

Sommaire

Voici la structure détaillée du livre, reconstituée à partir des sources disponibles :

Préface / Avant-propos

I. Rappels de mécanique quantique

L'équation de Schrödinger, fonction d'onde, opérateurs, interprétation probabiliste.

II. L'atome

Orbitales atomiques, atomes hydrogénoïdes, atomes polyélectroniques, spin.

III. La molécule : approche générale par les orbitales moléculaires

Principe de la méthode CLOA, critères de recouvrement, diagrammes d'orbitales moléculaires.

IV. Molécules diatomiques

Diagrammes OM des molécules homonucléaires et hétéronucléaires (H_2 , O_2 , N_2 , CO , HF , etc.).

V. Molécules polyatomiques : méthode de Hückel

Théorie de Hückel pour les systèmes π , orbitales π du butadiène, de l'hexatriène, du benzène.

VI. Analyse conformationnelle

Conformations privilégiées, barrières de rotation, interactions stériques, analyse des cyclohexanes.

VII. Aromaticité

Critères d'aromaticité, règle de Hückel ($4n+2$), antiaromaticité, systèmes hétéroaromatiques.

VIII. Effets électroniques

Effets inductifs, effets méso-mères (résonance), transfert de charge, influence sur la réactivité.

IX. Orbitales frontières et réactivité

Théorie de Fukui (HOMO/LUMO), contrôle orbitalaire, réactions de Diels-Alder, cycloadditions, réactions péricycliques, règles de Woodward-Hoffmann.

X. Applications à divers systèmes moléculaires

Études de cas et exemples concrets illustrant l'ensemble des concepts.

Index alphabétique