

# SIMULATEUR DE MOLÉCULES COULOMBIQUES

## Manuel de fonctionnement

CHM-1000

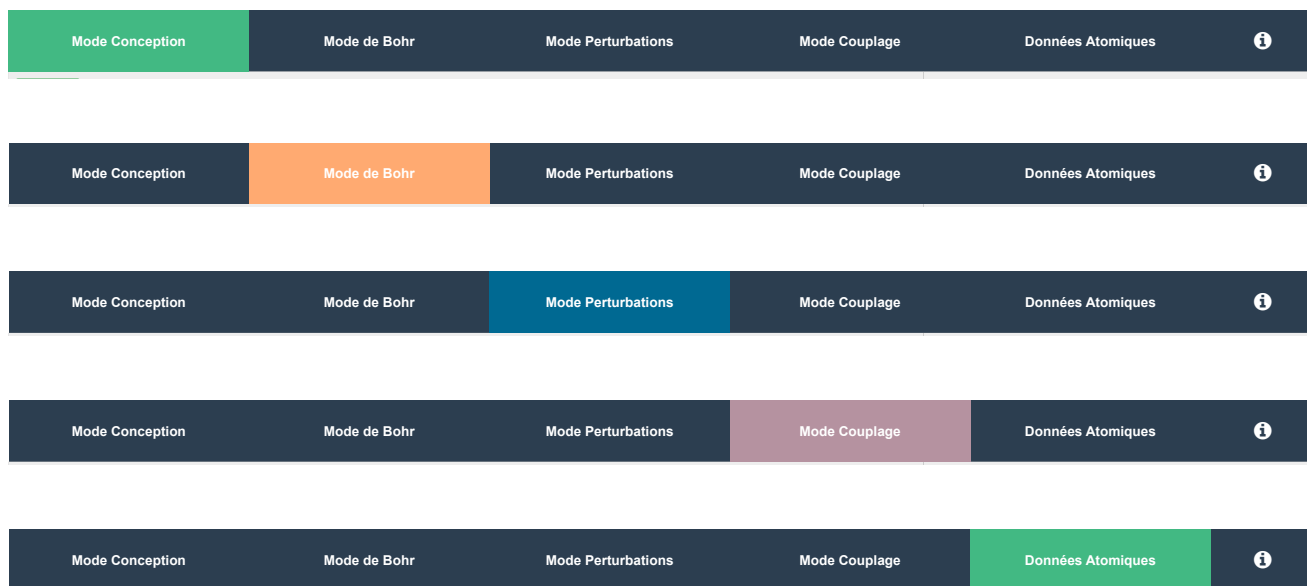
Christophe Bolduc  
Jesse Greener

Département de Chimie  
Université Laval

# Contenu

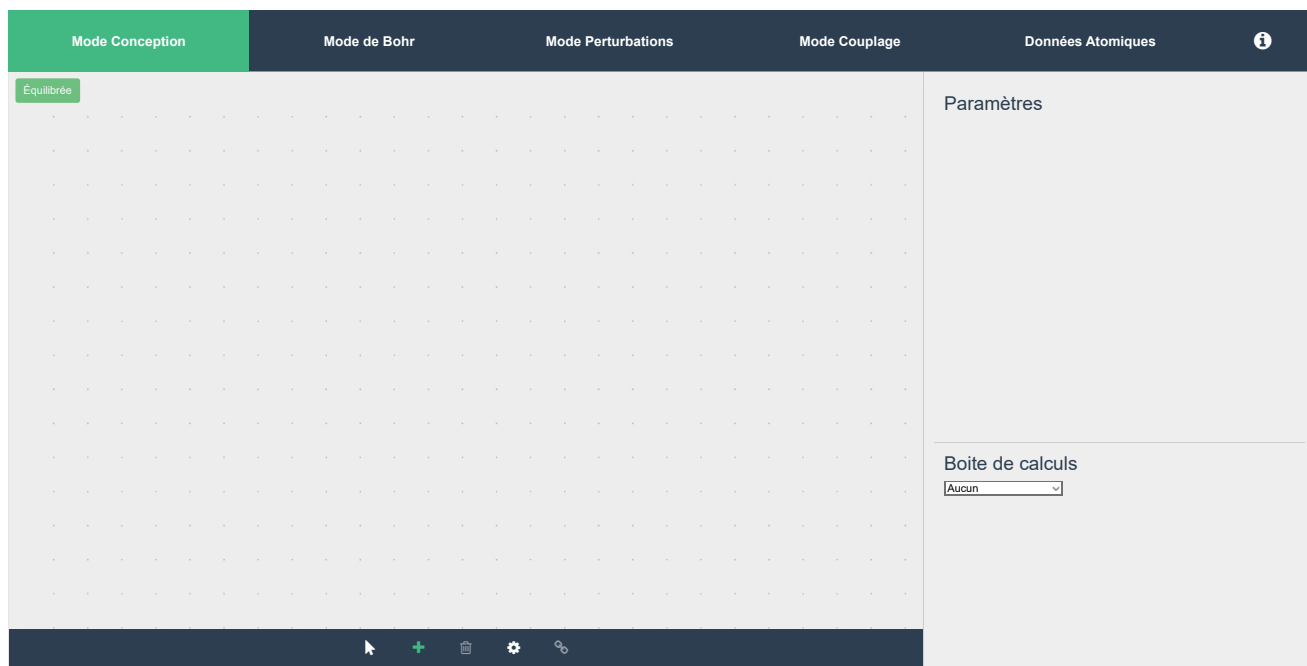
Barre de navigation	3
Mode Conception	4
Mode de Bohr	10
Mode Perturbations	13
Mode Couplage	17
