Lk e^- askeak

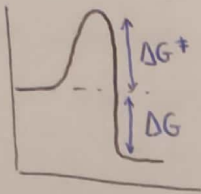
↳ $M \rightarrow L$

• Ox. baxua

• Lk π^* E. baxuko.

IV - EGONKORTASUN T_{dinamiko} ETA ZINETIKOA

KONTEPTUAK



→ T_{dinamiko} diseqonkor leqonkor : $\Delta G = -RT \ln K$ ($K = \frac{[prod]}{[reag]}$)
 → Zinetikoki labiala / geldoa : $k = A e^{-\frac{E_a}{RT}}$

TERMODINAMIKA

- H-L lotura
- Oreka k₁
- Redox v

ZINETIKA

- IR v
- B. partekari E

TERMODINAMIKA

$$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ = -RT \ln K$$

→ Egenkorrago itatuko $\Delta G^\circ < 0$

→ H₂O sarkhen neurkerak: K_f ↑ bada, L hobeto lotu

→ Normalki $k_1 > k_2 > k_3$ ze L gehiago = aldarapen ↑
 $k_2/k_1 = 0.28$

→ Geom edo spin ≠ → $\frac{k_2}{k_1}$ aldatu

→ $\Delta H =$ bada (ä lot. =) hobe $\Delta S > 0$ bada.

KELATOAK

→ 5 liduko eta > 6 liduko eratzunak egonkor

→ e⁻ dislekutial egonkor "aromatiko"

GOGORTASUNA

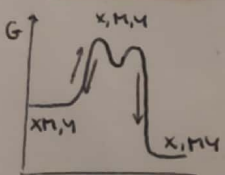
Ligendo gogorra: e⁻ neg eta itikia

Kutal gogorra: ox. zbk ↑ eta itikia

Bigunak ♥ bigunak eta Gogortak ♥ gogortak

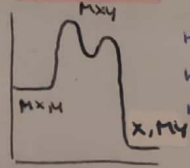
ZINETIKA

DISOZIATIBO



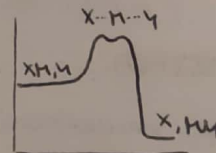
→ Oreka disoziazioan markatu
 → $a = k_1 [X-Y]$
SN1

ELKARKORRA



→ Yren arabera
 → Bitart. "egonkor"
 → $a = k [X-M][Y]$
SN2 (L.K. beh)

ELKARTRUKAKORRA

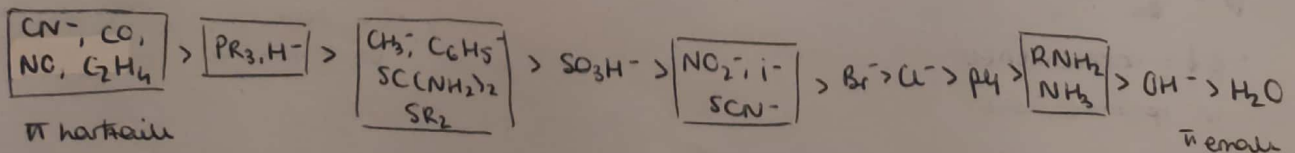


→ Tertekaria et.

TRANS EFEKTUA

→ Guatr experimental, salik lau-karrakutan

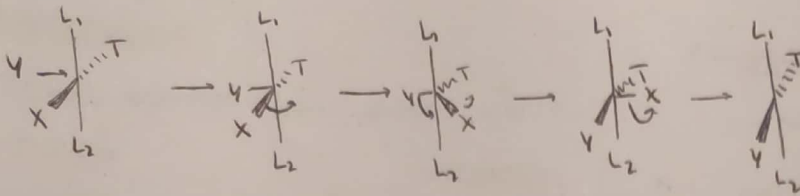
→ L bakulu hobetsi haiei trans sartzea



→ Transiko d e⁻ "lapurte": lot aruldu.

ORDENKAPEN ERREAKZIOAK

KONPLEXU TETRAEDRIKO



KONPLEXU OKTAEDRIKO

↳ ERESE NIÏ: M^+ handiak + e^- gutti (2. eta 3. senero 4. senero e.)

↳ Normalki $D > E_D$ baino.

