

I/ Approximations fondamentales.

→ Born-Oppenheimer (BO): noyaux = fixes p/n aux e^-
 permet de découpler la fct° d'onde en une partie nucléaire

partie élong (où noyaux = paramètres)

→ approximation orbitales (ou mono-états)

Fonctions d'ondes \sim det de Slater de fct° d'ondes mono-états

$$\hat{H}_{el} = \sum_i \hat{h}(i) \text{ et alors } \Psi = \prod \phi_i ; E_{el} = \sum_i \epsilon_i$$

ne satisfait pas le principe
 d'indiscernabilité des e^-

$\Leftrightarrow \Psi$ sous la forme det de Slater

→ LCAO

$$\psi_i = \sum_j c_{ij} \chi_j. \quad (1.1)$$

↳ inconnues

II/ Int. à 2 orb. identiq.

a) symétriques et dérivés (première approche)

2.1) devient pour $H \dots H$ $\phi = c_1 \chi_1 + c_2 \chi_2$. ($\langle \chi_i | \chi_i \rangle = 1$)

$\langle \phi | \phi \rangle = c_1^2 + c_2^2 + 2c_1 c_2 S_{12}$ on pose $S_{12} = \langle \chi_1 | \chi_2 \rangle$: intégral
 de recouvrement.

ou $\langle \phi | \phi \rangle = 1$ et pour sym. $c_1^2 = c_2^2$

donc deux solutions ($c_2 = \pm c_1$)

$$\begin{cases} \phi_+ = N_+ (\chi_1 + \chi_2) \\ \phi_- = N_- (\chi_1 - \chi_2) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} N_+ = \frac{1}{\sqrt{2(1+S)}} \\ N_- = \frac{1}{\sqrt{2(1-S)}} \end{cases} \rightarrow \text{coeff. } \Theta \text{ liés au } \phi_-$$

et avec $h_{11} = h_{22}$, $h_{12} = h_{21}$

$$E_+ = \frac{\langle \phi_+ | h | \phi_+ \rangle}{\langle \phi_+ | \phi_+ \rangle} = \frac{h_{11} + h_{12}}{1+S} \quad E_- = \frac{\langle \phi_- | h | \phi_- \rangle}{\langle \phi_- | \phi_- \rangle} = \frac{h_{11} - h_{12}}{1-S}$$

B) Det scalaire (2ème approche):

on d'p $\langle \phi | h | \phi \rangle = E \langle \phi | \phi \rangle \Rightarrow c_1^2 h_{11} + c_2^2 h_{22} + 2c_1 c_2 h_{12} = E (c_1^2 + c_2^2 + 2c_1 c_2 S)$

$E \in \mathbb{R}$ c_1 et c_2 d'on cherche à optimiser (principe variationnel) : $\frac{\partial E}{\partial c_i} = 0$ (pour c_1 et c_2)

$2c_1 + 2i m c \Rightarrow E_{+/-}$

c) P/projection et Det séculaire.

$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ revient à $|\hat{H} - ES| = 0$

on LCAO $\hat{h} \sum_j c_{ij} \chi_j = E_i \sum_j c_{ij} \chi_j$ projeté sur chaque $\chi_k \rightarrow \sum_j c_{ij} \langle \chi_k | \hat{h} | \chi_j \rangle = E_i \sum_j c_{ij} \langle \chi_k | \chi_j \rangle$.

$\sum_j c_{ij} h_{kj} = E_i \sum_j c_{ij} S_{kj}$

$|h_{kj} - ES_{kj}| = 0$. méq. liés, on en onlère une

et $\sum_{j,T} c_{ij}^* c_{i,T} S_{j,T} = 1$. ($h_{ij} = \alpha_j$, $h_{jk} = h_{kj} = \beta_{jk}$)

int coulombienne int de résonance

Wolfsberg-Helmholz: $h_{ij} = K S_{ij} \cdot \frac{h_{ii} h_{jj}}{2}$ dans sens φ
 $\alpha = n_{ij}$ de l'orbitale