Données Atomiques	19

# Barre de navigation



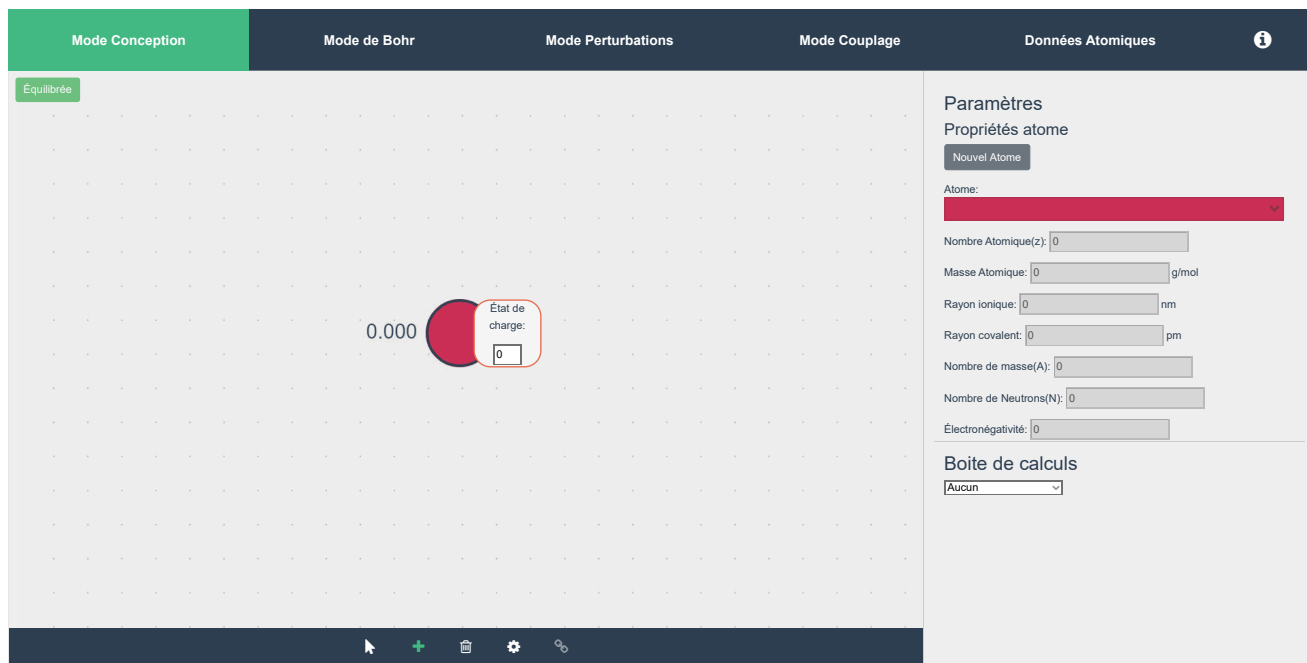
La barre de navigation permet d'accéder aux différents modes du simulateur. Chacun de ces modes est présenté dans ce document. L'icône d'interrogation permet d'accéder au présent document. Chacun des quatre modes a sa couleur caractéristique.