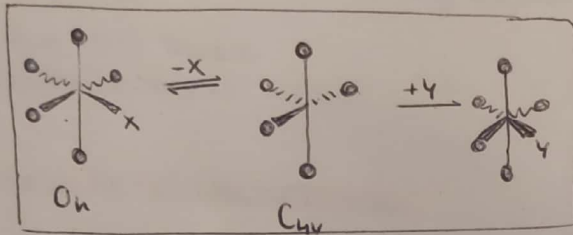
↳ LABILTASUNA:

• $Z/r \uparrow$, L latuago, $u \downarrow$

↳ EGONKORTASUNA

• KEEE, egonhoratu, geroago (d^3, d^5, d^6 s.b.)

• labilak J.T. (Cr^{2+}, Cr^{2+})



↳ LOTURAHASKETA E

↳ KEEE Chv eta Oh ARTEAN

ISMERITADIA

DISOCIATIBO

nerria \approx kuts

• Berryren pseudoberala

• Baylar

• Ray-Gitt

ERREDOX

KANPO - ESFERAZKOAK

• $K_{redox} < K_{redox}$

• L es ardatu

• Transizio egoera: lot gutxiak \neq bera

• $M_1^+ \rightarrow M_2^+$

$$\Delta G^\ddagger = \Delta G_{sc}^\ddagger + \Delta G_{ie}^\ddagger + \Delta G_{ke}^\ddagger$$

BARNE - ESFERAZKOAK

• M baten L askatu

• 2 M an L bereku lotu

• e^- pasa

V - ORGANOMETALIKOAK

DATUAK

→ Karbino: $M \equiv C-R$ (3-!) $\eta^1-(C-R)$

→ Alkilideno: $M=CR_2$ (2-!)

→ Alilo: $\eta^3: M-C \begin{matrix} H \\ | \\ C=CH_2 \\ | \\ M \end{matrix}$ $\eta^1: M-C \begin{matrix} H \\ | \\ C=CH_2 \end{matrix} (1-)$

→ Orbital lotura gurtiala (bai big) bete

→ $16e^-$ lau-karratu edo Tet $\left\langle \begin{matrix} D_{oh} \\ \neq \\ \downarrow \end{matrix} \right.$

→ Au lineal ($14e^-$)

ARIKETETAN

Halogeno zubi > M-M zubi
(eta H edo $\sigma C \equiv C$?)

KARBONILAK

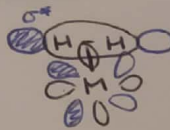
→ lotura $sp(C \text{ de } CO)$ egonkortu

M Toxinen itasera E edo ET, $\pi^* n e^-$ ngartu

HIDRURAK

→ H^- edo H_2

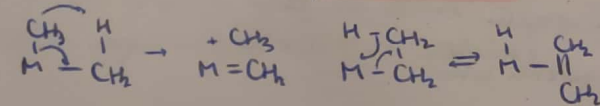
→ Con betela Mx σ^* ra eman e^-



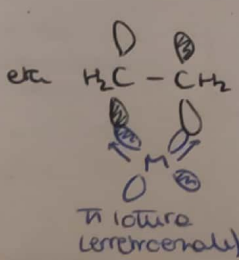
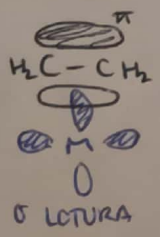
lotura ahuldu

ALKILO RAK

H α transferentzia β -eliminazioa



OLEFINAK



IRDO ETA KATALISIA

→ KONPERTATUA: cis (M^+ gai orb. π ten e^- hartuko) KOBAL.

→ SN_2 : Trans LOT IONIKO (Ni^2+)

H erreakzioa

ELIMINAZIO REDUKTIBO

→ d^6 eta d^8 baliz ere

OLEFINEN H_2 ZIOA

→ $18e^-$ BETI DISORTATIBOIA

SOLIDOEN EGITURA ETA ETAUGARRIAK

↳ Akatsak etangarni ≠

INTRINTSEKOAK

↳ Td kok: egonkorragoa akatsak ukatea

PUNTUALAK

↳ Zorizkoak eta isolatuak

- SCHOTTKY:
Kat + ani. **hutsuneak**
- FRENKEL:
M⁺ zirkulatu **aldatu**
(d⁵, d¹⁰, d⁰) (Oh → Td)
- ANTIPOSIZIO:
ä-k (M⁺) **tenkattu**
(hutsun batz, ere)

HEDATUAK

↳ Egitura osan

- LABAINKETA:
Plano bat (o)
desagertu,
geruzak bat
deskalatu Oh
mantentze
(Td eragokor)

ESTRINTSEKOAK

↳ Konposaketa, **esteikiometriak** aldatuak

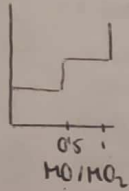
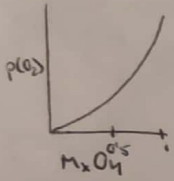
KATIOIAK BARTU

↳ M⁺ ordez M³⁺
sarhea, ordutan
aniak ere atara
behar, karga karg.
Konposaketa +
egitura aldatu

ANIOIAK ATERA

↳ An⁻ ordez
e⁻ bat gelditu
Kolore ≠.

