



**HAL**  
open science

## Apprendre la chimie avec les orbitales OrbiMol, une boîte à outils pédagogique

Patrick Chaquin, Franck Fuster, François Volatron

► **To cite this version:**

Patrick Chaquin, Franck Fuster, François Volatron. Apprendre la chimie avec les orbitales OrbiMol, une boîte à outils pédagogique. Le Bulletin de l'Union des Professeurs de Physique et de Chimie, 2018. hal-02356541

**HAL Id: hal-02356541**

**<https://hal.science/hal-02356541>**

Submitted on 8 Nov 2019

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

# Apprendre la chimie avec les orbitales

## OrbiMol, une boîte à outils pédagogique

par Patrick CHAQUIN, Franck FUSTER et François VOLATRON

Laboratoire de chimie théorique (LCT),  
Sorbonne Universités - Université Pierre et Marie Curie, Paris-VI  
CNRS UMR 7616 - 75005 Paris  
chaquin@lct.jussieu.fr  
fuster@lct.jussieu.fr  
volatron@lct.jussieu.fr

**O**N SE PROPOSE DE MONTRER L'INTÉRÊT pédagogique de la notion d'orbitale moléculaire dont le champ d'application s'est considérablement élargi avec la disponibilité d'une large base de données comme le site Internet OrbiMol. Après avoir rappelé les définitions et principales propriétés des orbitales canoniques, nous donnons quelques exemples de leur utilisation pour discuter de la structure électronique, de la réactivité chimique et d'autres propriétés physico-chimiques.

### INTRODUCTION

La chimie quantique a été d'abord introduite dans l'enseignement pour l'étude des systèmes conjugués par la méthode de Hückel. On commençait par en exposer la théorie, puis on calculait les orbitales moléculaires et on en déduisait des indices de liaison, des charges atomiques et des propriétés chimiques, souvent limitées aux réactions péricycliques. Récemment, un changement de perspective pédagogique s'est opéré : les caractéristiques quantiques des molécules peuvent être désormais considérées comme des données qu'il n'est plus nécessaire d'établir, au même titre que les constantes physiques ou les propriétés spectroscopiques. Cela permet leur exploitation en deuxième, voire première année post-bac, leur étude théorique étant reportée à un stade ultérieur du cursus. Elles constituent un précieux support pour le développement du *raisonnement* en chimie, au-delà ou à côté du paradigme classique des représentations de Lewis et de la mésomérie. Ceci implique que ces données soient disponibles, avec des échantillons suffisamment riches, ou calculables avec des logiciels aisément accessibles et utilisables<sup>(1)</sup>. Dans ces conditions, leur champ d'application s'est considérablement élargi et nous souhaitons ici donner un aperçu de son extension.

(1) Pour la méthode de Hückel, signalons le site Hulis : <http://www.hulis.free.fr/> (téléchargement ou calculs en ligne).

L'élément de base de la chimie quantique est l'orbitale atomique (OA) ou l'orbitale moléculaire (OM). Dans une première partie, nous en rappellerons les caractéristiques utiles en lien avec des propriétés chimiques et physiques observables, puis nous présenterons la base de données *OrbiMol*. Ensuite, nous montrerons quelques exemples classiques ou moins connus d'exploitation de ces données.

## 1. LES ORBITALES MOLÉCULAIRES (OM) : DÉFINITION ET PROPRIÉTÉS

### 1.1. Définition

L'orbitale est une fonction décrivant l'état d'un électron dans un environnement donné<sup>(2)</sup>. Elle a été introduite par une méthode de résolution approchée de l'équation de Schrödinger. Une deuxième approximation consiste à l'exprimer sous la forme d'une combinaison linéaire d'un nombre fini de fonctions centrées sur les noyaux (la base, généralement constituée de gaussiennes), plus ou moins semblables aux orbitales atomiques. Les orbitales calculées par la méthode de Hartree-Fock, sous la forme « *ab initio* » ou « semi-empirique » sont appelées « orbitales canoniques »<sup>(3)</sup>. Dans la suite, il sera question, pour les molécules organiques, des orbitales obtenues par la méthode Austin Method 1 (AM1) [2] disponibles sur le site *OrbiMol*<sup>(4)</sup>.

