

# Construction des orbitales moléculaires d'un complexe octaédrique

## La théorie des groupes est-elle indispensable ?

François Volatron et Patrick Chaquin

**Résumé** Cet article présente une méthode systématique de construction du diagramme orbitalaire d'un complexe octaédrique  $ML_6$  ( $L = H^-$ ,  $M =$  métal de transition) modèle, sans le recours à la théorie des groupes. Dans un premier temps, les notions de symétrie et d'antisymétrie par rapport à un plan permettent la construction des orbitales de  $H_6$  adaptées à la symétrie. Dans un deuxième temps, on laisse interagir avec les orbitales atomiques de valence du métal central. Cette construction permet de présenter et d'exploiter ces diagrammes dès la deuxième, voire la première année de licence.

**Mots-clés** Orbitale moléculaire, complexe octaédrique, métal de transition, symétrie, théorie.

**Abstract** **Building molecular orbitals of an octahedral complex: is group theory essential?**

This article presents a systematic method for building the molecular orbital diagram of a model octahedral complex  $ML_6$  ( $L = H^-$ ,  $M =$  transition metal) without appealing to group theory. In a first step, using the concepts of symmetry and antisymmetry with respect to a plane, the symmetry adapted orbitals of the  $H_6$  moiety are obtained. In a second step, we allow these fragment orbitals to interact with the valence orbitals of the metal. This way, such diagrams can be presented and exploited as soon as the second or even first year of undergraduate education.

**Keywords** Molecular orbital, octahedral complex, transition metal, symmetry, theory.

L'enseignement post-bac et notamment les classes préparatoires aux grandes écoles scientifiques accordent une place de plus en plus importante à l'étude de la structure électronique des molécules par l'analyse et/ou la construction des orbitales moléculaires (OM). De nombreux ouvrages sont consacrés à la description et à l'utilisation des OM, principalement en chimie organique [1].

L'utilisation des OM en chimie inorganique se heurte à un problème d'outils : leur construction s'effectue souvent par le biais de la théorie des groupes qui n'est généralement enseignée qu'au niveau bac + 3 (L3). Ceci constitue un obstacle à l'enseignement de la chimie inorganique théorique au cours des deux premières années universitaires.

Le but de cet article est d'établir la structure électronique d'un complexe octaédrique sans utiliser la théorie des groupes, mais en mettant à profit des analyses simples de symétrie, accessibles à la plupart des étudiants post-bac. Bien sûr, cette approche ne permet pas de démontrer tous les résultats que l'on obtient à l'aide de la théorie des groupes, aussi quelques-uns doivent être admis, notamment en ce qui concerne la dégénérescence de certaines OM.

Une des premières difficultés qui apparaît lorsqu'on aborde la chimie des éléments de transition est que le métal est entouré de ligands souvent complexes, tels que des phosphines ou des ligands organiques, le cyclopentadiényl étant un exemple souvent rencontré. Il est toutefois possible

de modéliser un complexe  $M(\text{ligand})_6$  en se limitant aux orbitales de ligand qui interagissent directement avec le métal ; c'est par exemple l'orbitale qui décrit la paire libre de  $PR_3$  dans le cas des phosphines. On peut ainsi « résumer » le ligand à une seule orbitale, celle dont l'interaction avec le métal crée directement la liaison métal-ligand.

Un ligand particulièrement simple dans cet ordre d'idée est le ligand hydrogène, H, qui ne possède qu'une seule orbitale de valence, l'orbitale 1s [2]. Ce ligand existe effectivement et joue un rôle important dans tous les phénomènes d'hydrogénation catalytique ; il intervient par exemple dans le cycle catalytique du complexe de Wilkinson [3]. Un modèle simple mais réaliste d'un complexe octaédrique est donc le complexe  $MH_6$  qui sera étudié dans cet article. La structure électronique obtenue pour ce modèle est un point de départ pour l'étude de complexes plus compliqués où les ligands pourront intervenir par plusieurs orbitales (effets  $\pi$ ) [4].

Pour construire les OM du complexe octaédrique  $MH_6$ , on effectue une fragmentation en M et  $H_6$  (voir encadré 1 pour la méthode de fragmentation).

### Le fragment $H_6$

Les orbitales moléculaires de ce fragment sont elles aussi établies à l'aide d'une fragmentation en  $H_4$  carré et  $H_2$  ;

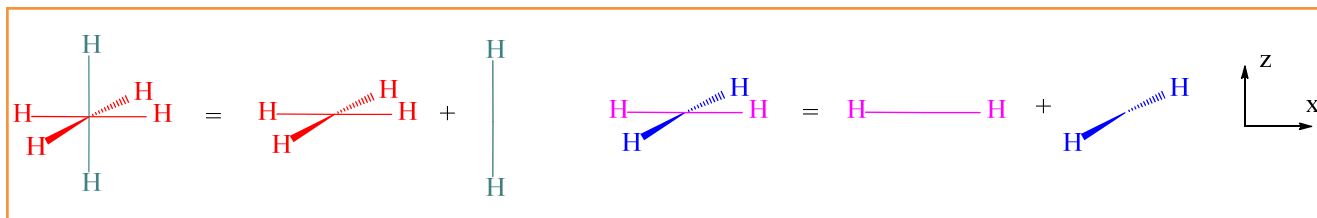


Figure 1.

