

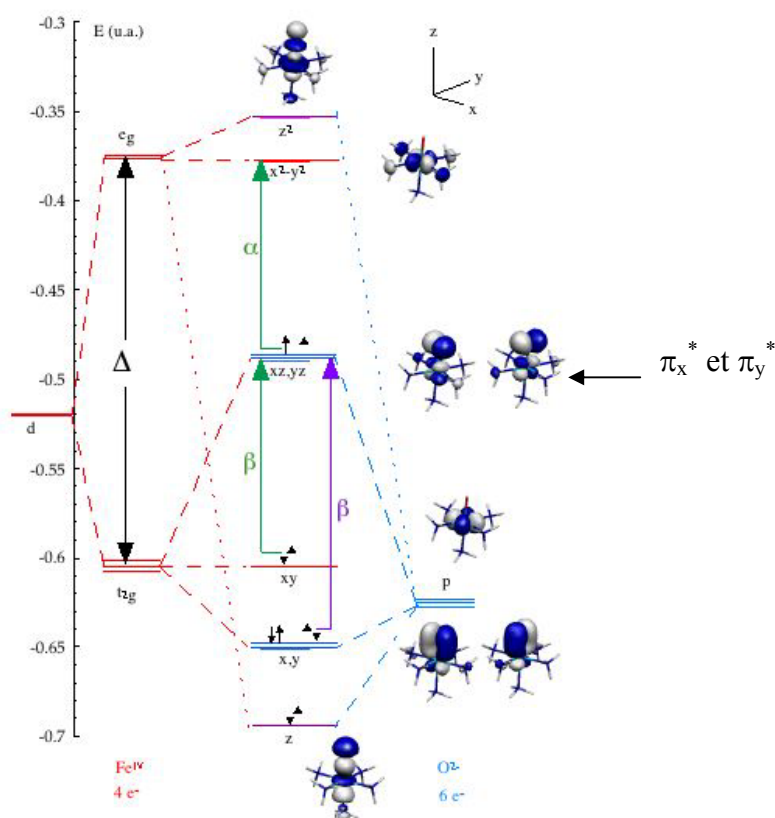
*d. Description du système  $\text{Fe}(\text{IV})$  bas spin.*

Jean-Jacques Girerd a calculé les propriétés magnétiques de l'état  $S = 1$  du  $\text{Fe}(\text{IV})=\text{O}$  dans le cadre d'un modèle champ cristallin.

En symétrie octaédrique, une espèce  $\text{Fe}(\text{IV})$  bas spin a un état fondamental  $^3\text{T}$ . La dégénérescence est de  $3 \times 3 = 9$ . Cette dégénérescence est levée par le couplage spin-orbite et la distorsion axiale.

La symétrie est supposée  $\text{C}_{4v}$  après distorsion. Cette distorsion crée une différence d'énergie entre les orbitales  $xz$ ,  $yz$  et  $xy$ , notée  $\delta_e$ .

Il est à noter que dans le modèle champ cristallin, les orbitales moléculaires  $\pi_x^*$  et  $\pi_y^*$  sont approchées par des orbitales d pures  $xz$  et  $yz$  (Figure II-14). Comme d'habitude, la covalence peut-être introduite en fin de calcul en modifiant la constante spin-orbite  $\zeta$ .



**Figure II-14.** Représentation des orbitales moléculaires pour  $[(\text{NH}_3)_5\text{FeO}]^{2+}$ .<sup>[13]</sup>

Un étude de la symétrie conduit aux fonctions de base suivantes dans le groupe double  $\text{C}_4'$  :