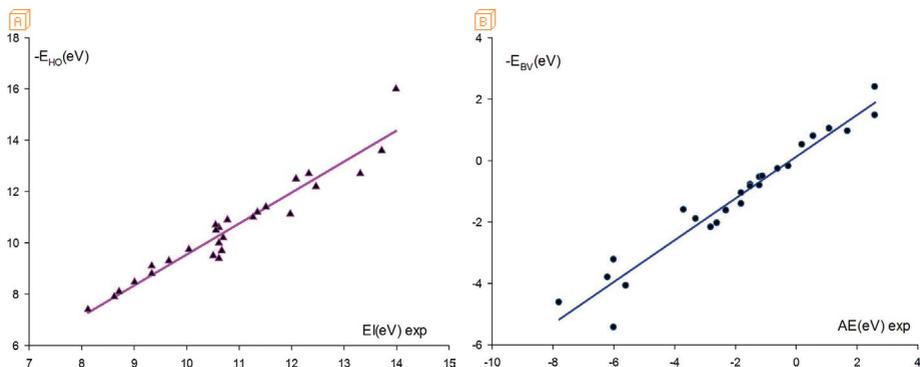
### 1.2. Énergies orbitales

Une propriété fondamentale, pour le chimiste, des orbitales canoniques, résulte du théorème de Koopmans : l'énergie d'un électron dans une orbitale est approximativement égale à l'opposé de son énergie d'ionisation. En particulier, l'énergie de l'orbitale moléculaire d'énergie la plus élevée (HO ou HOMO) donne approximativement l'énergie de première ionisation et caractérise le pouvoir donneur d'électron, donc la nucléophilie (cf. figure 1A, page ci-contre). Les orbitales vacantes n'ont pas de signification physique immédiate, mais l'énergie de l'orbitale moléculaire vacante la plus basse (BV ou LUMO) est empiriquement corrélée à l'opposé de l'affinité électronique et constitue un critère relatif d'électrophilie (cf. figure 1B, page ci-contre). Ceci confère une importance particulière aux orbitales frontalières HO et BV.

(2) Les notions évoquées dans ce paragraphe sont détaillées dans le document en ligne *Pratique de la chimie théorique* : <http://www.lct.jussieu.fr/pagesperso/chaquin/>

(3) D'autres orbitales peuvent être définies, avec des propriétés différentes (cf. article d'Aurélien Moncomble et Vincent Tognetti [1]).

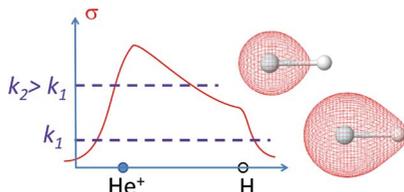
(4) Patrick Chaquin et Franck Fuster : <http://www.lct.jussieu.fr/pagesperso/orbimol/fr/index-fr.shtml>



**Figure 1 - (A)** Corrélation de l'énergie de la HO avec l'énergie d'ionisation expérimentale **(B)** Corrélation de l'énergie de la BV avec l'affinité électronique expérimentale (échantillon d'une trentaine de molécules organiques et inorganiques).

### 1.3. Représentation graphique

On représente graphiquement les orbitales par une surface d'équivaler absolue de la fonction  $\Psi$  (qui est aussi une isodensité  $\Psi^2 = \text{cste}$ ), avec deux couleurs différentes indiquant ses changements de signe dans les diverses régions de l'espace. Comme seul le carré de la fonction a un sens physique (la densité électronique), la valeur de ce signe est indifférente. Cette représentation graphique indique la localisation de l'électron. Il peut être utile de faire varier l'isovaleur  $k$  (« cutoff ») pour distinguer les localisations secondaires de la localisation principale. La figure 2 montre la variation de la fonction d'onde  $\sigma$  le long de l'axe moléculaire du cation  $\text{HeH}^+$ . Avec un cutoff  $k_1$  faible, on obtient une isodensité qui englobe les deux noyaux (quand  $k$  tend vers zéro, l'isodensité tend à occuper tout l'espace) ; avec un cutoff  $k_2 > k_1$ , on met en évidence le fait que les deux électrons sont plus fortement localisés au voisinage du noyau d'hélium.