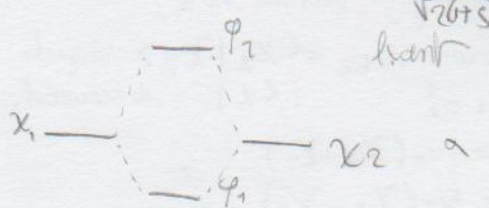
D) int à 2 orbitales:

$\begin{vmatrix} \alpha_1 - E & \beta_{12} - ES_{12} \\ \beta_{12} - ES_{12} & \alpha_2 - E \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \alpha_1 - E & \beta - ES \\ \beta - ES & \alpha_2 - E \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \alpha - E & \beta - ES \\ \beta - ES & \alpha - E \end{vmatrix} = 0$

dont les sol sont

$E_+ = \frac{\alpha + \beta}{1 + S}$, $E_- = \frac{\alpha - \beta}{1 - S}$

$\varphi_+ = \frac{1}{\sqrt{2(1+S)}} (\chi_1 + \chi_2)$ $\varphi_- = \frac{1}{\sqrt{2(1-S)}} (\chi_1 - \chi_2)$
 liant anti-liant



on introduit malheureusement

$\Delta E^+ = E(\varphi^+) - \alpha = \frac{\beta - \alpha S}{1 + S}$

$\Delta E^- = E(\varphi^-) - \alpha = \frac{-\beta + \alpha S}{1 - S}$

III / Dimères de l'hydrogène et de l'He: om.

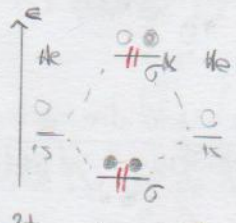
- \exists plus cas d'intérêt entre 2 OA, 2 orb d'o mis en jeu (pour 2 centres):
- $2c - 2e^-$; chaque atome mis $\pm e^-$ (ex H_2) et on place les OIT $\varphi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2(1 \pm S)}} (\psi_{1\pm} \pm \psi_{2\pm})$
- $2c - 1e^-$; ex H_2^+ ou He_2^+ ; \exists encore stabilisation, mais \oplus faible \rightarrow dat grande
- $2c - 2e^-$; comme $\Delta E^- > \Delta E^+$, intérêt φ_{\pm} déformable
- $2c - 3e^-$; comparer $2\Delta E^+$ et ΔE^- : intérêt, si S grand ($> 0,93$), déformable

$H_2 // He_2^+$? $\Gamma = \frac{1}{2} \Gamma \rightarrow I = 1$

Propriétés	H_2^+	H_2
E (kcal/mol)	269,4	424,5
Longueur (Å)	1,06	0,74

ordre de liaison
 $I = \frac{1}{2} (m - m^*)$
 $I(\text{cal/cm}) = 1$

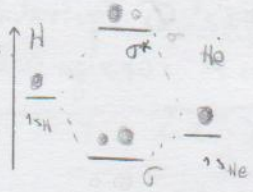
$H_2 ?$



He_2 instable & durée spectre

Mais $\exists He_2^+$ at He_2^+
 $I = 1$ at $I = 1/2$

HeH^+ , $OH \neq$



poils He^+ important \leftarrow on la plus grande en m.j.
 ("héritage")
 On préfère \sim atome X^+ grand
 On aime \sim atome X^- grand.

HeH^+ est donc polarisé, répulsif non sym. pour la densité ρ
 \exists molécule permanent.

IV Distorsion ... au début de la 1^{ère} période. Avec n, l, m, s

Principes de construction
 • Si ΔE orbitales devient grand, ϕ int. • Si recouvrement $S=0$, ϕ int.
 pour le recouvrement: - visuellement - symétries (p/n et nombre de sym. de la molécule)

Diagrammes non canoniques (pour le cas $A=B$, donc A_2).

déf $L \rightarrow$ qd l'écart $\Delta E_{p/s}$ est grand et qu'on peut négliger les recouvrement s/p.
 \rightarrow plusieurs int (4) à 20 Å

