

Chimie quantique

Chapitre 4 : Orbitales moléculaires et structures des complexes

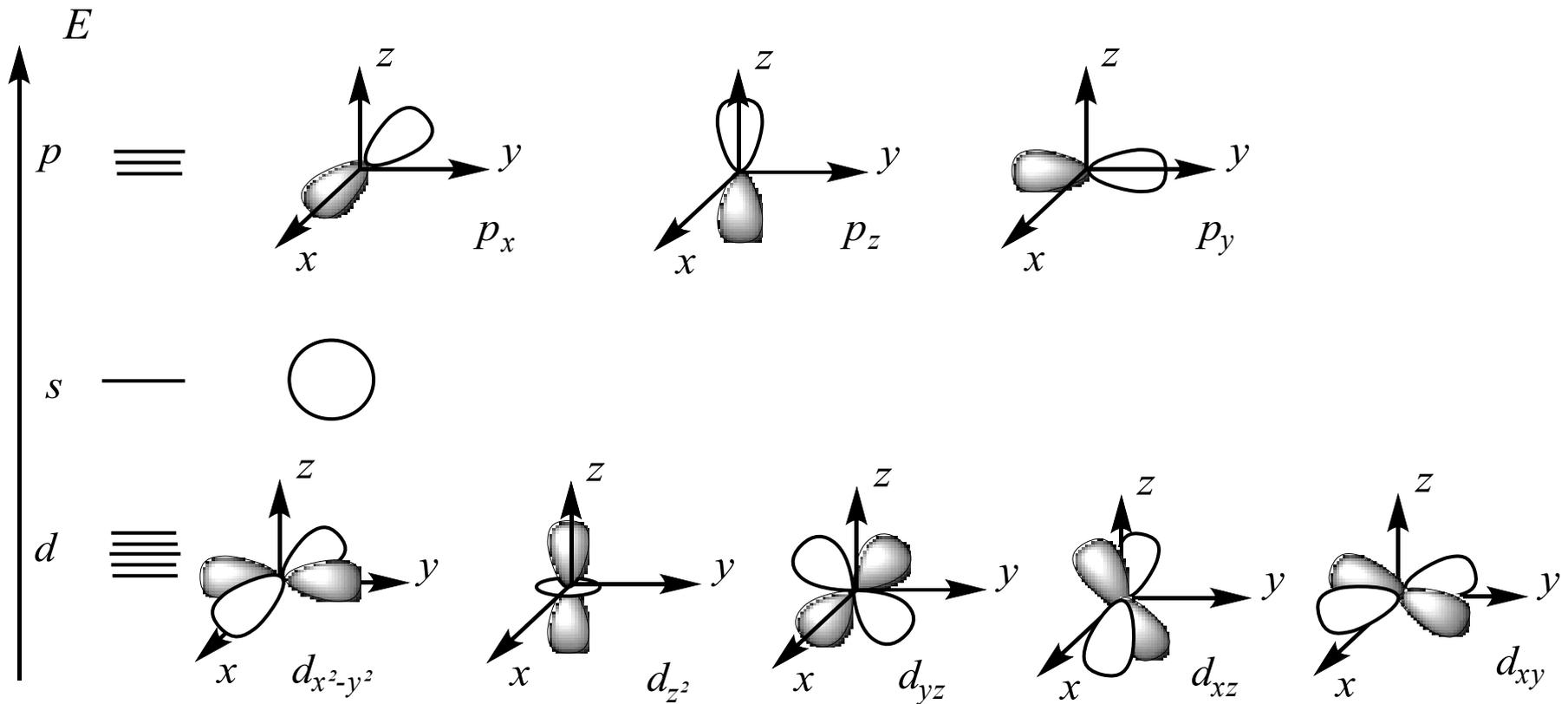
I) Etude du cation métallique d'un complexe

1) Complexe

Complexe : Edifice polyatomique constitué d'un cation central auquel sont liés des anions ou molécules appelés ligands.