KONPOSATU ET - ESTEIKOMETRIKOAK



↳ Lehena graduale da, M⁺ eta M²⁺/M³⁺ nahastu.

↳ Bigarrena **esteikiometriko**, alkalino + lurralkalino.

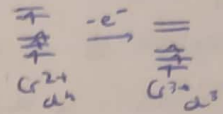
EGITURA KRISTALINOAK

II - OXIDO METALIKOAK

- M + handituz: itzara kobalentea ↑
- M-M loturak gerta daitezke.

MONOXIDOAK

→ Gehienak **erdieroaleak**, M⁺ falta dutelako. (CrO, et da egonkorra).



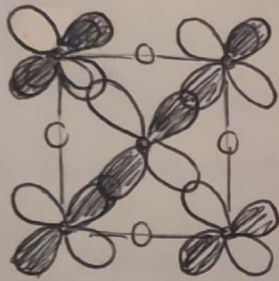
NaCl EGITURAKO MONOXIDOAK

- d⁵ eta d¹⁰ "egonkor" ze Ok S.A.
- Beta **Fe falta** → Fe²⁺ + Fe³⁺ → ERDIEROALEA

AKATSAK ETA E-E ESTERIO

- T ↑, akatsak ↑
- Normalki hutsura Oh
- Fe²⁺ Oh eta Fe³⁺ (d⁶) Td

EROKORTASUNA



→ d_{xz} orbitalak
V²⁺ eta Ti²⁺ en
gaitzari:
t_{2g} banda
erdi-okupatur

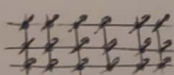
→ Zenbat eta eskuenarago
joan, M⁺ tipuago,
d_{xz} eta d_{xy} gaitz.
Ce²⁺-ek eta du e-rik
→ Erdieroale: e⁻k **saltoa**

MAGNETISMOA

→ Paramagnetiko: denak urratuak nahiz baina T eragatik erin.

FERROMAGNETIKO

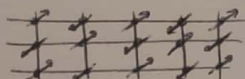
• Lerrokatze **PARALELO**



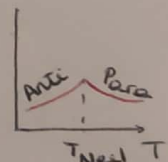
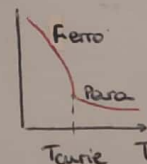
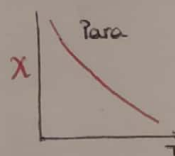
• T handituz ↓

ANTIFERROMAGNETIKO

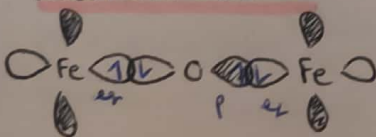
• Lerrokatze **ANTIPARALELO**



• T ↑ ↑ Neel + hata.



NaCl MONOXIDOETAN



- eg erdi-beteak pri esparrak gaitz: **Pasiren printzipioa**
- Ti²⁺ eta V³⁺ erin ze eg?
- Cu eta Zn kobalenteago?

4/4/7

BESTE EGITURAKO OXIDOAK

→ Kateak (PTS)

→ ZnO: ZnS wurritza. M kobalente errazdoia. (O: Oh; Zn: $\frac{1}{2}T_{6h}$)

SESHIOXIDOAK (M TRIBALENTE)

→ M_2O_3 dira.

→ M artxo $d \neq$, lotura \neq dardelako. (aurp < erit < erpin)

• Ti eta V-u batuz ere M-M lot.

T ↑ **eroale** baina T ↓ **erdi-eroale** (aldaketa estruktural)

• Cr eta Fe isolatatu (estekia) eta **antiferro**.