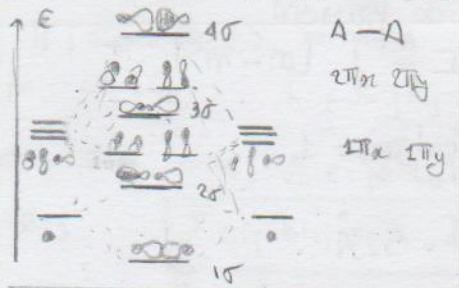
Recouvrement selon axe $A-A = \sigma$ } en g^{le} $S > \Pi$
 latéral et \exists pour moléculaires = π

importance des OE: (AO, BV) gouverne la réactivité. ($\eta^2, e^- \rho$)
 Approx des OE

Diagrammes canoniques (pour A_2)

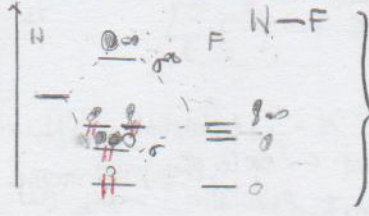
$\Delta E_{p/s}$ petit, interaction ont cas de D_{2h} int à 40 Å!

combinatoire des orbitales hybridées = Comb. lin. des set p $sp + s = sp$
 les ON de set de N orbitales \rightarrow construire DOT:



position $3s$ et $3p$ à déterminer?
 \rightarrow corbe jusqu'à N en zone périodes

Diagramme Orb: des A-B : dom. max. maj. initiales \neq et poids \neq



correspondance Lewis:
 3 dom. max. \neq équivalents!
 \oplus polarisé vers F = charge partielle < 0 .

Résultats ANm étendus à AX_m si X intègre p/ une seule OA (paup)
I / Retour sur l'hybridation.

si ΔE_{s,p} petit \rightsquigarrow il peut exister int à 4 Orb. \Rightarrow construire des orbitales hybr. des = comb lin s et p : $\overset{s}{\circ} + \overset{p}{\circ} = \overset{sp}{\circ}$

sp \neq seul Hamiltonien atomiq, mais possède une direct° p.r. l'hybr
 \rightarrow construct° OA hybrides de A central: sp / sp² ou sp³

sp:	$s + p = \infty + \circ = 2 \times$		\rightsquigarrow acétylène, rest 2p $\rightarrow 2\pi$
sp ² :	$s + 2p =$		\rightsquigarrow éthène, rest 1p $\rightarrow \pi$
sp ³ :	$s + 3p =$		\rightsquigarrow méthane, \emptyset

II / Diagramme de corrélation.

Recourcement s continu le long de déformation structurale \rightarrow C²OT
 \rightarrow Énergies pour relire les OT de géom \neq et tracer les relations = Walsh

A) Retour sur la géométrie H₃.

H₃ lin \rightarrow H₃ tri Van Ameyse.

B) Règles pour les diagrammes de Walsh.

Conservation symétrie des OTs : si au cours d'une déformation géométrique, des éléments de symétrie sont conservés : on ne trace des lignes de corrélation qu'entre des OTs présentant la même symétrie.

Non croisement d'OTs de m^e symétrie : si on relie deux OTs de même symétrie, on admet qu'elles échangent leur propriétés le long de la coordonnée de déformation. On ne pourra pas les croiser.

\rightsquigarrow Règle de Walsh / de la HO : molécule adopte géométrie qui stabilise sa HO ou HO₋₁

C) Application à NH_2 / D) à AH_4 .

E) Moléculo d'atome : séparation σ / π

OM σ : ~~A~~ plan nodal passant p/ atomes liés
et σ Sym p/ ces plans

OM π : Ξ —————
et π ASym p/ ces plans

\rightarrow plus extrême
= réact° X.

$$S_{\pi} < S_{\sigma}$$

$$\oplus S_{\pi/\sigma} = 0$$

études séparées de
 $\{\sigma\}$ et $\{\pi\}$

III / Etude de conformations.

A) Elhore

B) Ponts disulfure.

