

⚠️ Dépend de la méthode de calcul !

DFT : pas de bases orbitales (Mais 3 outils pour s'en approcher).

PT : Hartree Fock et post Hartree Fock...

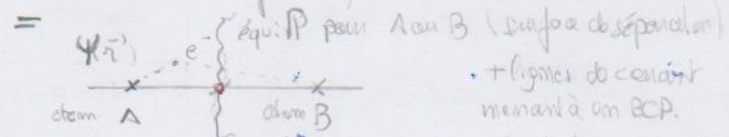
Comment savoir si H_f est dissocié ? (Quantifier la rélectromagnétisme).

Théorie et modélisation de ν et nombre (spectro IR...) $\nu \approx \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$

longueur de liaison
n° de liaisons

Atomes in Molécules λ densité e^- au pt critiq de liaison.

ELF (e^- localised function)



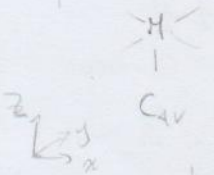
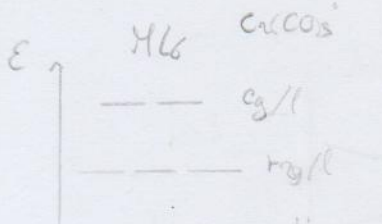
point critiq de liaison (BCP) (calculé à partir de la densité)

⇒ retrouver les liaisons en DFT (« dans la soupe d' e^- »)

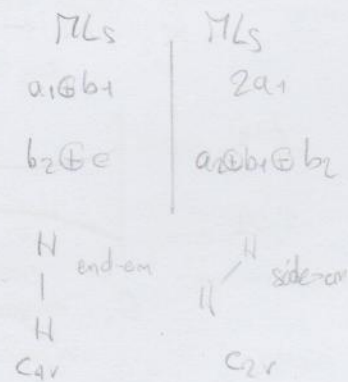
La densité de la densité au point critique : passe par 0, → info sur la rupture et donc "L" au "X".

outils

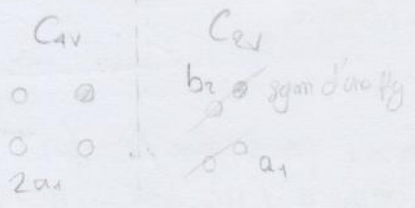
Side-on ou end-on ?

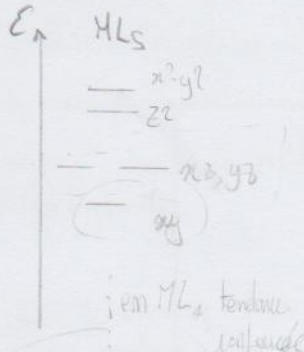


$C_{2v} \rightarrow C_{2v}$



équation de sym

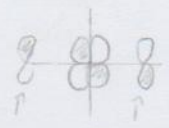




$S \propto 4 S_{\text{un}} \propto 1 \ll b_{1m}, b_{1m}, \text{bante } b_{2m} \gg$

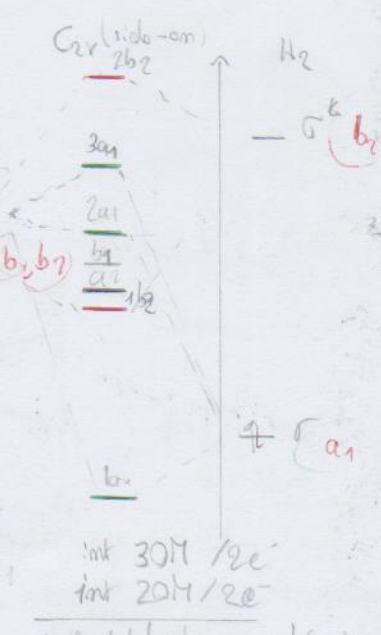
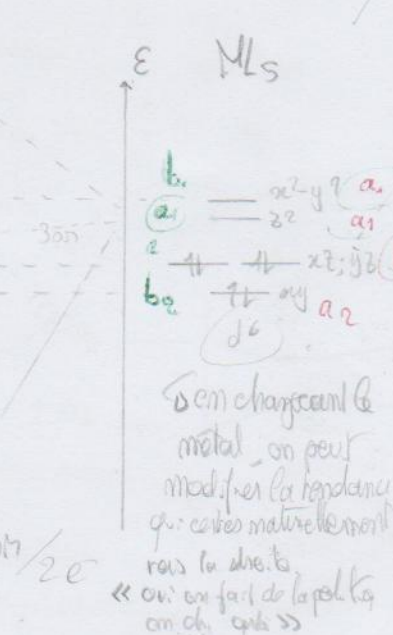
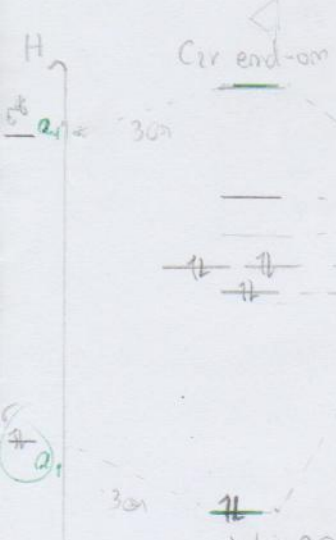
$\alpha d + \beta \left[\frac{1}{4} + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \frac{1}{4} \right]$

