



# Orbitales frontières : Manuel pratique

*Trong-Anh Nguyễn*

 **Télécharger**

 **Lire En Ligne**

**Orbitales frontières : Manuel pratique** Trong-Anh Nguyễn

 [Download Orbitales frontières : Manuel pratique ...pdf](#)

 [Read Online Orbitales frontières : Manuel pratique ...pdf](#)

# **Orbitales frontières : Manuel pratique**

*Trong-Anh Nguyễn*

**Orbitales frontières : Manuel pratique** Trong-Anh Nguyễn

## Téléchargez et lisez en ligne Orbitales frontières : Manuel pratique Trong-Anh Nguyễn

---

289 pages

Extrait

Extrait des indications générales :

Nombreux sont les faits chimiques inexplicables par la physique classique. Citons, parmi les plus connus : la liaison covalente, l'inversion de Walden, la règle  $4n+2$  de Hückel, les réactions péricycliques, l'attaque axiale préférentielle des cyclohexanones (alors que la face équatoriale est la plus dégagée), la C-alkylation des énolates (quand l'oxygène est l'atome le plus chargé), la cyclodimérisation de l'acroléine (dans laquelle les atomes qui se lient portent la même charge), l'effet anomère, la conformation cisoïde de certains éthers d'énol... La liste est longue, chaque jour en apportant de nouveaux.

Il est clair qu'une compréhension profonde de la chimie, science du microscopique, passe par la mécanique quantique. Mais les calculs quantiques sont lourds et leurs résultats, présentés sous forme de grands tableaux de chiffres, ne sont pas toujours facilement traduisibles en termes chimiques. En fait, dans la vie quotidienne, les chimistes n'ont pas tant besoin de résultats numériques précis que d'outils de «dégrossissage», si possible simples et rapides.

Ce livre présente le plus fécond de ces outils, la méthode des perturbations et sa version simplifiée, l'approximation des orbitales frontières. Il reprend et développe un cours enseigné au DEA de chimie organique commun à l'Université Paris Sud et à l'École Polytechnique. Il s'adresse à des expérimentateurs peu familiarisés avec la mécanique quantique mais possédant de bonnes connaissances en chimie organique. La partie théorique est succincte, les mathématiques réduites au strict minimum et les explications quelquefois à la limite de l'exactitude. L'accent est mis plus sur la chimie que sur la mécanique quantique, plus sur l'utilisation intelligente des formules de perturbation que sur leur dérivation. Ainsi, la formule de perturbations à trois orbitales est donnée sans démonstration mais sa signification physique et ses conditions d'application sont précisées. Les raisons du succès de la méthode des orbitales frontières ainsi que ses limites sont assez longuement discutées. Il importe en effet de savoir reconnaître les cas litigieux, le taux de prédictions correctes de cette méthode n'étant que de 80% environ. Présentation de l'éditeur

Cet ouvrage, profondément remanié après une 1<sup>re</sup> édition maintenant épuisée, traite de la méthode des perturbations ; celle-ci permet, par son approximation des Orbitales Frontières (OF), de résoudre des problèmes de réactivité et de structure rencontrés en chimie. La 1<sup>re</sup> partie introduisant la théorie des perturbations a été généralement peu modifiée. En revanche la 2<sup>e</sup> partie traitant des problèmes de stéréosélectivité et de structure (chapitres 6 et 7) a été entièrement réécrite, ainsi que le chapitre traitant de la méthode de calcul des OF, afin de tenir compte de l'évolution de la chimie par ordinateur (méthodes de calculs semi-empiriques AMI ou PM3, et ab initio).

Cette nouvelle édition, tout aussi accessible au non-théoricien que la précédente, s'adresse à l'étudiant en master, et à toute personne intéressée par les mécanismes réactionnels. L'auteur signale ainsi les difficultés, détaille les explications et commente les différentes étapes avec un sens aigu de la pédagogie. Proposant plus de 120 exercices avec leurs corrections détaillées (soit plus de 30 nouveaux problèmes), ainsi qu'un catalogue complet des orbitales moléculaires, cet ouvrage permet au lecteur de progresser dans un domaine où le bon sens chimique reste important face aux résultats mathématiques obtenus par ordinateur.

Nguyễn Trong Anh a été directeur de recherche au CNRS et professeur à l'École polytechnique. Quatrième de couverture

Ce manuel présente un outil quantique simple et très utile : la méthode des perturbations et sa version simplifiée, l'approximation des orbitales frontières, qui permettent de traiter rapidement les problèmes courants de structure et de réactivité. La première partie explique comment obtenir les orbitales frontières, soit par des logiciels d'orbitales moléculaires, soit par des calculs à la main. La deuxième traite les

applications classées d'après les questions que peut se poser le chimiste. Ainsi, les problèmes de réactivité sont classés en compétition entre deux réactifs, entre deux sites ou entre deux chemins d'approche. Chaque fois que possible, la relation des caractéristiques structurales (conformation et déformations géométriques, ect) aux ractivités chimiques est analysée. Parfaitement accessible au non-théoricien, l'ouvrage s'adresse à l'étudiant de fin de maîtrise. Très didactique, il détaille les explications, commente les étapes, signale les embûches et donne les solutions complètes d'une série d'exercices.

Download and Read Online Orbitales frontières : Manuel pratique Trong-Anh Nguyễn #YGM0AKI46WF

Lire Orbitales frontières : Manuel pratique par Trong-Anh Nguyễn pour ebook en ligne Orbitales frontières :  
Manuel pratique par Trong-Anh Nguyễn Téléchargement gratuit de PDF, livres audio, livres à lire, bons  
livres à lire, livres bon marché, bons livres, livres en ligne, livres en ligne, revues de livres epub, lecture de  
livres en ligne, livres à lire en ligne, bibliothèque en ligne, bons livres à lire, PDF Les meilleurs livres à lire,  
les meilleurs livres pour lire les livres Orbitales frontières : Manuel pratique par Trong-Anh Nguyễn à lire en  
ligne. Online Orbitales frontières : Manuel pratique par Trong-Anh Nguyễn ebook Téléchargement  
PDF Orbitales frontières : Manuel pratique par Trong-Anh Nguyễn Doc Orbitales frontières : Manuel pratique  
par Trong-Anh Nguyễn Mobipocket Orbitales frontières : Manuel pratique par Trong-Anh Nguyễn EPub  
**YGM0AKI46WFYGM0AKI46WFYGM0AKI46WF**