Hückel petit-mont pour π -conjugués

I / Hückel

A) Hypothèses

(ES) statommatrice \oplus Approx. Born-Oppenheimer (protons fixes).
 champ moyen.

ce qui donne $H = \sum h_i$, $\phi = \sum \phi_i$ et $E = \sum \epsilon_i$

puis pour ϕ_i : LCAO $\leadsto \phi_i = \sum C_{ij} \chi_j$

puis dans Schrödinger \rightarrow système d'équations séculaires (SEs)

(\hookrightarrow syst eq pour \uparrow en n
 coeff LCAO (pour $n = \frac{\alpha - \epsilon}{\beta}$)

le plus, cas où une seule OA interagissant, peu centre, comme syst π -conj
 (séparé $\sigma - \pi$)

mais on paramétrise h_{ij} : $h_{ii} = \alpha$: intégrals coulombienne \approx moy
 des OA χ_i avant interaction. (< 0)

$h_{ij} = 0$ ou β si $i \neq j$: intégrals d'échange / recouv.
 \hookrightarrow si $i \neq j$

encore plus, on fait l'hypothèse $S_{ij} = \delta_{ij}$ (normalisation de β) (< 0)

B) Ethylène

Bas ($2p_z C_1, 2p_z C_2$), $\phi = C_1 2p_z C_1 + C_2 2p_z C_2$ $H = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta & \alpha \end{pmatrix}$

(ES) $\rightarrow \begin{cases} C_1(\alpha - \epsilon) + C_2\beta = 0 \\ C_1\beta + C_2(\alpha - \epsilon) = 0 \end{cases} \rightarrow \begin{vmatrix} \alpha - \epsilon & \beta \\ \beta & \alpha - \epsilon \end{vmatrix} = 0$ en $\epsilon = \frac{\alpha - \epsilon}{\beta}$

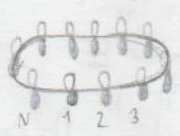
$\leadsto \epsilon = \alpha \pm \beta$ donc $\frac{\alpha - \beta}{\alpha + \beta}$

C) Butadiène : det séculaire $4 \times 4 \oplus$ argument de symétrie

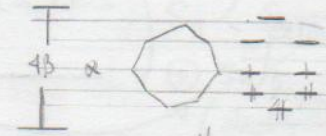
D) Benzène E) Cyclohexatriène

II / Généralisation: polyènes, annulène de Hückel / Möbius

Annulène de Hückel



$$\begin{vmatrix} \alpha - E & \beta & & & & \\ \beta & \alpha - E & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & \alpha - E & & \\ & & & & \alpha - E & \beta \\ \beta & & & & \beta & \alpha - E \end{vmatrix}$$

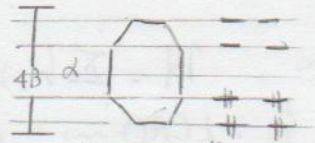


plan, open shell

Annulère de Möbius



$$\begin{vmatrix} \alpha - E & \beta & & & & & \beta \\ \beta & \alpha - E & & & & & \\ & & \ddots & & & & \\ & & & \alpha - E & & & \\ & & & & \alpha - E & & \\ & & & & & \alpha - E & \beta \\ \beta & & & & & \beta & \alpha - E \end{vmatrix}$$



closed shell.

$$E_j = \alpha + 2\beta \cos\left(\frac{2j\pi}{N}\right)$$

$$E_j = \alpha + 2\beta \cos\left(\frac{2j\pi(j+1)}{N}\right)$$

A) Aromaticité et règle (4m+2)e-

→ E(π) au passage polyène linéaire à cyc. q.

Règle de Hückel: Les annulènes sont aromatiques lorsque le nombre de leurs électrons π est de la forme 4m+2 (antiarom; 4m).

S'applique cyclo et polycycles tant que Z C liant 3 cycles.

B) Cas des hétéroalcoènes: paramétrage de Hückel

prise en compte des hétéroalcoènes: n Carbone modifié (α et β ≠)

une fois l'ON p intervenant comme: décompte des e-

atomes de C=C, C=O, C=N apportent chacun 1 e-

atomes non engagés en double liaison ont 2 e- si E doublet

= 0 e- si E lacune.

Polyènes linéaire à m carbones:

formule de Coulson

m_{nj} de la j^{ème} orbital

$$E_j = \alpha + 2\beta \cos\left(\frac{j\pi}{m+1}\right)$$

I/Intro : expression de l'imp d'interaction pour une approche A...B.

Appui de la théorie des OF en la réactivité sur composant int. orbitales.

