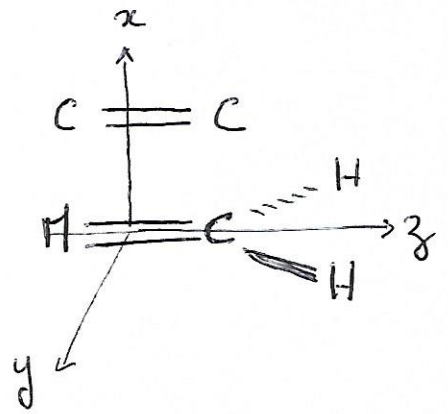
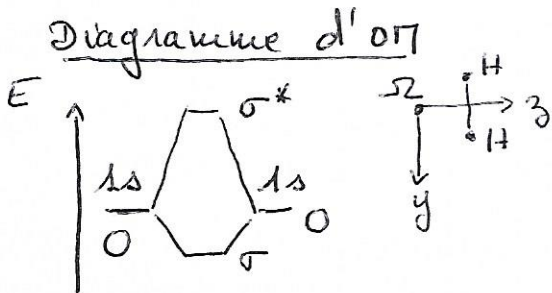


CCP PC 2015

Bien comprendre où sont les atomes dans le repère (z, x, y, z) !
 les deux molécules (éthène et πCH_2) s'approchent plan contre plan. Je n'ai pas dessiné les 4H de l'éthène.



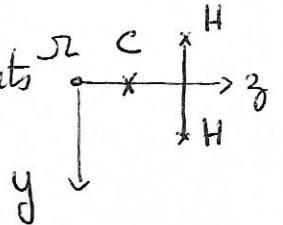
B2.71 H_2 est dans le plan (z, y, z) , colinéaire à l'axe y.



σ σ^*
 liaute (L) antiliaute (AL)

les deux OT résultent d'un recouvrement axial, l'axe interne-cléaire est un axe de révolution donc elles sont de type σ . L'OT σ est liaute car le recouvrement S est positif, l'OT σ^* = antiliaute car " " " " S " négatif.

B2.81 le carbène CH_2 est construit à partir des fragments πC et πH .
 On voit que les plans (z, y, z) et (z, x, z) sont des plans de symétrie de CH_2 .



	$2s_C$	$2p_{x_C}$	$2p_{y_C}$	$2p_{z_C}$	σ	σ^*
z, y, z	S	A	S	S	S	S
z, x, z	S	S	A	S	S	A

conduisent aux OT $1b_2$ et $2b_2$
 devient NL non liaute $1b_1$

Interaction à 3 OT : par CL sont conduire à $1a_1$, $2a_1$ et $3a_1$.

B2.91 Il ya $4 + 2 \times 1 = 6 e^-$ donc $(1a_1)^2 (1b_2)^2 (2a_1)^2$.


HO = $2a_1$


BV = $1b_1$



B2.10

π s'approche de CH_2 le long de l'axe z .

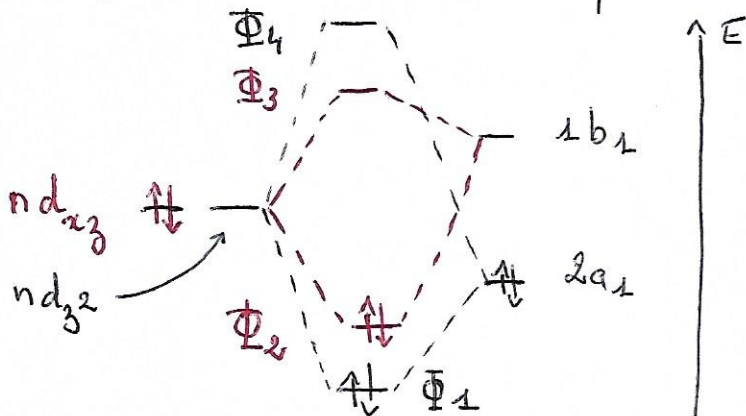
nd_{z^2}  peut interagir avec la HO = $2a_1$ de CH_2 .


nd_{xz}  $\rightarrow z =$ $=$ $BV = 1b_1$ de CH_2 .

Pour avoir une interaction stabilisante à $2e^-$, on va supposer que nd_{z^2} est "vide" et nd_{xz} "possède $2e^-$ ".

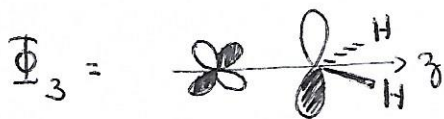
CH_2 est un ligand σ -donneur via $2a_1$ (donation)

CH_2 - - - π -accepteur - $1b_1$ (rétrodonation)



 Φ_3 et Φ_3 sont plus haute en énergie pour respecter la règle $|E_{\text{destab}}| \gg |E_{\text{stab}}|$

B2.11

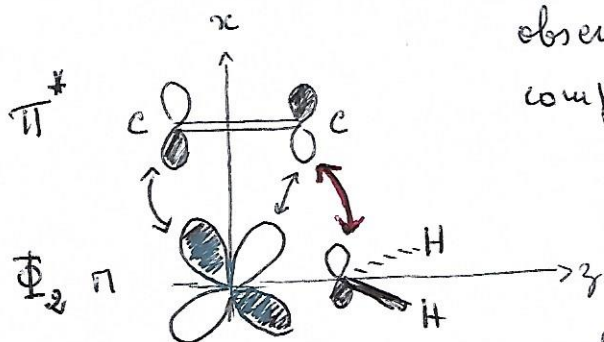


Φ_3 est AL, développée sur CH_2 fragment moins électro-négatif.

B2.12

Maintenant on dispose de $\pi = \text{CH}_2$ qui possède les OMO notées $\Phi_1, \Phi_2, \Phi_3, \Phi_4$ avec HO = Φ_2 et BV = Φ_3 .

On approche $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$ par le haut de l'axe x et on considère sa HO = π et sa BV = π^* . On regarde $\Phi_2 \leftrightarrow \pi^*$. On observe des recouvrements positifs (\curvearrowright). On comprend la cycloaddition $[2+2]$ et la



liaison créée en rouge.

On retrouve l'idée que la $\pi_{\text{C}=\text{C}}^*$ se remplit avec des e^- donc que la double liaison est rompue.