

PROGRAMME DE COLLES PC

SEMAINE 05 : 10 -14 octobre 2016

SEMAINE 06 : 17 octobre-4 novembre 2016

Modèle quantique de l'atome :

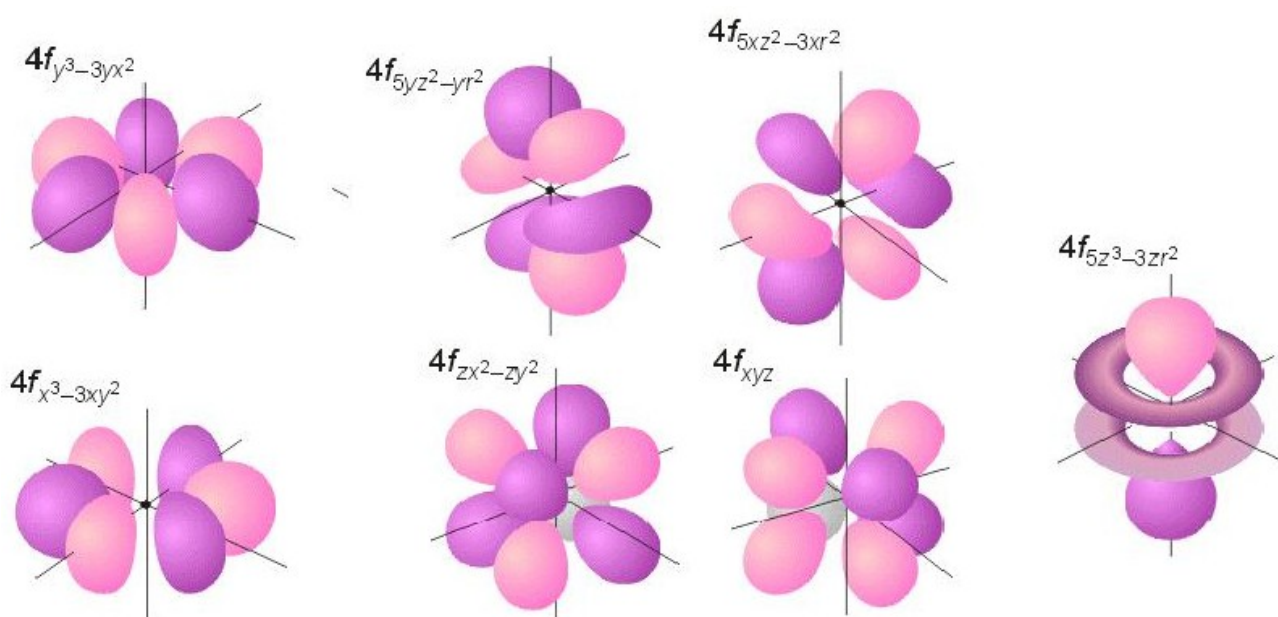
- Fonctions d'onde de l'atome d'hydrogène.
- Énergie et rayon associés à une orbitale atomique.
- Représentation graphique conventionnelle d'une orbitale atomique.
- Orbitales des atomes polyélectroniques ; énergie associée à une orbitale, dégénérescence des niveaux d'énergie.
- Notion de charge effective.

Orbitales moléculaires :

- Méthode de Combinaison Linéaire des Orbitales Atomiques.
- Interaction de deux orbitales atomiques sur deux centres
- Ordre de liaison dans les molécules diatomiques.
- Diagramme d'orbitales moléculaires : occupation, orbitales frontalières haute occupée et basse vacante, cas des entités radicalaires.
- Interaction d'orbitales de fragments

Réactivité : SEMAINE 06

- Prédiction de la réactivité : approximation des orbitales frontalières.



Orbitales f