Approche A + B \sim termes mixtes Σ interact° particules (noyaux et e⁻)

Calculs mix en peut séparer int. totale en ①) terme coulombien = int. de charge
 ②) terme d'échange = int. orbitaire.

① int électrostatig $\Sigma \neq X$: $\Delta E_c = \sum_{i,j} \frac{q_{A_i} q_{B_j}}{r_{ij}}$

approximation en contrôle de charge = $\exists ! q_{A_i} q_{B_j}$ = charges dominantes en plus (obtenues avec Hückel (Trom) ou modélisation de Mulliken).

② int 2e2 orbitales de A et de B

- ↳ répulsive si : 4 e⁻ (2 orbitales occupées)
- attractive si : 2 e⁻ (1 occ 1 vac ou 2 occ radicalaire)

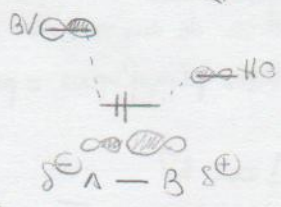
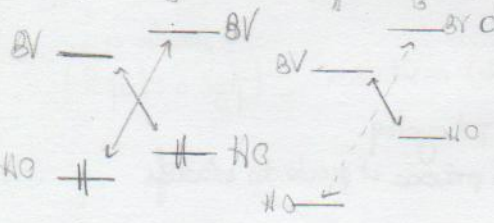
→ de compte rigoureux des int ... → approx des OF frontières.

int attract : $\Delta E_a = -k \frac{S_{ij}^2}{|E_i - E_j|}$ et prise en compte des int proches en énergie et de fait recouvrement S (souvent 2 vols 1 NO-BV)

int répulsive : $\Delta E_r = -k' S_{ij}^2$

dont terme principal provient de HO-HO.

Globalement : 4 OF $HO_A, NO_B, BV_A, BV_B \sim$ 3 interactions. En fait des dissym, on peut se ramener à 1! interaction. (cas des couples A/B et des transferts de charge)



Expression mix totale : Eq de Klopman-Salem.

$$\Delta E = - \sum_{a,b} (q_{aA} + q_{bB}) P_{ab} S_{ab} + \sum_{k \neq l} \frac{P_k P_l}{E_k - E_l} + \left(\sum_a \sum_b - \sum_s \sum_x \right) \left(\frac{2 \sum_{a,b} c_{aA} c_{bB} P_{ab}}{E_a - E_b} \right)^2$$

peu ou pas de population e⁻ sur A et B
 charges partielles
 primitive elec
 coeff de OA χ_A dans OM a

ou 1^{er} terme : int. orbitales entre des OM occupées | 3^{me} terme : int. stabilisantes à 2e^e
 2^{me} terme : répulsion nucléaire | ↳ terme de renforcement.

peu les réact. en conjuguées, on propose

$$\Delta E = - \frac{Q_A Q_B}{\epsilon R} + 2 \frac{(C_A C_B B)}{E_{HOA} - E_{HOB}}$$

ou $A = \phi$ et $B = \psi$ Q_i charge totale
 $C_A C_B$ plus grands coeff.
 ↳ A solvant ($\epsilon_A \epsilon_B \dots$)

II / Ct arb. (KS) Ct de charge.

EKS vs compétition entre terme de charge / prédomine si \exists réact. faibles charges.
 terme de stabilisat. arbitraire

Réactifs de X chargé souvent sous Ct arbitraire.

Rmq: solvant intervient sous la forme $\frac{1}{\epsilon_A}$.

III / Règles de réactivité sous Ct arbitraire.

- Si: les 2 recouvrements HO-BV sont nuls, la réaction ne se produit pas.
- Si: _____ sont non nuls, l'int. prédominante est celle qui correspond à la plus petite \neq d'ord. HO-BV.
- Si: \exists plus géométrique d'approche pour cette interaction, l'approche privilégiée est celle qui présente le plus grand recouvrement.

Dureté - Mollesse (HSAB). (Pearson, 1981)

EKS vs plus orbitales sont grandes, plus terme arbitraire prédomine = espèces molles
 qd le terme d'int. électrostat. prédomine, on a plus réaction = espèces dures
 Rmq: orbitales contractées \rightarrow molles et 1/a.

