Université Mohammed Boudiaf de M’sila année universitaire 2017/2018

 Faculté de Science de la matière matière : chimie théorique

 Département de chimie 3ère année

Travaux pratiques Application

**1**

**Application :**

Avec le logiciel ADF ; il faut d'abord optimiser chaque complexe ensuite faire le travail demandé si dessous.

Pour les complexes **ML6**suivants

1. [Cr(NH3) 6] 3+; ion Cr3+ d3
2. [CrF6]3- , ion Cr3+ d3
3. [MnF6] 3-; ion Mn3+ d4
4. [Mn(CN) 6] 3-; ion Mn3+d4
* Calculez le champ cristallin
* Donner le compte électronique de chaque complexe
* Déterminer les complexes qui ont un champ fort
* Déterminer les complexes qui ont un champ faible
* Déterminer les complexes paramagnétique et diamagnétique

Les mêmes questions pour :

**ML5**

Bipyramide trigonale Fe(CO)5 et [Mn(CO)5]1-

Pyramide à base carrée [Ni(CN)5]3- et [CuCl5]3-

**ML4**

Papillion Fe(CO)4

Tétraédrique [VCl4]1-

Plan carrée [Ni(CN)4]2-

**ML3**

 Triangle Zn(CO)3

**ML2**

Linéaire Ag(NH3)+

****

16