**Figure 2** - Isosurfaces de l'orbitale  $\sigma$  de  $\text{HeH}^+$  avec deux valeurs  $k_1$  et  $k_2$  du cutoff.

Le site de localisation principale de la HO indique le site le plus nucléophile et celui de la BV le site le plus électrophile.

La structure de l'orbitale indique qualitativement son caractère liant/non liant/antiliant. En adoptant une définition de la liaison chimique fondée sur le concept de

force [3], on peut dire que la présence d'électrons dans la région internucléaire exerce sur les noyaux une force attractive (orbitale liante). En présence d'un élément nodal coupant la liaison, la densité électronique est transférée de la région attractrice vers des régions extérieures au segment internucléaire, répulsives, et l'orbitale moléculaire est antiliante.

#### 1.4. Charges atomiques

Une autre donnée utile en chimie est celle de « charges atomiques » calculées selon la méthode de Mulliken<sup>(5)</sup>. L'évaluation de charges atomiques implique toujours une part d'arbitraire dans leur attribution à un noyau d'électrons répartis sur l'ensemble de la molécule, et la méthode de Mulliken peut être critiquée. Néanmoins, elle fournit en général des données ayant une valeur comparative dans une série homogène de calculs.

Ainsi, parmi les caractéristiques orbitales, certaines ont un fondement théorique, d'autres sont en partie tributaires de résultats empiriques, requérant qu'ils soient obtenus par la même méthode de calcul. C'est pourquoi il est utile de disposer d'une base de données répondant à ce critère d'homogénéité.

## 2. LA BASE DE DONNÉES *OrbiMol*

Ce site Internet compte actuellement plus de sept cents atomes, molécules, radicaux et ions. Leur majorité donne la structure et les orbitales moléculaires de molécules organiques et inorganiques, avec quelques composés d'éléments de transition. Le niveau de calcul semi-empirique AM1 a été généralement utilisé pour les composés des éléments du groupe principal (les méthodes de calcul sont indiquées dans le menu *Précisions techniques*). D'autres rubriques donnent : les éléments de symétrie de molécules appartenant aux principaux groupes, les modes de vibration (en animation) d'une cinquantaine de molécules, des données relatives aux diagrammes de Walsh. Comme la méthode tient compte des énergies d'interactions électroniques, les énergies orbitales dans le vide varient énormément d'une espèce neutre à un ion, cette dernière étant inadaptée aux conditions expérimentales habituelles. C'est pourquoi nous avons fait figurer également des résultats pour des ions en solution avec un « modèle de solvant ».

L'interface graphique JSMol est utilisée pour représenter les structures et les orbitales. *OrbiMol* présente de nombreuses options graphiques ; l'exportation des images est possible dans divers formats et résolutions. Une sortie permettant l'impression 3D de l'orbitale moléculaire affichée est également disponible.

(5) Sur le calcul des charges de Mulliken (cf. chapitre 4 du document en note 2).

### 3. EXEMPLES D'APPLICATIONS

Nous présentons maintenant quelques exemples d'applications à l'étude de la structure et à la réactivité en chimie organique<sup>(6)</sup> et inorganique.

#### 3.1. Hyperconjugaison, effets de substituant

L'orbitale HO du propène permet de visualiser cette « conjugaison » d'un type particulier, tout en illustrant l'utilité d'un cutoff  $k$  variable (cf. figure 3).

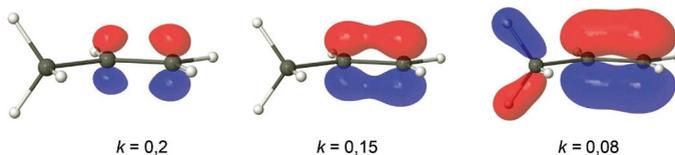


Figure 3 - HO du propène pour différentes valeurs du cutoff  $k$ .