**Encadré 1****La méthode de fragmentation**

Dans le cadre de la théorie LCAO, chaque orbitale moléculaire (OM)  $\varphi$  est exprimée comme combinaison linéaire des orbitales atomiques (OA)  $\chi_i$  :

$$\varphi = \sum_i c_i \chi_i$$

Il est possible de scinder cette sommation en deux termes, en regroupant les OA appartenant à deux parties A et B de la molécule, les fragments :

$$\varphi = \sum_{i \in A} c_i \chi_i + \sum_{i \in B} c_i \chi_i$$

Pour chaque fragment, la combinaison linéaire des OA constitue les OM du fragment considéré. Établir les OM de la molécule totale revient ainsi à faire interagir entre elles les OM des deux fragments. Les règles d'interaction sont identiques à celles établies pour l'interaction de deux OA sur deux centres (voir encadré 2).

celles de  $H_4$  résultent de l'interaction des OM des deux fragments  $H_2$  et  $H_2$ , chaque fragment regroupant les atomes d'hydrogène séparés par une diagonale du carré (figure 1).

Les trois fragments  $H_2$  impliqués possédant des distances H...H égales, ils sont identiques. Leurs orbitales sont donc identiques : chaque fragment présente une OM liante  $\sigma$ , combinaison en phase des deux orbitales atomiques (OA) 1s des atomes d'hydrogène et une OM antiliante  $\sigma^*$ , combinaison en opposition de phase de ces mêmes OA (voir encadré 2). De plus, comme les atomes sont relativement éloignés, ce recouvrement est faible. L'OM liante est donc faiblement stabilisée et l'antiliante faiblement déstabilisée : ces deux OM sont proches en énergie.

Construire le diagramme d'interaction entre les deux orbitales de fragment (OF) est grandement facilité par les études des propriétés de symétrie de celles-ci (figure 2). Si l'on considère les deux plans  $xz$  ( $P_1$ ) et  $yz$  ( $P_2$ )<sup>(1)</sup> qui sont des plans de symétrie de  $H_4$ , chaque orbitale est soit symétrique (S), soit antisymétrique (A) par rapport à chaque plan<sup>(2)</sup>. On obtient ainsi l'étiquetage présenté en figure 2 pour les différentes orbitales de fragment ; par exemple, SA indique que l'orbitale  $\sigma^*_1$  est symétrique par rapport à  $P_1$  et antisymétrique par rapport à  $P_2$ .

**Encadré 2****Les règles d'interaction de deux orbitales atomiques sur deux centres**

Dans le cadre de la théorie LCAO, chaque OM  $\varphi$  s'écrit comme :  $\varphi = c_1 \chi_1 + c_2 \chi_2$

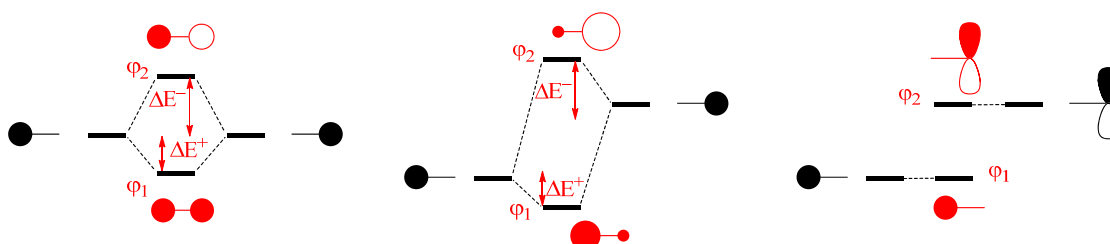
Trois cas simples permettent de traiter qualitativement toutes les interactions de deux orbitales atomiques :

1) **Les deux OA sont identiques** : l'interaction des deux OA (de recouvrement S choisi positif) conduit à la formation de deux OM, l'une liante et l'autre antiliante. Dans l'OM liante, les deux coefficients des OA sont égaux ( $c_1 = c_2$ ), alors qu'ils sont opposés ( $c_1 = -c_2$ ) dans l'OM antiliante. La stabilisation  $\Delta E^+$  de l'OM liante ainsi que la déstabilisation  $\Delta E^-$  de l'OM antiliante sont deux quantités proportionnelles à S. Celle-ci diminue rapidement lorsque la distance entre les atomes qui portent les OA augmente.

2) **Les deux OA sont d'énergies très différentes** : il se forme à nouveau deux orbitales, une liante et une antiliante. Dans l'OM liante, les deux OA sont en phase mais le coefficient de l'OA la plus basse est plus grand que l'autre : l'orbitale est dite « polarisée ». Dans l'OM antiliante, les deux coefficients sont opposés et cette OM est polarisée sur l'OA la plus haute en énergie. Les deux quantités  $\Delta E^+$  et  $\Delta E^-$  sont proportionnelles à  $S^2/\Delta\epsilon$ , où  $\Delta\epsilon$  est la différence d'énergie entre les deux OA.

3) **Les deux OA ont un recouvrement nul** : il n'y a alors pas d'interaction ; chaque OM est une OA de départ qui, en première approximation, n'est perturbée ni en forme ni en énergie. Cela revient à avoir  $c_1 = 1$  et  $c_2 = 0$  dans le première OM, et  $c_1 = 0$  et  $c_2 = 1$  dans la seconde. Cette situation se rencontre lorsque, par rapport à un élément de symétrie moléculaire, une OA est symétrique et que l'autre est antisymétrique.