pas normaliser



$S_{xz, yz} \propto 2 S_{\text{dites}} \frac{1}{\sqrt{2}}$

ordre y et x et z



(Rmq: très important pour une publication: expliquer ses calculs pour une vision qui est interprétable!)

$\ll \text{Vous êtes en train de monter} \gg$

autres gros diagramme à scélérer



"Dih"

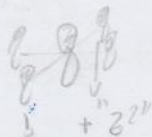
- α²γ?
- hybridation
- Z

C₂



xx yy

xy



~~A ANTIRAPER~~

M1S1 Ch: Obj 2.

Activations de petites
mesures affectives

②

ENS.

A RAPTTRAPER

à m lire

$$(44 - N) = (N - 17) 4$$

A RATTRAPER

(Diapo d'écoulement)

! .
→ Ne se 10 dans
chaque 210

Composé en géom. sidé-om.

Angle certaines orbitales indépendantes pour certaines : interaction non favorisant sidé-om

Or. orientation de l'amide joue sur la disponibilité des orbitales + ligand Ti donneur qui occupent les orbitales d du métal.

orientat
sidé-om

Finalement, le complexe en exemple $\sim N_2^{4-}$ (les 2 sites sont peuplés).

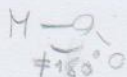
Choix du métal pour optimiser le côté sidé-om ?
mais aussi : le géom. et l'angle de torsion ont peut-être un effet.

« vous avez des ligands sur le métal ! »

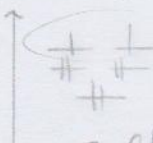
Changer de bloc : act. métal et ligands !
Orbitales f en général très contractées, avec peu d'extension spatiale et donc nécessairement.

→ Un peu un peu contrôlé.

O_2 pyridine, cc
→ oxygène n'est pas à 180° !



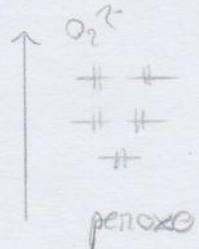
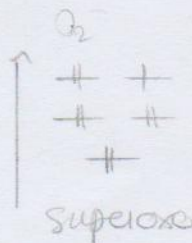
$O_2 \sim 500 \text{ kJ mol}^{-1}$



états magnétiques à prendre en compte.

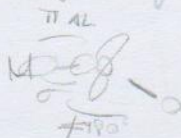
O_2 libre.

Deux stratégies → { soit en C magnétique
soit activer O_2 en O_2 singulet.



N_2 ⊕ difficile en terme de difficulté chimique (faible)
 O_2 ⊕ difficile en terme énergétique (⊕ de possibilité de coordination)

Problème de l'angle analogue à l'angle non ⊥ de angle de BO .



Etat de spin Allures du diagramme réaction très différentes

(Dernière slide)

↳ en font^o, schémas orbitales \neq

à HS, croisement mais qui n'est pas à ex. les cas orbitales de sym. \neq .

→ redistribution des e⁻. (transfert d'e⁻).

à BS, orbitales impliquées de même symétrie donc croisement interdit
→ barrière d'activation réduite par un mélange des orbitales (interact)