Avec  $k = 0,2$ , on voit que cette orbitale est constituée d'une combinaison en phase des OA 2p des carbones, polarisée sur le carbone non substitué ; avec  $k = 0,15$  la présence d'électrons dans la région internucléaire révèle le caractère liant de cette orbitale moléculaire ; enfin, avec  $k = 0,08$  on voit la localisation secondaire sur deux CH de  $\text{CH}_3$ . Enfin, l'énergie de cette orbitale moléculaire ( $-10,0$  eV), supérieure à celle de l'éthylène ( $-10,6$  eV) indique que le méthyle est donneur d'électrons vis-à-vis de  $\text{C}=\text{C}$ . Plus généralement, la comparaison de l'énergie de la HO d'un substrat avec ou sans substituant permet de déterminer l'effet global donneur/attracteur de ce dernier, information précieuse quand ce substituant présente des effets antagonistes, ce qui est presque toujours le cas. Par exemple,  $\text{O}-\text{CH}_3$  est  $\sigma$  (inductif) attracteur (en raison de l'électronégativité de l'oxygène) et  $\pi$  (mésomère) donneur. L'énergie de la HO ( $-9,4$  eV) de  $\text{CH}_2 = \text{CH}-\text{OCH}_3$  montre qu'il est globalement donneur, et plus donneur que  $\text{CH}_3$ .

#### 3.2. Réactivité en chimie organique : quelques principes généraux

Nous avons vu que les énergies des HO et BV, dont quelques-unes sont reportées en figure 4 (cf. page ci-après), sont un indice d'électrophilie et de nucléophilie relatives. L'ordre des énergies des HO des nucléophiles correspond assez bien à la nucléophilie expérimentale, à condition que celle des espèces anioniques soit calculée en solution.

(6) La plupart des exemples sont extraits de l'ouvrage de Patrick Chaquin et François Volatron [4].

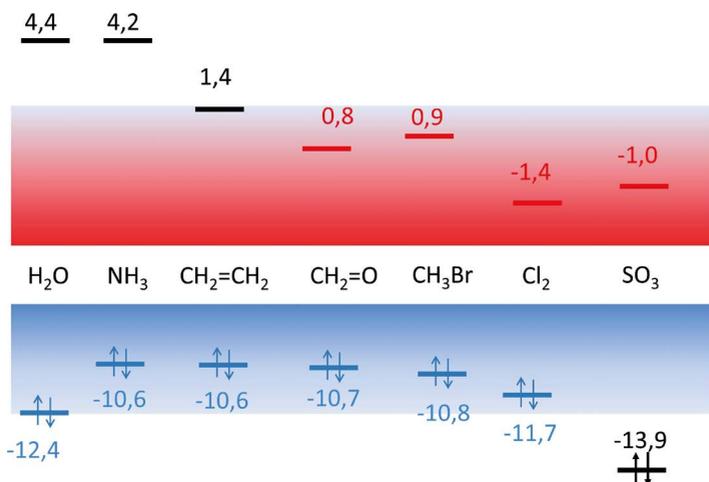


Figure 4 - Énergie (en eV) des orbitales frontalières de quelques électrophiles (zone rouge) et nucléophiles (zone bleue).

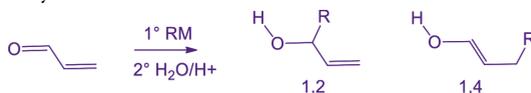
Une réaction électrophile-nucléophile débute par un transfert partiel d'électron du nucléophile  $N$  à l'électrophile  $E$ . Il est d'autant plus efficace que l'écart  $HO(N) - BV(E)$  est faible. Mais pour que ce transfert se produise, il faut qu'il existe un « corridor de potentiel » entre le donneur et l'accepteur : c'est le recouvrement, caractérisé par l'intégrale  $S = \int_{esp} \Psi_{HO(N)} \Psi_{BV(E)} d\nu$ , maximale quand les plus « gros » lobes des deux orbitales frontalières s'approchent l'un de l'autre. C'est ce type d'interaction orbitale qui prédomine généralement. Il existe cependant un autre type d'interaction, purement électrostatique, entre sites chargés, qui renforce le plus souvent le terme orbitaire, mais peut cependant entrer en conflit avec lui.