Tous ces résultats sont résumés dans les schémas suivants :



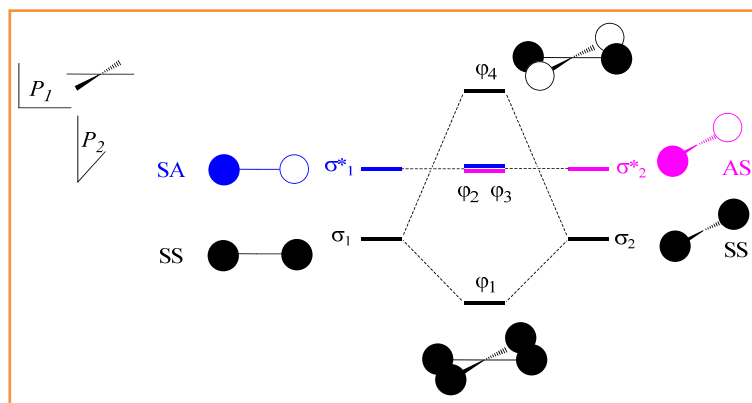
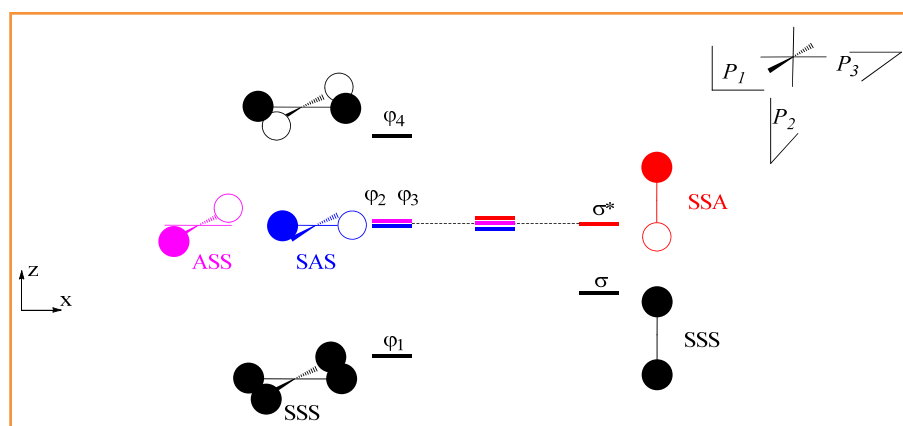
Figure 2 - Orbitales moléculaires du fragment  $H_4$ .

Figure 3.



Figure 4.

Seules les orbitales qui possèdent les mêmes propriétés de symétrie peuvent interagir (voir encadré 2). Par exemple, l'orbitale  $\sigma^*_1$  du fragment situé dans  $P_1$  est antisymétrique par rapport à  $P_2$  et ne peut donc pas interagir avec les autres orbitales qui sont toutes symétriques par rapport à ce même plan. En conséquence, elle se retrouvera inchangée dans le diagramme d'OM de  $H_4$ .

Compte tenu des propriétés de symétrie de chaque OF, on obtient le diagramme de la figure 2.

Les deux OF  $\sigma^*_1$  et  $\sigma^*_2$  n'interagissent avec aucune autre et seules les OF SS peuvent interagir. Elles conduisent à la formation d'une orbitale liante  $\phi_1$  et d'une orbitale antiliante  $\phi_4$ . Dans ces deux orbitales, comme les OF qui les constituent ont la même énergie, ces dernières auront le même poids. En conséquence, les coefficients de chaque orbitale 1s sont égaux en valeur absolue dans ces deux OM. L'examen de l'orbitale  $\phi_4$  justifie son positionnement énergétique au-dessus des OM dégénérées  $\phi_2$  et  $\phi_3$ . En effet, il apparaît quatre interactions antiliantes entre les OA 1s portées par des atomes voisins : cette orbitale est donc la plus haute en énergie. Dans  $\phi_2$  et  $\phi_3$ , il n'apparaît qu'une interaction antiliante entre des OA qui, de plus, sont plus éloignées et donc présentent un recouvrement plus faible.

L'étape suivante est la construction des OM de  $H_6$  en faisant interagir les orbitales  $\sigma$  et  $\sigma^*$  de  $H_2$  (porté par l'axe des  $z$ ) avec celles de  $H_4$  précédemment construites.

On remarque tout d'abord que l'OF  $\sigma^*$  du fragment  $H_2$  est déstabilisée de la même quantité que celles des deux fragments  $H_2$  utilisés précédemment (et qui constituent  $\phi_2$  et  $\phi_3$ ) : en effet, la distance entre les deux OA qui interagissent étant identiques, leurs recouvrements sont égaux.

À nouveau, l'étude des propriétés de symétrie permet de construire pour l'essentiel le diagramme d'interaction entre les OF des deux fragments. Par rapport aux deux plans  $P_1$  et  $P_2$ , les deux orbitales du fragment  $H_2$  sont symétriques (figure 3). Si on analyse la symétrie par

rapport au plan  $xy$  ( $P_3$ ), l'OM liante est symétrique et l'antiliante antisymétrique. Les quatre OF de  $H_4$  sont toutes symétriques par rapport à  $P_3$  puisque chaque orbitale 1s des atomes de  $H_4$  l'est. On constate donc que les trois orbitales ASS, SAS ou SSA, seules dans leur famille de symétrie, ne peuvent interagir avec une autre OF. Elles forment donc trois OM de  $H_6$  ; comme elles ont la même énergie, elles forment un niveau triplement dégénéré de  $H_6$ .