IV / Exemples

A) les Cycloadditions (méta cyclo Σ)

↳ = cyclisation de deux molécules (ou parties de) insaturées (à prendre à page 6 chap 5)

cyclo Σ \in réactions péricycliques = passage par ET \neq cycliq.
 ↳ présence et ordre des réactifs

activées p/ Δ ou h ν .

Diels Alder : 4+2e⁻ π impliqués $-3\pi \rightarrow \pi + 2\sigma$.

↳ un croisement entre HO et BV dans le diag de Walsh \Rightarrow barrière mythiq et donc peu de réactions.

Règle de Woodward-Hoffman: [4q]cyclo Σ est autorisée par voie thermiq quand $4q = 4m + 2$.

B) Effets des substituents :

Soit substituant X, qui joue sur les OTs (\exists OFs) \rightsquigarrow Système di-substitué et OP's polarisé \Rightarrow Régiosélectivité.

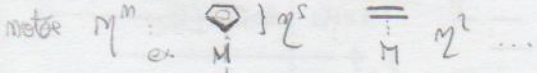
\exists $\left\{ \begin{array}{l} \text{effets } \sigma \sim \text{inductifs} \quad \Leftarrow \neq X, \text{ polarisation C-X, perturbation OTs} \\ \text{effets } \pi \sim \text{mésonères} \quad \Leftarrow \text{recouvrement } \pi \text{ fait entre OM de X et des Carbones} \end{array} \right.$


I/ Vocab.

C = Acteur + Blewis.

Chélation = nb de liaisons entre le métal et le ligand.

Haptocité = d'un ligand caractérise le nb d'atomes du ligand qui fournissent une liaison



géométries :  6L \rightsquigarrow octaédrique 4L \rightsquigarrow plan carré U tétraédrique

II/ Octaédrique : Fragments T_2 et L_6

A) Ligands σ -donneur

Liaison p/ orbitales type n (doublet non liant) = liaison bicentrique

\rightsquigarrow Ligand σ -donneur, puis effet π (donneur ou accepteur)

\rightarrow soit π rempli haut en énergie ou soit π^* vacant bas en énergie

c'est elle qui interagit dans la liaison avec le métal (proximité $M\sigma_j \oplus$ bien recouvert, entre elle et les d $\in T_2$).

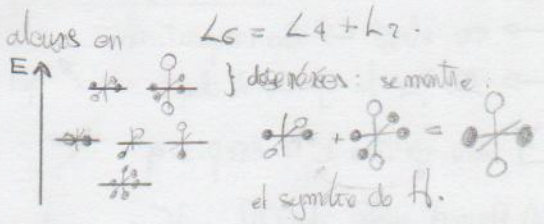
" σ " \leftrightarrow symétrie p/s à l'axe de la liaison M-L

B) Orbitales du fragment L_6

schematiser $M\sigma = s$ et on fragmente alors en $L_6 = L_4 + L_2$.

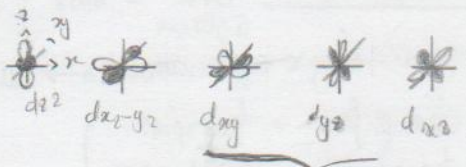
où $L_4 \sim 4s$ plan carré

\rightsquigarrow



C) Orbitales du métal de transition

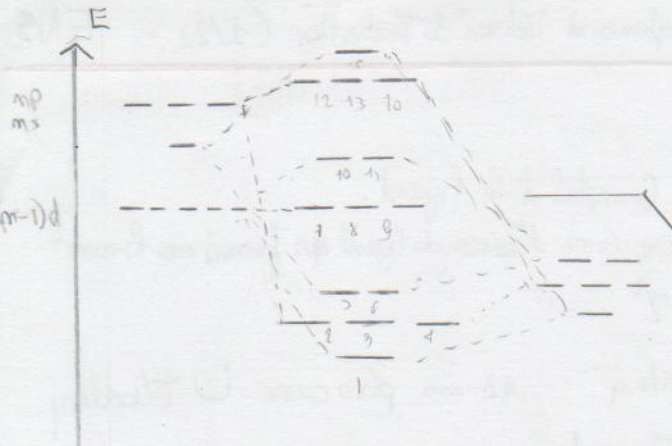
Donc $(n-1)d$, np et ns



D) Analyse des recouvrements.