Notation : il est noté entre crochets et on indique sa charge totale.

2) Orbitales atomiques de valence du métal



II) Les ligands

1) Ligands σ -donneurs

Les ligands σ -donneurs interagissent par un **recouvrement axial**, le long de la liaison Métal-ligand.

Quelles OA du métal peuvent interagir ?

Exemples :

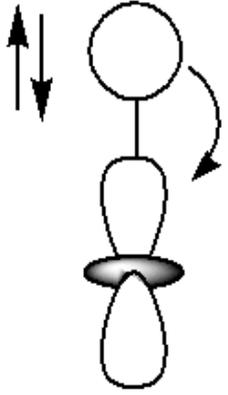
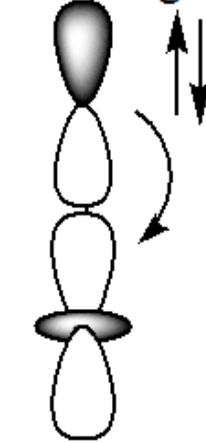
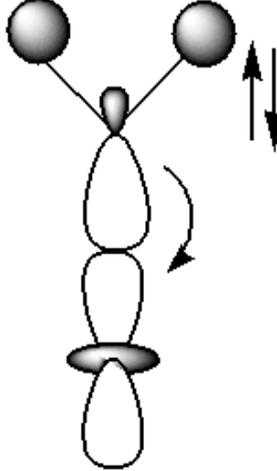
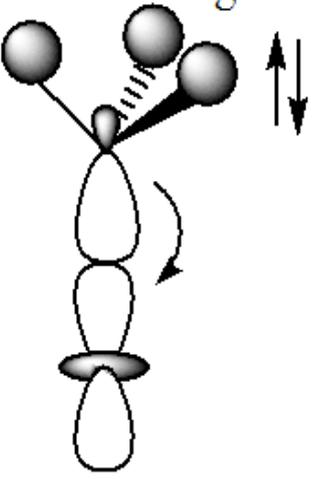
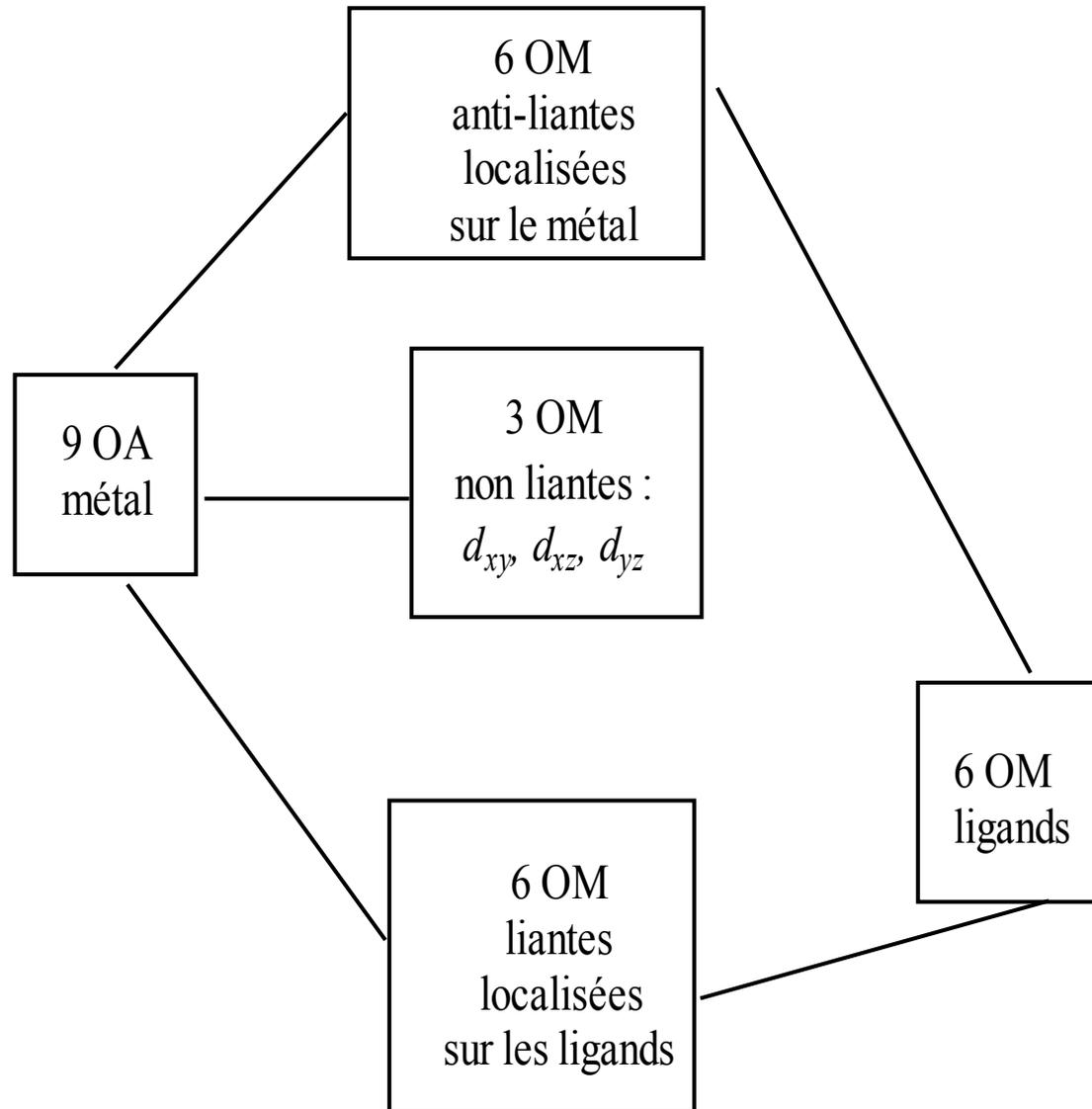
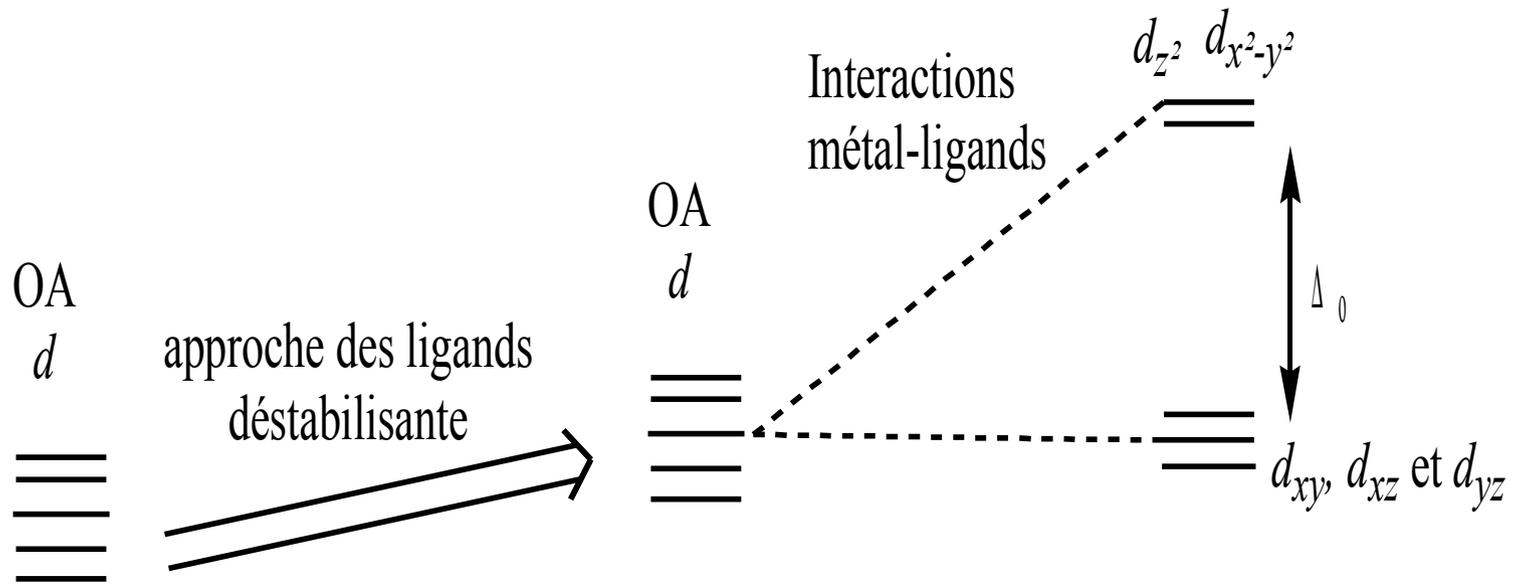
ligand	Hydruure H^-	Halogénure X^-	Type AH_2 : H_2O , CH_2 , NR_2 , PR_2	Type AH_3 : PR_3 , NR_3 , CH_3
Recouvrement liant axial avec d_{z^2}	<p>OA s ligand</p> 	<p>OA p ligand</p> 	<p>OM liante ligand</p> 	<p>OM liante ligand</p> 