### 3.3. La substitution nucléophile $S_N2$ des halogénoalcane : une réaction sous contrôle orbitalaire

Dans l'interprétation classique de la réactivité des halogénoalcane selon le mécanisme  $S_N2$ , on invoque souvent la polarisation de la liaison  $C-X$  selon  $C(\delta+) - X(\delta-)$  au motif que  $X$  est plus électronégatif que  $C$ . C'est vrai, en effet pour  $F, Cl, Br$ . Mais l'électronégativité de l'iode est très proche de celle du carbone : sa charge dans  $ICH_3$  est pratiquement nulle, alors que ce composé est le plus réactif de la série. À l'inverse,  $CH_3F$ , le plus polarisé, est pratiquement inerte. Cette évolution se comprend cependant au simple examen de l'énergie de l'orbitale moléculaire  $\sigma_{C-X}^*$  responsable du caractère électrophile de ces espèces : 3,9 eV ( $F$ ), 1,6 eV ( $Cl$ ), 0,9 eV ( $Br$ ) et 0,5 eV ( $I$ ). D'autres facteurs de réactivité sont également interprétables en termes orbitaires (cf. *infra*).

### 3.4. Addition d'organométalliques aux carbonyles conjugués : compétition contrôle orbitalaire-contrôle de charges

Un exemple classique de cette situation est la réaction d'organométalliques R-M sur les aldéhydes ou cétones conjuguées, pour laquelle deux régioisomères peuvent être attendus après hydrolyse :



La BV du propénal a une énergie de  $-0,14$  eV : c'est un électrophile (cf. figure 4, page ci-contre). On voit figure 5 que l'interaction orbitalaire avec  $R^-$  tend à favoriser une addition 1,4 (plus grand coefficient sur le carbone terminal) tandis que l'interaction électrostatique tend à favoriser une addition 1,2 (plus forte charge positive du carbone de C=O). Avec les organométalliques  $CH_3-Li$ ,  $CH_3-MgBr$  et  $(CH_3)_2CuLi$ , la charge du carbone de  $CH_3$  est de moins en moins négative dans cet ordre comme l'électronégativité du métal croît. Ainsi,  $CH_3Li$  ( $q = 0,59$ ) donne une addition 1,2, sous contrôle des charges,  $(CH_3)_2CuLi$  ( $q = 0,34$ ) une addition 1,4, sous contrôle orbitalaire et  $CH_3-MgBr$  ( $q = 0,43$ ) un mélange des régioisomères.

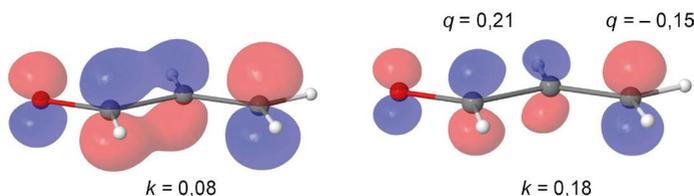


Figure 5 - BV du propénal. Une valeur élevée du cutoff  $k$  permet de visualiser plus aisément la localisation principale sur le carbone terminal.

### 3.5. Polarisabilité et orbitales moléculaires

La polarisabilité, élément important de la réactivité, peut être reliée aux énergies orbitales. Considérons un modèle diatomique (cf. figure 6, page ci-après) comportant une liaison caractérisée par les orbitales moléculaires  $\sigma_0$  et  $\sigma_0^*$ . Ces orbitales moléculaires sont sans interaction en l'absence d'une perturbation (elles sont orthogonales), mais en présence d'une charge ou d'un champ extérieur qui brise la symétrie, elles se mélangent de façon à stabiliser le système. Dans le cas de la figure 6, ce mélange  $\sigma_0 + \lambda \sigma_0^*$  se traduit par une polarisation avec apparition d'une charge négative à l'extrémité de la molécule proche de la charge positive perturbatrice. D'après la théorie des perturbations, l'importance de ce mélange, donc la valeur de  $\lambda$ , est inversement proportionnelle à l'écart énergétique  $\sigma - \sigma^*$ . Plus généralement, l'écart HO-BV est une

mesure de la dureté absolue ( $\eta$ ), notion liée, en particulier, à la polarisabilité moléculaire<sup>(7)</sup>.