# Mode Conception

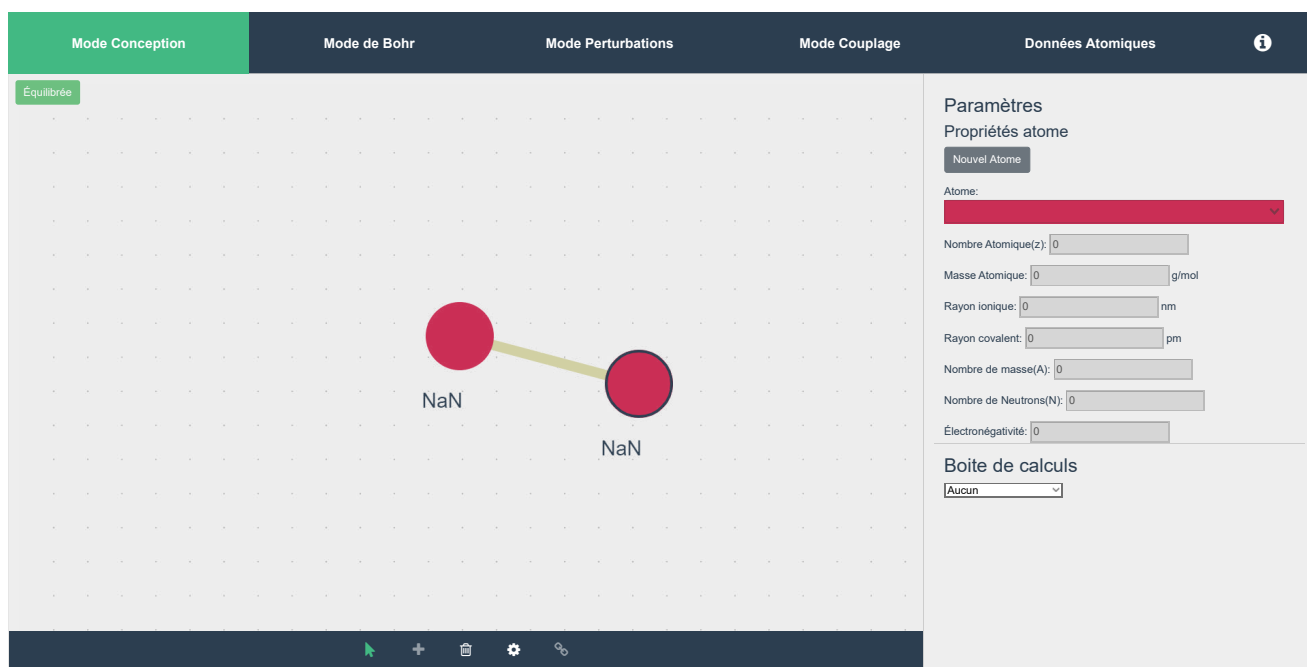


Le mode conception permet de créer la molécule à analyser. La fenêtre comportant le quadrillé représente l'interface graphique où l'utilisateur peut placer et interagir avec les atomes. Une barre d'outils est également disponible au bas pour définir le type d'interaction avec l'interface. La section "Paramètres" permet d'observer et de modifier les paramètres d'une molécule ou d'une liaison entre deux atomes. La sous-fenêtre "Boîte de calculs" affiche la formule, le développement et la réponse à un calcul sélectionné.

