



University of Groningen

The electronic structure of some tetrachloro transition metal clusters. An application of quantum chemistry

Smit, Tonnis Jan Meint

IMPORTANT NOTE: You are advised to consult the publisher's version (publisher's PDF) if you wish to cite from it. Please check the document version below.

Document Version

Publisher's PDF, also known as Version of record

Publication date:

1975

[Link to publication in University of Groningen/UMCG research database](#)

Citation for published version (APA):

Smit, T. J. M. (1975). The electronic structure of some tetrachloro transition metal clusters. An application of quantum chemistry. s.n.

Copyright

Other than for strictly personal use, it is not permitted to download or to forward/distribute the text or part of it without the consent of the author(s) and/or copyright holder(s), unless the work is under an open content license (like Creative Commons).

Take-down policy

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

Downloaded from the University of Groningen/UMCG research database (Pure): <http://www.rug.nl/research/portal>. For technical reasons the number of authors shown on this cover page is limited to 10 maximum.

Samenvatting.

Het doel van dit onderzoek was de rekentechnische middelen van de moderne kwantumchemie toe te passen op een aantal problemen van belang voor de anorganische vaste stof chemicus. De gebruikte techniek is de "restricted Hartree (RHF) methode afkomstig van Roothaan.

Bij deze methode worden de moleculaire orbitals beschreven met een lineaire combinatie van basisfuncties die geplaatst zijn op de atomen waaruit het moleculaire systeem is opgebouwd. Als basisfuncties hebben we gecontraheerde Gauss-type orbitals gebruikt.

In hoofdstuk I wordt een korte inleiding gegeven over de fundamentele theoretische schema's welke tegenwoordig voorhanden zijn om berekeningen van grote omvang uit te voeren aan overgangsmetaalverbindingen.

In hoofdstuk II is de chemische binding in de tetrachloro complexen CuCl_4^{2-} , NiCl_4^{2-} en CuCl_4^{2-} onderzocht met het doel inzicht te krijgen in de covalente wisselwerking tussen een overgangsmetaalion en een "zwaar" ligand zoals het chloride ion.

De verkregen ladingsverdelingen zijn geanalyseerd m.b.v. Mulliken populatieanalyses. In hoofdstuk III geven we resultaten van berekeningen van de ligandveld splitsing $10 Dq$ in de tetraëder complexen NiCl_4^{2-} en CuCl_4^{2-} . De grootte $10 Dq$ is verkregen als het verschil van RHF energieverwachtingswaarden van een begin en eindtoestand behorende bij een bepaalde optische d-d overgang. Een gedetailleerde analyse is uitgevoerd aan CuCl_4^{2-} . De resultaten zijn vergeleken met NiF_6^{4-} . Het blijkt dat Born repulsie effecten in NiCl_4^{2-} en CuCl_4^{2-} nog steeds belangrijk zijn doch minder geprononceerd dan in het meer ionogene NiF_6^{4-} kluster. Evenals voor het NiF_6^{4-} kluster, vinden we geen aanzienlijke reductie van de Racah parameter van NiCl_4^{2-} op grond van de RHF resultaten.

TH