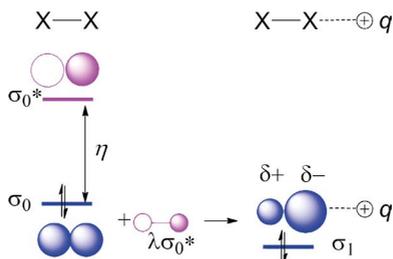


Figure 6 - Mécanisme de la polarisation d'une liaison sous l'effet d'une perturbation extérieure.

Les molécules  $\text{Cl}_2$  et  $\text{Br}_2$ , bien que neutres et non polarisées sont des électrophiles. Mais leurs BV  $\sigma^*$  sont à la même énergie ( $-1,5$  eV), alors que  $\text{Br}_2$  est nettement plus réactif que  $\text{Cl}_2$ . Ceci s'interprète par sa polarisabilité supérieure comme l'indiquent les valeurs respectives de l'écart  $\sigma - \sigma^*$  :  $14,4$  eV pour  $\text{Br}_2$  et  $15,6$  eV pour  $\text{Cl}_2$ . Par ailleurs, la structure de ces orbitales moléculaires montre (cf. figure 7) que les sites électrophiles sont situés de part et d'autre de la liaison, ce qui explique l'attaque perpendiculaire au plan du substrat lors de l'addition électrophile aux alcènes, ainsi que la structure des complexes benzène-diiodé.

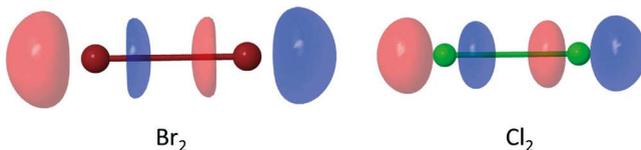
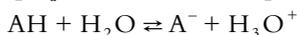


Figure 7 - BV de  $\text{Br}_2$  et  $\text{Cl}_2$ .

En revenant à la réactivité  $\text{S}_{\text{N}}2$  des halogénométhanés, l'écart  $\sigma - \sigma^*$  passe de  $20,3$  eV pour  $\text{CH}_3\text{F}$  à  $13,4$  pour  $\text{CH}_3\text{I}$ , qui correspond à une variation de la polarisabilité (expérimentale) d'un facteur 9. Cet écart est aussi corrélé à l'énergie de dissociation de la liaison  $\text{C} - \text{X}$  qui passe de  $484$  kJ/mol pour  $\text{CH}_3\text{F}$  à  $238$  kJ/mol pour  $\text{CH}_3\text{I}$ .

### 3.6. Acidité et charges atomiques

L'acidité, mesurée par le  $\text{p}K_{\text{a}}$  est reliée à l'enthalpie libre  $\Delta_r G^\circ$  de l'équilibre :



(7) Sur les notions d'électronégativité et de dureté absolues, voir [5].

Si on considère une série d'acides de type  $R-OH$ , on convient généralement que le terme le plus important dans l'influence de  $R$  sur le  $pK_a$  est son effet plus ou moins stabilisant de l'ion  $RO^-$ . L'acidité de  $ROH$  est donc supposée augmenter avec l'effet attracteur de  $R$ . Or, cet effet est bien évalué par la charge de Mulliken de l'hydrogène dans la forme acide  $ROH$  : plus  $R$  est attracteur et plus la charge  $q_H$  augmente. On observe en effet une bonne corrélation entre  $q_H$  et le  $pK_a$ , comme le montre la figure 8 sur un échantillon de douze acides  $R'-CO_2H$ , cinq phénols et trois alcools (le point le plus éloigné de la droite de corrélation correspond au 2,3,5-trinitrophénol).

