

Méthode des fragments

- * Quand on étudie des grosses molécules au lieu de repartir de zéro on utilise des morceaux que l'on connaît déjà, que l'on appelle fragments et on les fait interagir entre eux.
 - ↳ on peut les déterminer par la "Méthode de Hückel"

- * Cette méthode repose sur la théorie des groupes et des perturbations.
 - ↳ l'essentiel est de savoir s'en servir et de connaître les règles.

- * On utilise la théorie des groupes pour obtenir des orbitales de bonne symétrie et pour avoir leurs groupes de sym

- * La théorie des perturbations nous donne les énergies obtenues en faisant interagir les fragments

⇒ On peut s'en sortir qualitativement par deux ou trois interactions

$$\hookrightarrow \psi_A = \chi_A + \frac{P_{AB}}{E_A - E_B} \chi_B \quad \Delta E = \frac{P_{AB}^2}{E_A - E_B}$$

- ↳ cf "Interactions à 2 ON non dégénérées"

- ↳ cf "Interaction à 3 ON non dég"

* Règles pour la construction

- Seules les orbitales de valence interagissent
- n OA donnent n OM
- Seules les orbitales de même symétrie se recouvrent
- Un recouvrement axial est plus important qu'un latéral ($E_\sigma > E_\pi$)

⇒ Avoir des e^- partagés entre 2 fragments donne la liaison covalente