6 couples de 2 orbitales. ($(n-2)$ d_{xy} et 2 autres ont recouvert nul avec L_6).

E) Trace du OMF

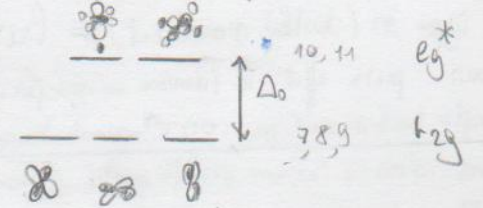


OA = 78019 inconnus
 stabilité stochom. 95
 aucune orbitales al peuplées
 force M-L < force cov.
 10e des 18e

F) Orbitales frontières

→ OF ∈ [7, 11]
 champ des p. gang
 ⇒ levée partielle de
 degré des OA d de M.

OM [1, 6] occupées par les 2x6e des L



S) Influence paramétrique sur champ cristallin.

$\Delta_0 \in M$ et L : champ fort, Δ_0 élevé - champ faible, Δ_0 faible.
 → no élevé ↔ Δ_0 important
 → Δ_0 ↘ de gauche à droite et ↗ qd on descend, e_g^* tendues ⊕ al.

∃ série spectro X = emp. n. g

N) Remplissage des OI

$\sqrt{2}e^- = mbe - mo = m \rightarrow e$ on $3d^M$
 à placer
 puis comparais énergie apparaissant ↔ Δ_0 paramètre de champ.
 (ex: champ fort = bas spin
 champ faible = haut spin)

I) Ligands π donneurs - π accepteurs.

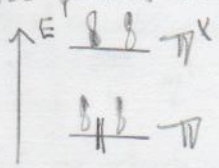
Ligands peuvent intervenir p / plus orbitales (S mon nul entre π x/y et d yz dxy)
 effet π donneur (accepteur) s: π occupée (vacante)
 pour les π donneurs

suivie à côté, les nouvelles orbitales sont les t_{2g}^* → π donne Δ_0
 pour les π accepteurs: t_{2g} π accepteur → Δ_0 (retrodonné $M \rightarrow L$)

III. Coordination d'un syst π sur un métal

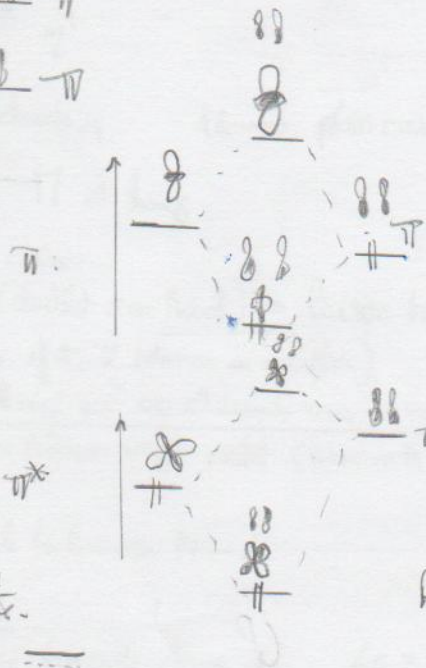
Faire une liaison avec plusieurs atomes.

A) CF ethyène



B) Effet don et rédon

Interact° avec d_{z^2}



faible contributeur de π , dvp sur adicéne
 Donation $L \rightarrow M$
 dvpée sur M
 faible contributeur de L
 Retrodon $M \rightarrow L$

→ combiné, $\approx \sim$

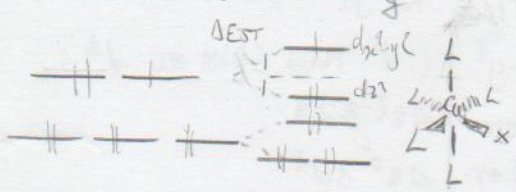
1/2 → Don MLG pour L et d et $1d/a$
 2/2 → plus faible coordim^o (MLG $\rightarrow \in \in [35]$).