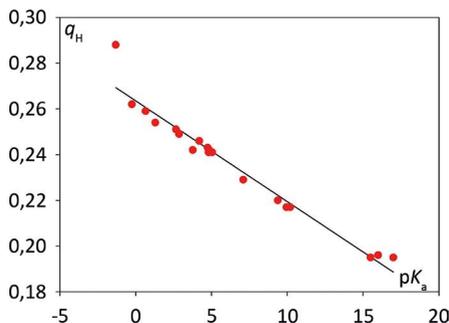


Figure 8 - Corrélation entre le  $pK_a$  de vingt composés  $R-OH$  et la charge de Mulliken  $q_H$ .

Il faut préciser que cette corrélation ne s'observe que dans une famille d'acides impliquant la rupture d'une même liaison, ici  $OH$ .

### 3.7. Les complexes des métaux de transition dans *OrbiMol*

La base de données *OrbiMol* est moins développée pour les complexes des métaux de transition que pour les molécules organiques. Cela est dû, entre autres raisons, au fait que les métaux de transition ne sont pas paramétrés dans la méthode AM1. De plus, de nombreux complexes possèdent plusieurs charges, positives ou négatives, ce qui rend les comparaisons difficiles. Aussi, les résultats sur ces composés sont principalement utilisés comme illustration d'un cours plutôt que comme outil prédictif.

À titre d'exemple, on trouve que les trois orbitales non liantes d'un complexe  $ML_5(CO)$  se séparent en deux groupes : deux orbitales moléculaires sont stabilisées par rétro-donation mettant en jeu les orbitales  $\pi^*_{CO}$  du carbonyle, et une orbitale moléculaire qui est purement  $d$ , située à une énergie supérieure (cf. figure 9, page ci-après).

La forme des orbitales moléculaires du bloc  $d$  du chrome-dibenzène (cf. figure 10, page ci-après) illustre également ce qui est prédit à l'aide de la théorie des groupes [6]. L'élargissement de la base à de nombreux complexes de métaux de transition est en cours.

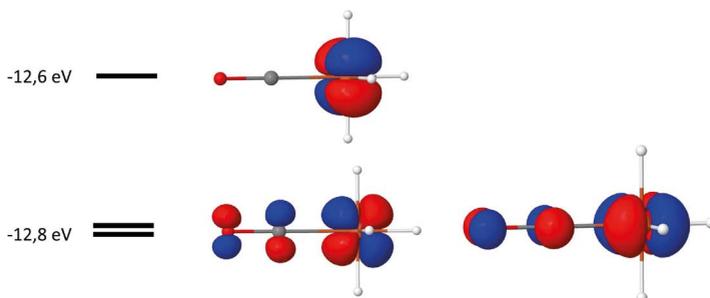


Figure 9 - Rétrodonation dans un complexe modèle  $ML_5CO$ .

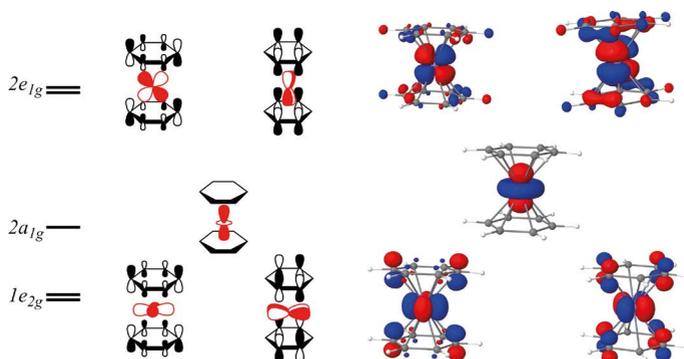


Figure 10 - Le « bloc  $d$  » du chrome-dibenzène.