À l'issue de cette première analyse, trois orbitales SSS sont susceptibles d'interagir. Pour aller plus loin, il est nécessaire de considérer un autre élément de symétrie, par exemple, parmi d'autres choix possibles, le plan vertical bisectant l'angle formé par les axes  $x$  et  $y$ . Par rapport à ce plan  $P_4$ ,  $\phi_1$  et  $\sigma$  sont symétriques alors que  $\phi_4$  est antisymétrique (figure 4) :  $\phi_4$  ne peut donc pas interagir et formera une OM de  $H_6$ .

Une seule interaction est donc possible entre les orbitales de deux fragments, entre  $\phi_1$  et  $\sigma$ . Il se forme une combinaison liante et une autre antiliante.

Nous admettrons les résultats suivants :

- 1) dans l'OM liante, tous les coefficients sont égaux ;
- 2) dans l'OM antiliante, les coefficients des orbitales provenant du fragment  $H_2$  sont doubles (en valeur absolue) de ceux de  $H_4$  ;
- 3) l'OM antiliante a exactement la même énergie que  $\phi_4$ <sup>(3)</sup>.

On obtient ainsi les OM de  $H_6$  qui se répartissent selon trois niveaux : le plus bas en énergie n'est pas dégénéré ; au-dessus se trouve un niveau triplement dégénéré ; le niveau le plus haut est doublement dégénéré (figure 5).

## Le fragment M

Un métal de transition du bloc d se caractérise par une sous-couche  $(n-1)d$  incomplète lorsqu'on applique les règles de remplissage de Klechkovsky. La première série de transition de la classification périodique apparaît lors du remplissage des OA 3d. Elle comprend dix métaux, allant du scandium au zinc<sup>(4)</sup>. Afin de fixer les idées, nous prendrons l'exemple d'un élément de cette série de transition, les résultats étant identiques pour les autres éléments du bloc d.

Les orbitales de valence d'un métal de la première série sont les OA 3d, 4s et 4p. Ces dernières, bien que vacantes

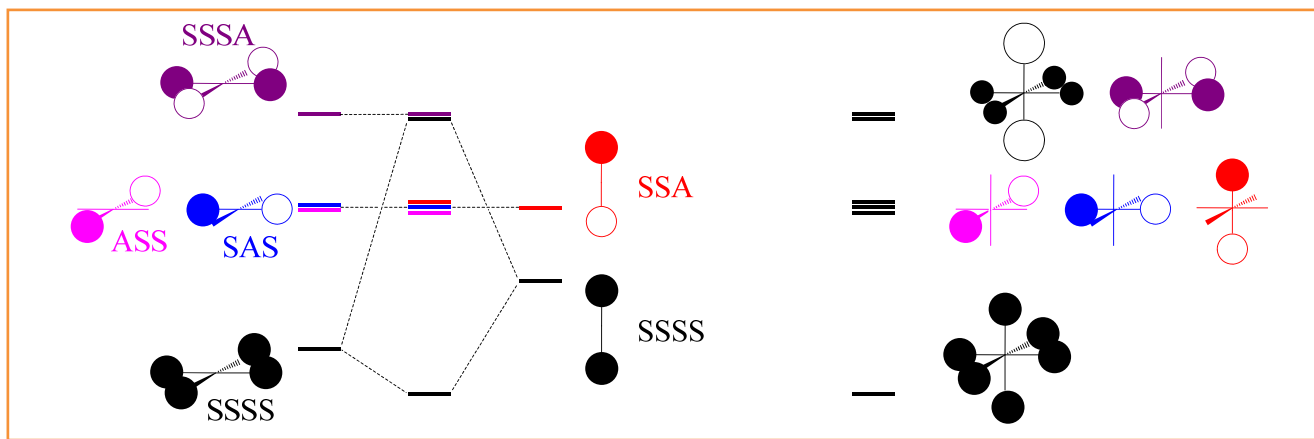


Figure 5 - Orbitales moléculaires du fragment H<sub>6</sub>.

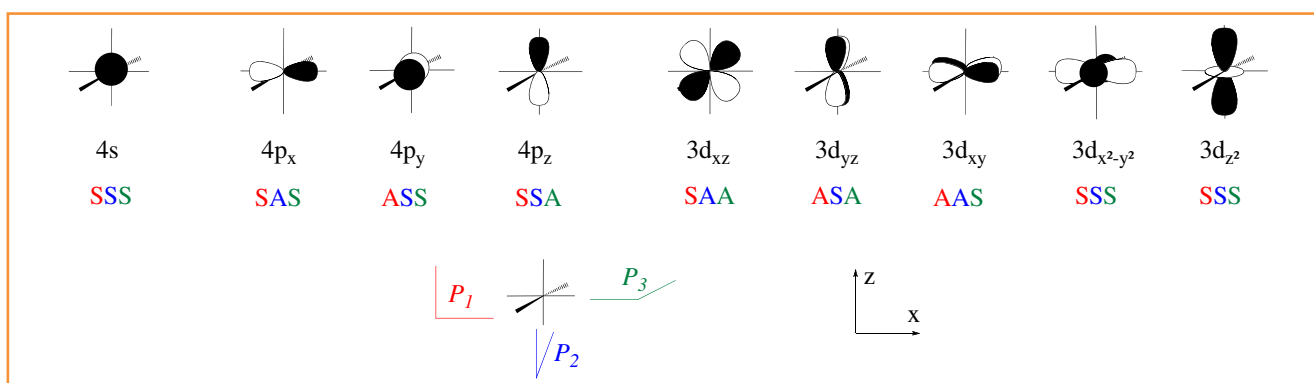


Figure 6 - Orbitales atomiques de valence du fragment M.

