

التصحيح النموذجي لامتحان مقياس اعمال تطبيقية نمذجة جزيئية

EXERCICE1 (6points) :

1. Définissez la modélisation moléculaire

عرف النمذجة الجزيئية

La modélisation implique l'utilisation des méthodes de calcul théoriques permettant de déterminer la représentation graphique de la géométrie ou de la configuration des atomes d'une molécule et d'évaluer les propriétés physico-chimiques de la molécule étudiée. Elle consiste à construire des modèles des molécules ou d'ensemble de molécules, dans le but de mieux en comprendre la structure et les autres propriétés physico-chimiques. (2points)

2. Classez les méthodes de la modélisation moléculaire

صنف طرق النمذجة الجزيئية (2points)

- La mécanique moléculaire.
- Les méthodes quantiques.
- La dynamique moléculaire.

3. Citez trois logiciels utilisés pour la modélisation moléculaire

اذكر ثلاثة برامج مستخدمة في النمذجة الجزيئية

HyperChem, PubChem, Chem 3D (3points)

EXERCICE2 : Répondez par vrai ou faux (6points)

1. La méthode de Hückel ne prend en compte que les électrons π . Vrai (1points)

طريقة Hückel تأخذ في الاعتبار فقط الإلكترونات من نوع π

2. Les méthodes de champ auto-cohérent prennent en compte les électrons σ . Vrai (1points)

طريقة "champ auto-cohérent" تأخذ بعين الاعتبار الإلكترونات من نوع σ

3. La méthode de la modélisation basées sur la fonctionnelle de la densité (DFT) utilise une expression de l'énergie électronique E en fonction du temps. Faux (1points)

طريقة النمذجة الوظيفية للكثافة (DFT) تعتمد على عبارة الطاقة الإلكترونية بدلالة الزمن

4. La technique de mécanique moléculaire est basée sur l'utilisation de champs des forces. Vrai (1points)

تعتمد تقنية الميكانيكا الجزيئية على استخدام حقل القوى

5. La technique de mécanique moléculaire calcule l'énergie des atomes et non plus des électrons. Vrai (1points)

تحسب تقنية الميكانيكا الجزيئية طاقة الذرات وليس طاقة الإلكترونات

6. La dynamique moléculaire calcule les mouvements des molécules, le plus souvent à partir des énergies de la mécanique quantique. Faux (1points)

تحسب الديناميك الجزيئية حركات الجزيئات، غالبًا من طاقات ميكانيكا الكم

EXERCICE3 : (8points)

1. Définissez les termes HOMO et LUMO (3points)

HOMO et LUMO عرف مصطلحي

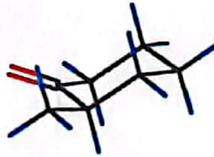
HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) traduit le caractère électro- donneur (nucléophile) de la molécule plus l'énergie de cette OM est élevé plus la molécule cédera facilement les électrons.

LUMO (Lowest unoccupied molecular orbital) traduit le caractère electro -accepteur (électrophile) de la molécule plus l'énergie de cette OM est faible plus la molécule acceptera facilement des électrons.

2. Nommez le mode de représentation graphique de la molécule suivante (2points)



Boule et bâtons



Bâtons



Compact

3. Citez les étapes essentielles suivies pour calculer l'énergie de formation d'une molécule en utilisant le logiciel Hyperchem (3points)

اذكر الخطوات الأساسية المتبعة لحساب طاقة تكوين الجزيء باستخدام برنامج Hyperchem

- Dessin de la molécule en appuyant sur "**Draw**":
- Ajout des atomes des hydrogènes et l'obtention de la structure 3D en appuyant sur "add hydrogen and model build"
- Le choix de type de l'optimisation via Semi-empirical en appuyant sur 'Setup'
- Lancement de l'optimisation de la structure avec " **Géométrie optimization**" via **compute**
- Lorsque apparait "Yes" clic "**Compute**" puis "**Propreities**" on trouve un tableau contient tous les termes énergétiques.