Diagramme d'OM :



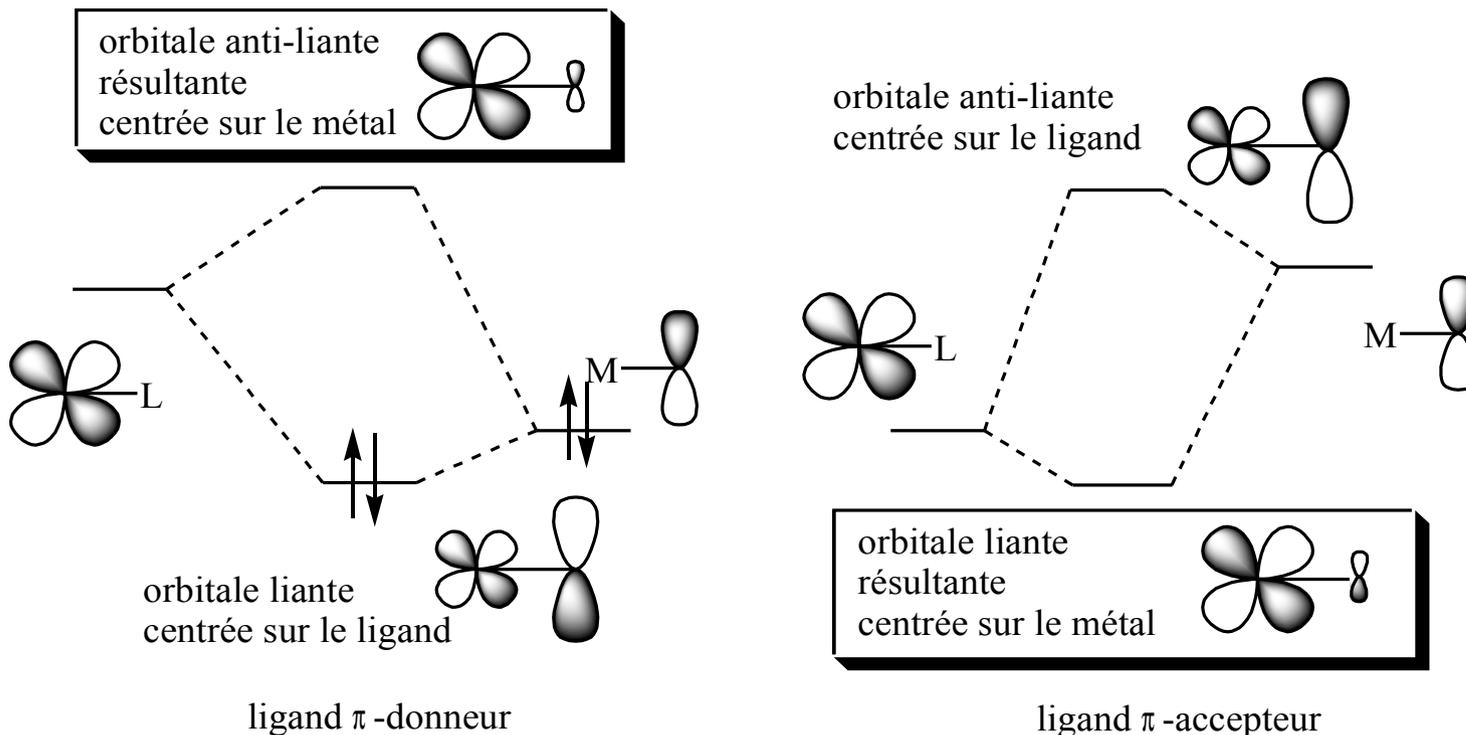
2) Le champ cristallin octaédrique Δ_o



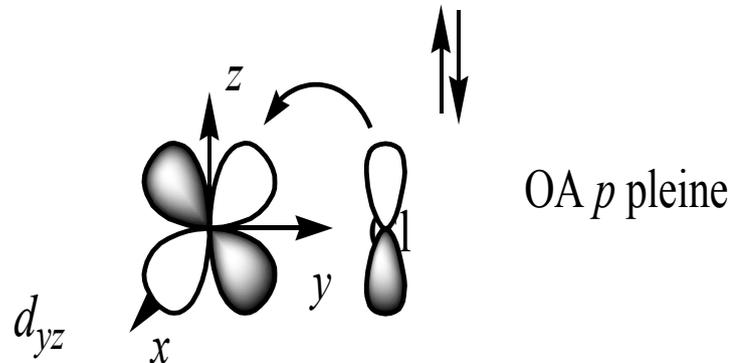
3) Ligands π

Les ligands interagissent avec les OM d_{xy} , d_{yz} et d_{xz} du métal par un **recouvrement latéral**.

On distingue deux effets **donneur** et **accepteur**.



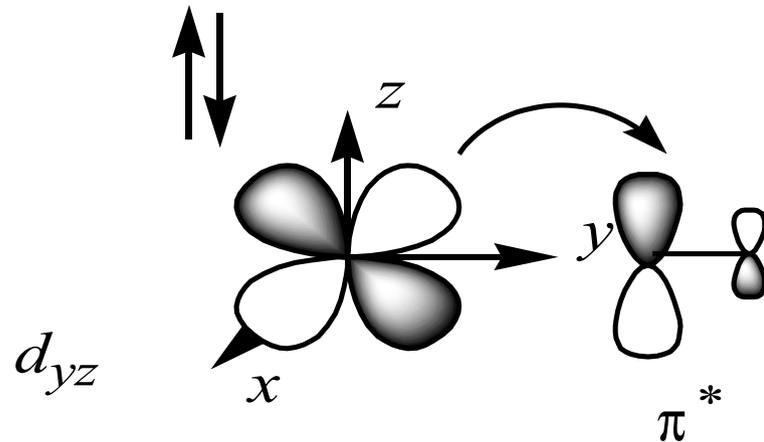
Ligands π -donneurs



Il y a déstabilisation des orbitales d_{xy} , d_{yz} et d_{xz} du métal. Δ_0 , **le champ cristallin diminue**.

Exemples de ligands : halogénures, amido, carbonyle, alcène.

Ligands π -accepteurs



Il y a stabilisation des orbitales d_{xy} , d_{yz} et d_{xz} du métal. Δ_0 , **le champ cristallin augmente.**

Exemples de ligands : alcène.