dans l'état fondamental de l'atome, sont nécessaires à la description de la structure électronique des complexes. Les OA de valence du métal sont représentées *figure 6* ainsi que leurs propriétés de symétrie par rapport aux trois plans  $P_1$  (rouge),  $P_2$  (bleu) et  $P_3$  (vert).

L'orbitale 4s ne possède pas de plan nodal ; les orbitales 4p en possèdent chacune un,  $P_2$ ,  $P_1$  et  $P_3$  respectivement pour  $4p_x$ ,  $4p_y$  et  $4p_z$ . Les expressions analytiques des orbitales 3d sont :

$$3d_{xz} = Nxz e^{-\zeta r}, \quad 3d_{yz} = Nyz e^{-\zeta r}, \quad 3d_{xy} = Nxy e^{-\zeta r}$$

$$3d_{x^2-y^2} = \frac{N}{2}(x^2 - y^2)e^{-\zeta r}$$

$$3d_{z^2} = \frac{N}{2\sqrt{3}}(2z^2 - x^2 - y^2)e^{-\zeta r} = \frac{N}{2\sqrt{3}}(3z^2 - r^2)e^{-\zeta r}$$

Dans ces expressions, N est un coefficient de normalisation et  $\zeta$  un paramètre caractéristique des orbitales 3d pour un métal donné. À l'exception de  $d_{z^2}$ , chaque orbitale 3d possède deux plans nodaux :  $P_2$  et  $P_3$  pour  $3d_{xz}$  ;  $P_1$  et  $P_3$  pour  $3d_{yz}$  ;  $P_1$  et  $P_2$  pour  $3d_{xy}$ . Ceux de l'orbitale  $3d_{x^2-y^2}$  sont les deux plans bissecteurs de l'angle formé par les axes x et y. L'orbitale  $3d_{z^2}$  ne possède pas de plan nodal mais un cône nodal de révolution autour de l'axe des z.

Une propriété importante de ces éléments du bloc d est qu'ils sont tous peu électronégatifs : dans l'échelle de Pauling, l'électronégativité des métaux du bloc d varie de 1,2 pour Y à 2,4 pour Au, valeurs à comparer à celles du lithium (1,0), du carbone (2,6) ou de l'hydrogène (2,2). Cela se traduit par des énergies relativement élevées de leurs orbitales de valence, supérieures à celles des ligands auxquels ils sont liés.

Le diagramme d'interaction entre les fragments M et H<sub>6</sub> met en jeu quinze orbitales : les neuf OA de M et les six orbitales de H<sub>6</sub>. La considération des seules propriétés de symétrie par rapport aux trois plans permet de bâtir neuf des OM de MH<sub>6</sub> (*figure 7*) : trois orbitales 3d sont antisymétriques par rapport à deux plans et ne peuvent interagir avec aucune des OM de H<sub>6</sub>. Elles restent donc non liantes dans ce diagramme

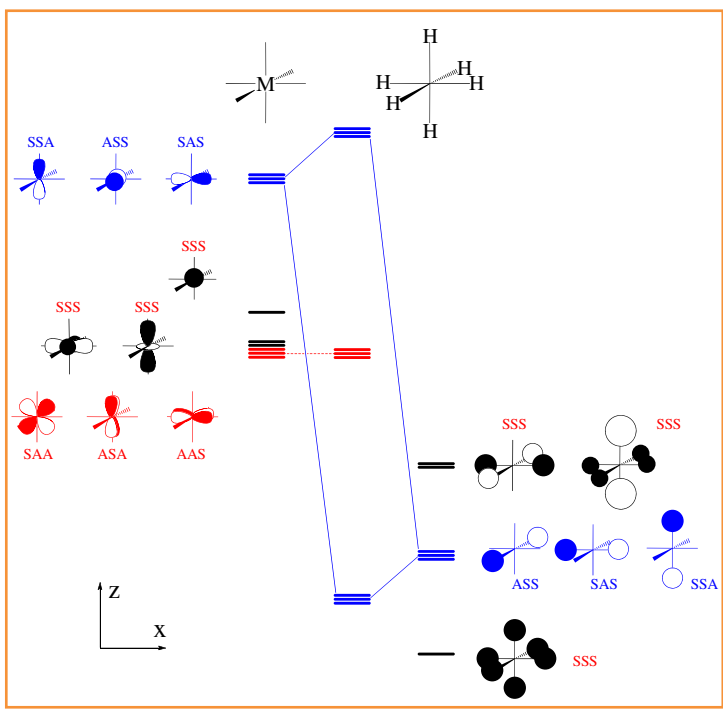


Figure 7.