Et-purutasun (O falta): Fe^{4+} / Cr^{4+} **erdi-eroale**

ERRUBIAREN ADIBIDEA

• Al_2O_3 xura • Cr_2O_3 berdea • $Al_{2-x}Cr_xO_3$ gorria

→ Erema Oh du. $R_{Cr} > R_{Al}$. Cr-u Al lekua hartu: "estru" / "inkomodo" dago.
Orduan $t_{2g} \downarrow$ eta $e_g \uparrow$. Transizionako E gehiago behar.

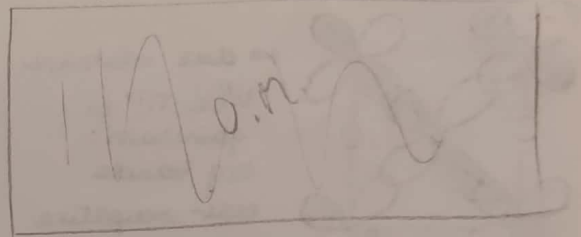
DIOXIDOAK (TiO_2 , Rutile)

→ O_h hutsura hexagonal, T.L.

→ $M^+ O_h$

→ Eritz + erpinak partekatuz: $bt \neq$

TiO_2



M^+ HANDIAGERKO OXIDOAK

→ isolatatu, diamagnetiko

→ Et dago M-M interakzioak } LOT

→ ReO_3 : O lineal + $Re O_h$ } KOB.

++

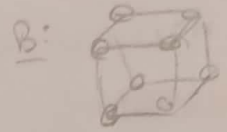
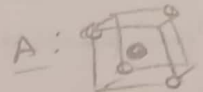
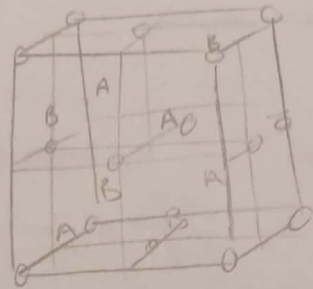
III - OXIDE MIXTOAK

→ $2M^+$ dituen fase kristalino bakarreko oxidak.
Itan daitezke M^+ bat ox. zbk \neq

← eun dif. er-purutasuna edo ox. misto

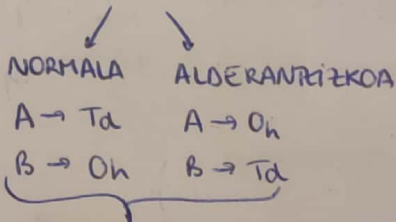
ESPINELAK

- AB_2O_4
 - $A^{II}B_2^{III}O_4$: **NORMALA** (2,3)
 - $A^{III}B_2^{II}O_4$: **ALDERANTZAKOA** (4,2)
- Ok K.T (FCC)
- $B^{III} O_h \frac{1}{2}$ hutsura
- $A^{II} Td \frac{1}{8}$ hutsura



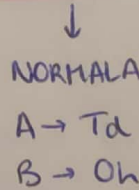
ESPINELA ARIKETA

2, 3 MOTAKOA



↳ Inusi biko da
 $\Delta KEEE_{out-Td}$
 ↓
 O_h nahia go duena

4, 2 MOTAKOA



- ↳ Ondoren spinarentzat, geo berdina: paralelo (es deuseztatu)
- ↳ Geo. ez = → "urrokatu" antiparalelo

• TiO es da antiferromag. ze es du e^- spin polarizatuak
 e_g^-

PEROVSKITAK

↳ Kristalean **dipolo** (polarizazioa) ze a handiak es dauka gutxi zentroan (O^{2-} gutxi eta dute g. bera).

PIEZOELEKTRINO $\begin{matrix} \swarrow \times \\ \searrow \times \end{matrix}$ Ferroe-

ABO_3

↳ **Protonak** e^- mugiarazi

SUPERERDARAK

- ↳ Erema mag. eskuita (normalki Td)
- ↳ $YBa_2Cu_3O_7$ "123"
- Cu^{2+} / Cu^{3+} : lau-karratu + oinarri-karratu piramidia
- Dopatu (Cu edo Y)

SILIKATO ETA ALUMINO SILIKATO

→ SiO_2 / SiO_4

→ Piezoelektrikoa: eremu e^- oszilazioak baten *dar-dar* egia **Hizte**: E neurria

→ Anai polimerikoa izan daiteke

ORTOSILIKATO

→ H^+ / O^{2-} ≠

KAOLINITA

H_2O sartu daiteke / laminak.

ALUMINOSILIKATO

→ Zeharkak "poroak" eta "kanalak"

↳ icialak harriak

↳ Q harriak

↳ Erradikalak. "harriak"