## CONCLUSION

La donnée des orbitales d'une molécule permet d'interpréter nombre de ses caractéristiques physico-chimiques. La réactivité des principales fonctions organiques peut être discutée en première approche sur le seul critère des orbitales frontalières, outil de choix d'étude des interactions électrophile-nucléophile. Mais nous pensons avoir aussi montré que leur pouvoir explicatif ou interprétatif s'étend bien au-delà, sans compter d'autres propriétés que les limites de cet exposé ne nous ont pas permis d'aborder : réactivité radicalaire, stabilités relatives d'intermédiaires de réaction, effet de substituants sur l'absorption UV-Visible... Bien entendu, compte tenu des approximations implicites de la chimie orbitalaire, on ne peut obtenir que des résultats qualitatifs, ou au mieux semi-quantitatifs, mais ils représentent, par rapport aux descriptions de Lewis et de la mésomérie, un approfondissement dont il serait dommage de se priver.

## BIBLIOGRAPHIE

- [1] A. Moncomble et V. Tognetti, « Les multiples visages des orbitales moléculaires », *Bull. Un. Prof. Phys. Chim.*, vol. 110, n° 987, p. 1139-1165, octobre 2016.
- [2] M. J. S. Dewar, E. G. Zoebisch, E. F. Healy, J. J. P. Stewart, "AM1: a new general purpose quantum mechanical molecular model", *J. Am. Chem. Soc.*, 107(13), p. 3902-3909, 1985.
- [3] P. Chaquin, C. Gutlé et P. Reinhardt, « Liaison(s) chimique(s) : forces ou énergie ? En tout cas, électrostatique ! », *L'Actualité Chimique*, n° 384, p. 29-37, avril 2014.
- [4] P. Chaquin et F. Volatron, *Chimie organique : une approche orbitale*, DeBoeck, 2015.
- [5] P. Chaquin, « Électronégativité absolue, dureté absolue et orbitales frontalières : des repères théoriques et expérimentaux pour la chimie moléculaire », *L'Actualité Chimique*, n° 303, p. 44-51, décembre 2006.
- [6] F. Volatron et P. Chaquin, *La théorie des groupes en chimie*, De Boeck, 2017.

### Chimie quantique

- ◆ C. Leforestier, *Introduction à la chimie quantique*, Paris : Dunod, 2005.
- ◆ J.-L. Rivail, *Éléments de chimie quantique à l'usage des chimistes*, Paris : InterÉditions-CNRS Éditions, 2<sup>e</sup> édition, 1999.

### Chimie orbitale

- ◆ P. Chaquin et F. Volatron, *Chimie organique : une approche orbitale*, De Boeck, 2015.
- ◆ T. A. Albright, J. K. Burdett and M.-H. Whangbo, *Orbital Interactions in Chemistry*, New York : John Wiley & Sons, 1985.
- ◆ N. T. Anh, *Orbitales frontalières*, Paris : InterÉditions-CNRS Éditions, 1995.
- ◆ P. Chaquin, *Manuel de chimie théorique : applications à la structure et la réactivité moléculaires*, Paris : Ellipses, 2000.
- ◆ I. Fleming, *Molecular Orbitals and Organic Chemical Reactions*, New-York : John Wiley & Sons, 2009.
- ◆ P. Hiberty and N. T. Anh, *Introduction à la chimie quantique*, École Polytechnique, 2008.
- ◆ Y. Jean et F. Volatron, *Structure électronique des molécules - Tome 1 : De l'atome aux molécules simples ; Tome 2 : Géométrie, réactivité et méthode de Hückel*, Édisciens, Paris (1994), 3<sup>e</sup> édition, Paris : Dunod, 2003.

- ◆ A. Rauk, *Orbital Interaction Theory of Organic Chemistry*, New York : John Wiley & Sons, 2<sup>nd</sup> edition, 2001.



**Patrick CHAQUIN**

*Professeur émérite*

Laboratoire de chimie théorique (LCT)  
Université Pierre et Marie Curie (UPMC)  
Paris



**Franck FUSTER**

*Maître de conférences*

Laboratoire de chimie théorique (LCT)  
Université Pierre et Marie Curie (UPMC)  
Paris



**François VOLATRON**

*Directeur de recherches CNRS*

Laboratoire de chimie théorique (LCT)  
Université Pierre et Marie Curie (UPMC)  
Paris