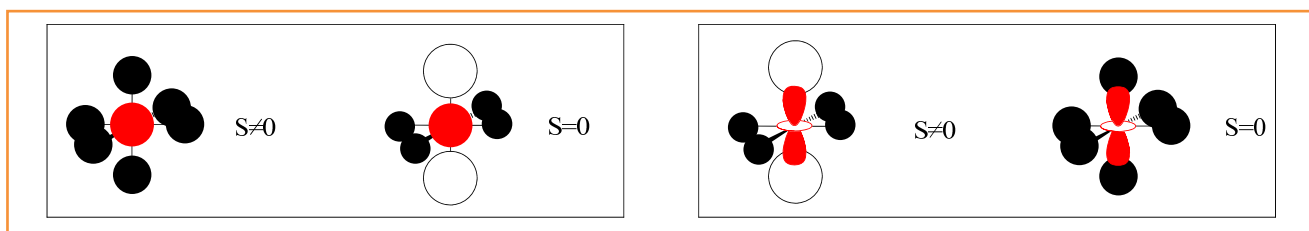
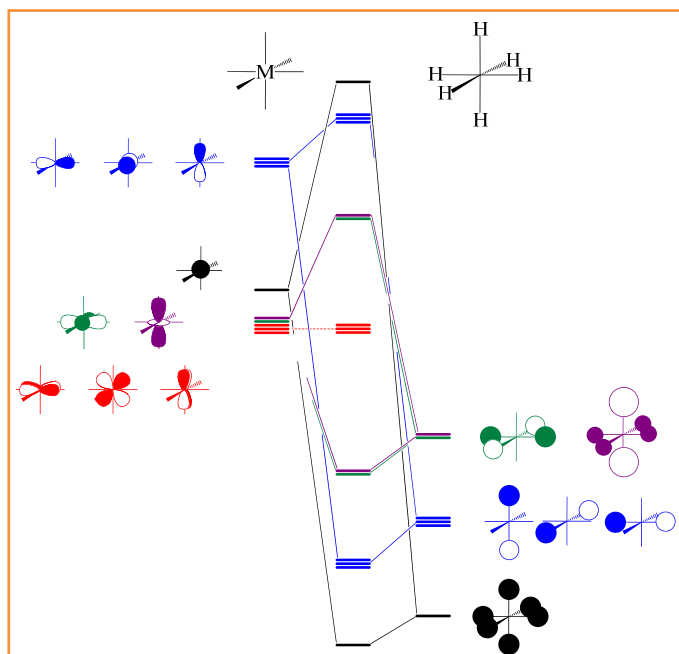
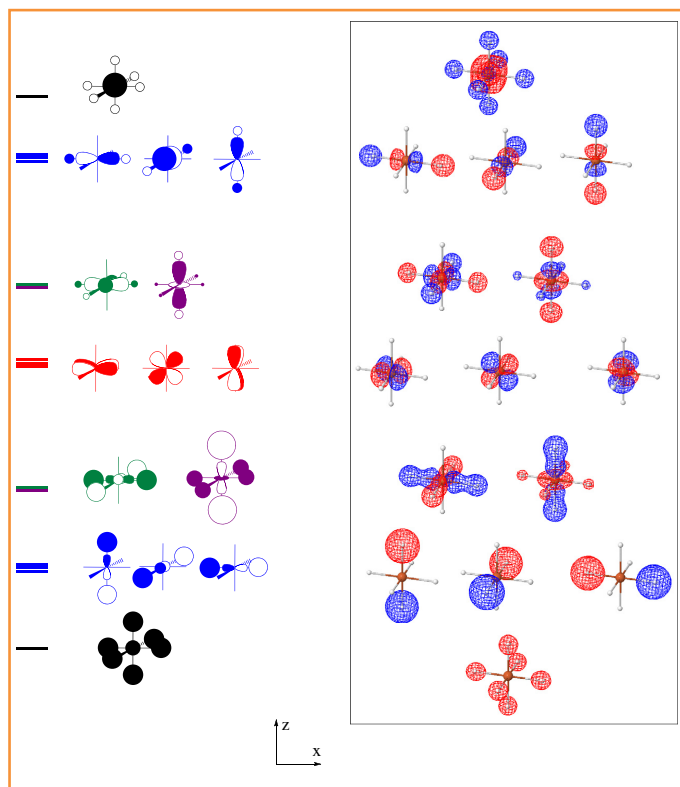


Figure 8.

Figure 9 - Diagramme d'interaction entre les orbitales atomiques de M et les orbitales moléculaires de  $H_6$ .Figure 10 - Représentation des orbitales moléculaires de  $MH_6$ .

d'interaction et forment ainsi trois OM du complexe. Chaque orbitale 4p du métal possède la même symétrie qu'une orbitale du niveau triplement dégénéré de  $H_6$ . Il y a trois interactions possibles qui conduisent à la formation de trois OM liantes dégénérées et de trois OM antiliantes elles aussi dégénérées.

À l'issue de cette première analyse, trois OA SSS du métal sont susceptibles d'interagir avec trois OF SSS de  $H_6$ . L'analyse de la symétrie par rapport au plan bissecteur  $P_4$  permet d'avancer dans la construction du diagramme. Parmi ces six orbitales SSS, deux sont antisymétriques par rapport à ce plan, toutes les autres étant symétriques. Elles ne peuvent donc interagir qu'ensemble et forment une OM liante et une antiliante.

