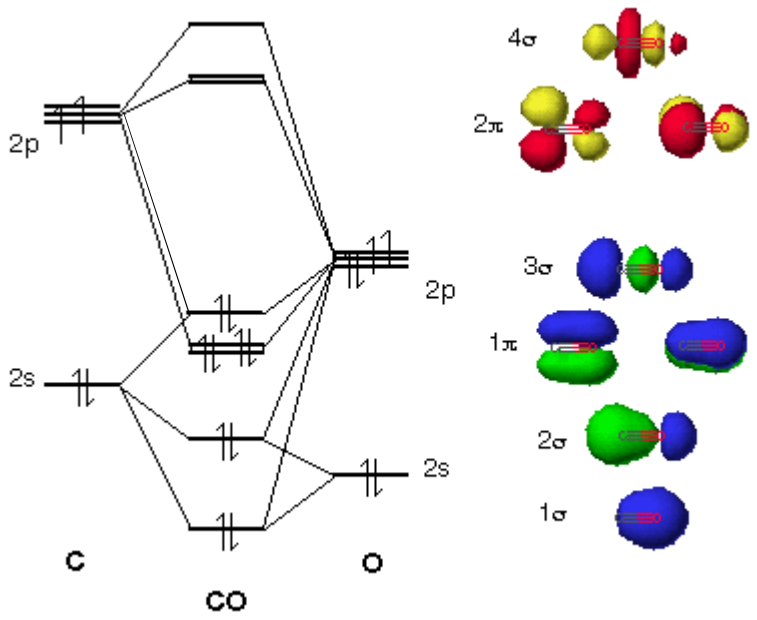
LECTURE ET EXPLOITATION D'UN DIAGRAMME FOURNI



La distribution des électrons :
Ajouter les électrons DE VALENCE PRESENTS dans la structure.
Les distribuer (mêmes règles que pour le remplissage des OA d'un atome,Hundt, Pauli, Klechkowski

La configuration électronique :
Calquer sur la configuration d'un atome : $1\sigma^2$ $2\sigma^2$ $1\pi^4$ $3\sigma^2$ ici

L'indice de liaison :

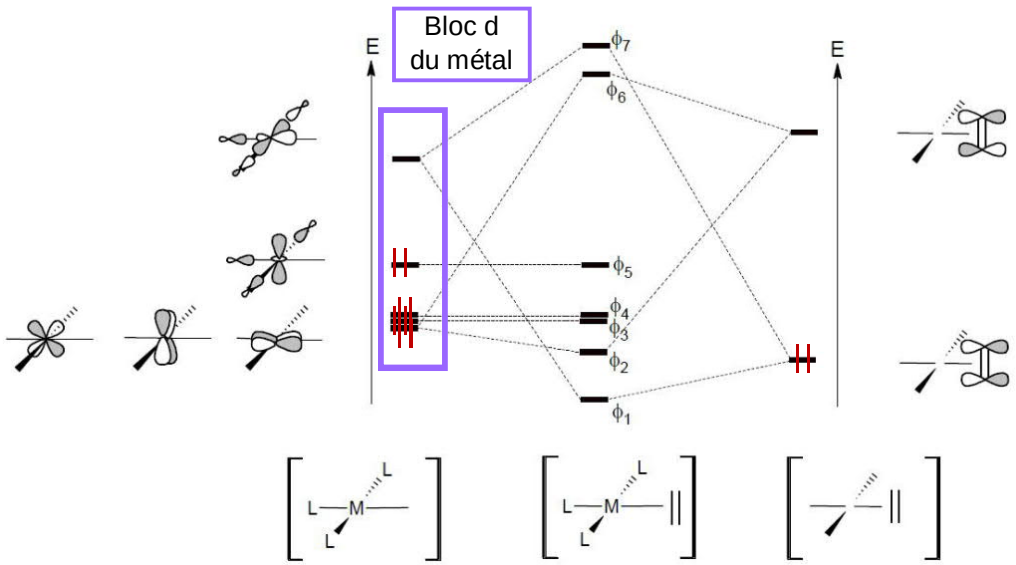
$$IL = \frac{nbe\ d'electrons\ dans\ les\ OM\ LIANTES - nbe\ d'electrons\ dans\ les\ OM\ anti-liantes}{2}$$

=> identifier les OM liantes NON liantes et antiliantes (voir fiche dédiée)
1σ , 1π liantes 2σ , 3σ non liantes 2π et 4σ antiliantes

$$\Rightarrow IL = \frac{6-0}{2} = 3$$

Identifier et positionner les « doublets non liants » (relation à Lewis)
Chercher les OM NON liantes ou antiliantes qui contiennent 2 électrons => autant de doublets libres que de telles OM, localisation sur l'atome au nuage externe le + marqué
Ici $3\sigma^2$ non liante, 1 doublet sur C $2\sigma^2$ non liante , un doublet sur O (totalement à l'extérieur)

Polarité des liaisons
Analyser les doublets LIANTS : $1\sigma^2$, $1\pi^4$ majoritairement localisées sur O => O δ^- et Cδ^+



Donation , rétro-donation
ϕ_1 = 0,90 (O pleine ligand) + 0,10 (O vide métal) (environ)

	Ligand	+ métal	→ (ligand /métal)
EI	2e-	0e-	-
EF			(2x0,9 e- / 2x0,1e-)

D'où la « donation du ligand vers le métal » (ligand σ donneur)

ϕ_2 = 0,95 (O pleine métal) + 0,05 (O vide ligand) (environ)

	Ligand	+ métal	→ (ligand / métal)
EI	0e-	2e-	-
EF			(2x0,05e- / 2x0,95 e-)

D'où la « rétro-donation du métal vers le ligand » (ligand π accepteur)

Réactivité du ligand avant / après complexation :

	HO , π liante	BV , π^* antiliante	
EI	2e-	0 e-	IL = 1
EF	1,8 e-	0,1 e-	IL = 0,85

< = > liaison AFFAIBLIE < => rupture amorcée