

Dénombrement d'interactions entre atomes

En [mécanique moléculaire](#), on utilise souvent des [champs de force](#) privilégiant les interactions par paires, qui permettent de calculer des énergies configurationnelles comportant des contributions d'interactions entre atomes liés (énergies liées aux variations de la longueur de liaison et de l'angle entre deux liaisons consécutives) et entre atomes non liés.

Molécule cyclique et interactions

Énoncé

- On considère une molécule cyclique comprenant n atomes discernables (ils peuvent être d'éléments différents), qu'on numérotera de 1 à n .
- Représenter des situations pour n entre 5 et 12 en discernant les interactions entre atomes liés et atomes non liés.
- À partir de relations combinatoires (arrangements ou combinaisons), dénombrer les nombres de ces interactions. Démontrer que le nombre d'interactions entre atomes non liés vaut $\frac{n(n-5)}{2}$

From:

<https://dvillers.umons.ac.be/wiki/> - **Didier Villers, UMONS - wiki**

Permanent link:

https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:exos:interactions_atomes

Last update: **2014/08/29 10:29**