Montrer que pour les quatre orbitales restantes, les interactions se résument à deux interactions à deux orbitales ne peut être établi à partir de simples considérations de symétrie comme cela a été fait jusqu'à présent. Il est nécessaire ici de calculer les recouvrements entre orbitales.

Le recouvrement de l'OA 4s avec l'orbitale la plus basse de  $H_6$  est différent de zéro puisqu'il est la somme de six contributions positives. À l'inverse, son recouvrement avec l'orbitale la plus haute de  $H_6$  est nul : à quatre termes positifs viennent se retrancher deux termes négatifs deux fois plus importants puisque les coefficients des OA sont doubles (figure 8).

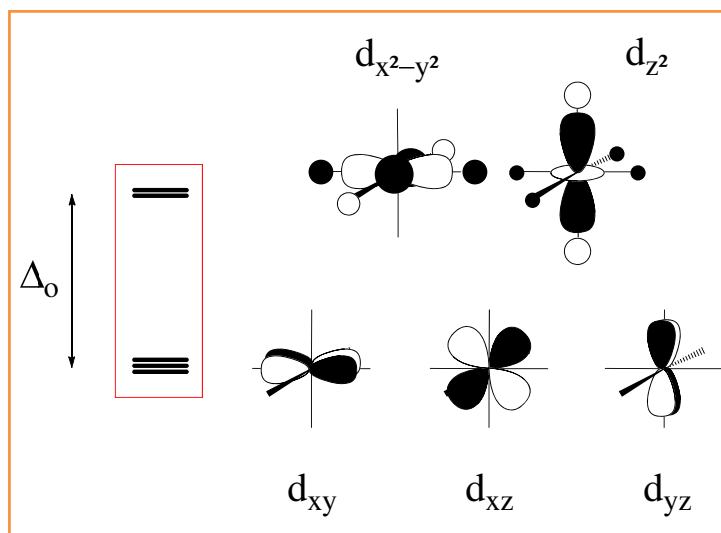
De même, le recouvrement de l'OA  $d_{z^2}$  est nul avec l'orbitale la plus basse de  $H_6$  et non nul avec la plus haute (on remarquera ici que dans  $d_{z^2}$ , la contribution sur l'axe des z est deux fois plus importante en valeur absolue que celles sur les axes x et y).

L'OA 4s ne peut donc interagir qu'avec l'orbitale la plus basse de  $H_6$  et  $d_{z^2}$  qu'avec la plus haute. Il est ainsi possible de compléter le diagramme d'interaction (figure 9).

Un résultat a été admis ici : les interactions des OA  $d_{x^2-y^2}$  et  $d_{z^2}$  avec les orbitales dégénérées de  $H_6$  conduisent à la formation d'un couple d'OM liantes dégénérées et d'un couple d'OM antiliantes dégénérées. La forme des différentes OM obtenues sur le complexe modèle  $Fe(H_6)^{4-}$  est donnée en figure 10 ; les surfaces d'isodensité calculées à l'aide de la méthode « Extended Hückel (EHMO) » (disponible sur le site du logiciel OrbiMol) [5] sont données sur la partie droite de la figure 10.

Il apparaît six OM liantes entre M et  $H_6$ , qui sont les plus basses en énergie. Le peuplement de ces six orbitales permet la description de six liaisons entre le métal et les six ligands. On remarquera que du fait de la différence d'électro-négativité entre le métal et les ligands, ces OM sont polarisées sur les orbitales les plus basses, c'est-à-dire celles des ligands<sup>(5)</sup>.

Plus haut en énergie, on trouve trois orbitales dégénérées et strictement non liantes qui sont les orbitales  $d_{xz}$ ,  $d_{yz}$  et  $d_{xy}$ . Immédiatement au-dessus se trouvent les deux orbitales dégénérées antiliantes qui se développent principalement sur

Figure 11 - Le « bloc d » du complexe  $MH_6$ .

## Encadré 3

## Utilisation de la théorie des groupes

L'établissement des OM de  $MH_6$  est considérablement simplifié lorsqu'il est possible d'employer les résultats donnés par la théorie des groupes [7] (qui généralement enseignée au niveau L3). Dans le groupe de symétrie de l'octaèdre,  $O_h$ , les caractères associés à la représentation des six OA 1s sont :

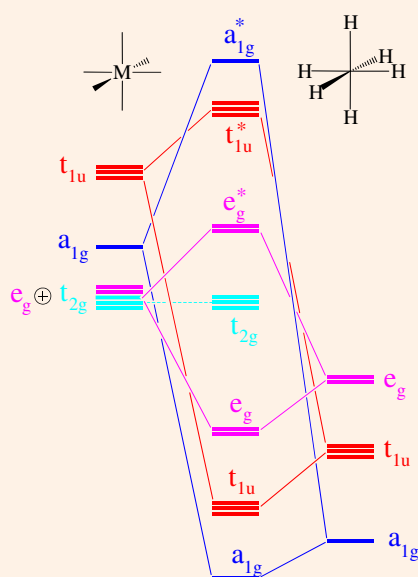
$O_h$	E	$8C_3$	$6C_2$	$6C_4$	$3C_2$	i	$6S_4$	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$
$\Gamma(s^6)$	6	0	0	2	2	0	0	0	4	2

Cette représentation se réduit selon :

$$\Gamma(s^6) = A_{1g} \oplus E_g \oplus T_{1u}$$

On retrouve ici que les OM de  $H_6$  se répartissent selon un niveau non dégénéré ( $A_{1g}$ ), un autre doublement dégénéré ( $E_g$ ) et un troisième triplement dégénéré ( $T_{1u}$ ).