I / Pyrambale : Effet Jahn-Teller. MLG.

Liaisons L-M intermédiaire \in [faible, coval] \Rightarrow mallab. l^{te} seu les états d^{spim}
 (magnétisme & conduction...)

\exists Jahn-Teller dans les MLG métamond Cu(II) en d^9 ($Cu(H_2O)_6$)

\hookrightarrow évolution des niveaux eg



$\left\{ \begin{array}{l} CO_a \approx 235 \text{ pm} \\ CO_{eq} \approx 195 \text{ pm} \end{array} \right.$

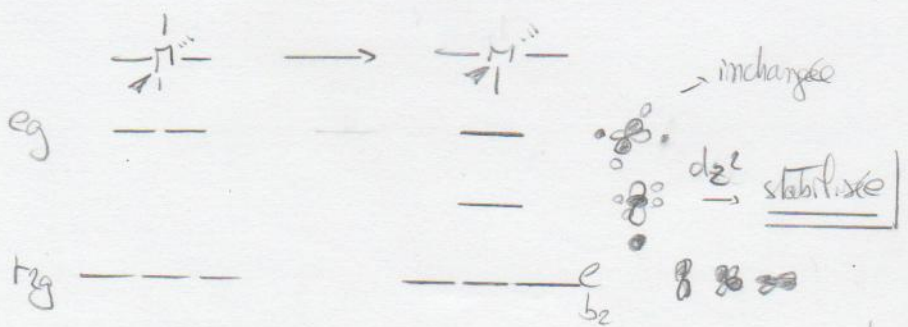
Levée partielle de dégénérescence.

Effet JT \oplus important si CMs simple $p / Me^- = 2m + 1$.

II / MLs : première discussion selon l'axe z.

A) Pyramide base carrée MLG \rightarrow MLs $p / \text{éloignement d'un } L$

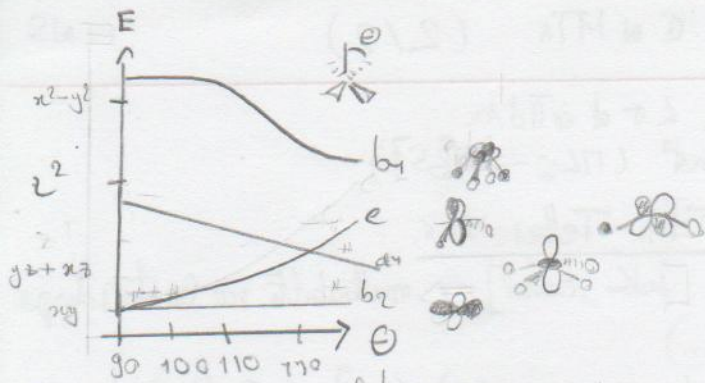
(a) $p / \text{éloignement d'une CM} \in$ bloc eg.



stabilisé $dz^2 \rightarrow$ hybridé avec OAM / 4s et 4p. (apte à former des liaisons)

B) Un diagramme de Walsh pour MLs.

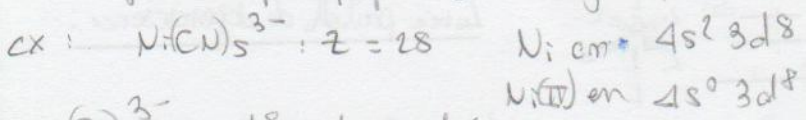
Dans ce modèle, modifié, $\angle eg$ ML axe m est pas pr. se on comp. Par contre, MLs tend à partir "triplet" pour ∞ en $d^2 / \infty \geq 6$.



deux restes identiques
 deux et deux distantes.
 e_g stabilisées

D'après la règle de Walsh, on en déduit :

- C de moins de $6e^-$: géom $L_4M_{16}e_9 \sim 90^\circ$
- angle s'ouvre quand peu de $d_z^2 / d_{x^2-y^2}$ (d^6 Haut spin ou d^8)



$Ni(CN)_5^{3-}$ en d^8 donc plié.

C) Construction directe pour T_{2g} b_{1g}

$M_Ls = M + L_z + L_z$ puis int avec les GOR de M.