Les OA du métal sont des bases des représentations irréductibles  $A_{1g}$  (4s),  $T_{1u}$  (4p) et  $E_g \oplus T_{2g}$  (3d). En faisant interagir les orbitales qui sont des bases des mêmes représentations irréductibles, on retrouve le diagramme précédent :



L'intérêt essentiel de cette approche est que la dégénérescence des OM est directement démontrée par l'appartenance à une représentation irréductible d'ordre supérieur à un.

le métal, à l'inverse des orbitales liantes associées ; elles sont majoritairement constituées des orbitales  $d_{z^2}$  et  $d_{x^2-y^2}$ .

Les quatre dernières OM sont antiliantes entre le métal et les ligands ; elles sont de peu d'intérêt pour les propriétés chimiques des complexes.

Un résultat important de ce diagramme est la présence de cinq OM principalement constituées des OA d du métal : trois sont non liantes et deux antiliantes. Cet ensemble d'orbitales constitue ce qui est appelé le « bloc d » du complexe ; l'essentiel des propriétés chimiques et physico-chimiques de ces composés provient de la nature de ce bloc d (figure 11). Traditionnellement, on appelle  $\Delta_0$  (ou  $10Dq$ ) la séparation énergétique entre ces deux groupes d'orbitales.

Obtenir le bloc d d'un complexe octaédrique par l'utilisation de propriétés de symétrie simples est bien sûr plus long que par la théorie des groupes (présentée dans l'encadré 3). Cela permet toutefois de montrer que les deux OM les plus hautes sont antiliantes entre le métal et les ligands, résultat qui ne peut pas être obtenu dans le cadre de la théorie du champ cristallin. Les conséquences de cette propriété ont déjà fait l'objet d'un article dans ce journal [6].

## Notes et références

- (1) L'utilisation de ces deux plans est suffisante pour construire les orbitales de  $H_4$ .
- (2) Symétrique signifie que l'orbitale est identique à son image par la symétrie plane, et antisymétrique que son image est l'opposée de l'orbitale de départ.
- (3) On peut trouver le résultat 2 en écrivant que l'OM antiliante est orthogonale à l'OM liante et le résultat 3 en calculant, dans chaque OM, les recouvrements entre proches voisins.
- (4) L'atome de zinc, de configuration  $[Ar]4s^2 3d^{10}$ , ne correspond pas *stricto sensu* à la définition d'un élément de transition puisque la sous-couche 3d est entièrement remplie. De ce fait, certains auteurs ne le classent pas comme élément de transition. Ses propriétés chimiques le rapprochent cependant plus d'un métal de transition que d'un élément du groupe principal.
- (5) Cette polarisation des OM, donc des liaisons, justifie en partie le « décompte ionique » où les deux électrons de la liaison métal-ligand sont attribués au ligand.
- [1] Nguyễn T.A., *Orbitales frontières : manuel pratique*, InterEdition/CNRS Éditions, 1995 ; Hiberty P., Nguyễn T.A., *Introduction à la chimie quantique*, Éditions de l'École polytechnique, 2008 ; Chaquin P., Volatron F., *Chimie organique, une approche orbitale*, De Boek Supérieur, 2015. Voir également : Albright T.A., Burdett J.K., Whangbo M.-H., *Orbital interactions in chemistry*, Wiley, 1985.
- [2] Astruc D., *Chimie organométallique*, EDP Sciences, 2000.
- [3] Shriver D.F., Atkins P.W., *Chimie inorganique*, De Boek Université, 2001.
- [4] Jean Y., *Les orbitales moléculaires dans les complexes*, Éditions de l'École polytechnique, 2003.
- [5] Chaquin P., Fuster F., *OrbiMol*, [www.lct.jussieu.fr/pagesperso/orbimol/fr/index-fr.shtml](http://www.lct.jussieu.fr/pagesperso/orbimol/fr/index-fr.shtml)
- [6] Volatron F., Chaquin P., Introduction à la chimie inorganique : théorie du champ cristallin ou théorie des orbitales moléculaires ?, *L'Act. Chim.*, 2015, 396, p. 40.
- [7] Carter R.L., *Molecular symmetry and group theory*, Wiley, 1994 ; Cotton F.A., *Chemical applications of group theory*, 3<sup>ed</sup>, Wiley, 1990.



F. Volatron

**François Volatron** est directeur de recherche au CNRS et **Patrick Chaquin**, professeur émérite au Laboratoire de Chimie Théorique, Université Pierre et Marie Curie, Sorbonne Universités, Paris\*.



P. Chaquin

\* Laboratoire de Chimie Théorique, UMR CNRS 7616, UPMC, LabEx MiChem, Sorbonne Universités, 4 place Jussieu, CC 137, F-75005 Paris. Courriels : [volatron@lct.jussieu.fr](mailto:volatron@lct.jussieu.fr) ; [patrick.chaquin@lct.jussieu.fr](mailto:patrick.chaquin@lct.jussieu.fr)