L'ajout de molécule s'effectue par l'interface graphique du mode conception.



En sélectionnant l'outil ajouter (représenté par un + dans la barre d'outils) et en cliquant sur l'interface, un atome est ajouté. Une fenêtre permet de modifier l'état de charge de la molécule. Cette option n'est disponible que lorsqu'une seule molécule est présente sur l'interface et est accessible en double cliquant l'atome.



Cliquer une seconde fois sur l'interface avec l'outil ajouter crée une seconde molécule et une liaison Centre les deux. Puisque le nombre maximum d'atomes est atteint, l'outil est automatiquement changé pour sélection et l'outil ajouter est indisponible.

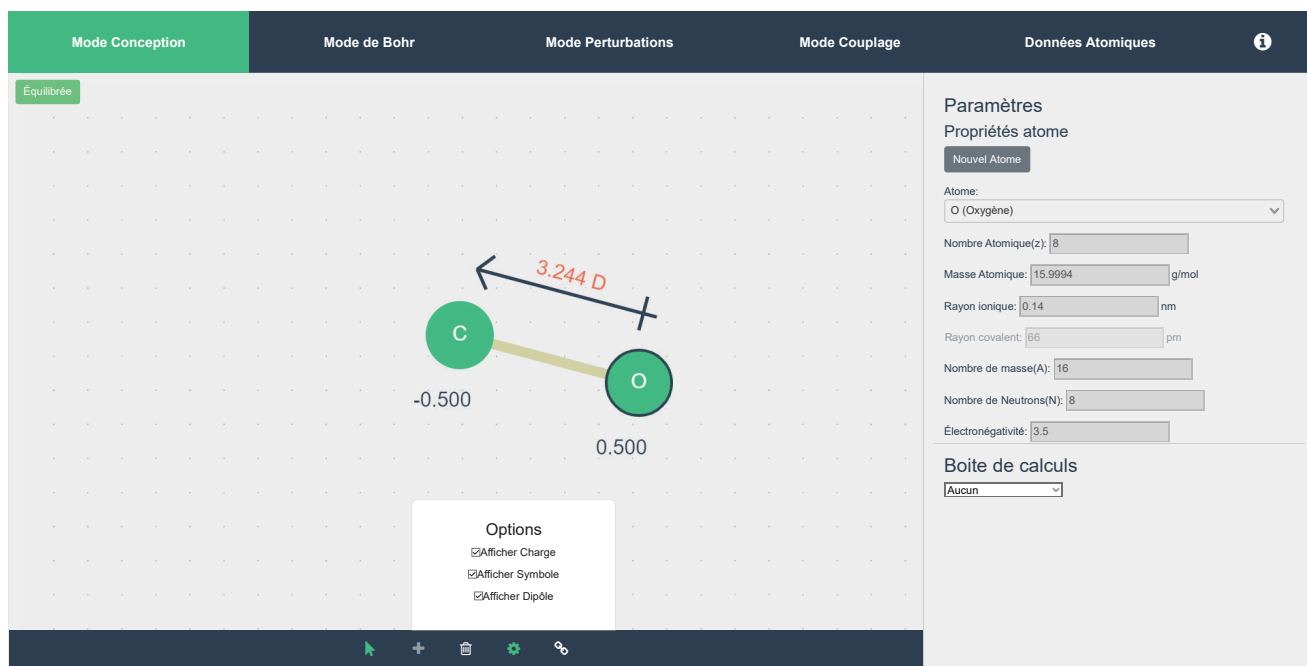
Les atomes ajoutés sont en rouge pour indiquer qu'ils ne sont pas définis. Pour définir un atome, il doit être sélectionné en cliquant sur celui-ci avec l'outil sélection, puis, dans la fenêtre paramètres, un atome prédéfini peut-être sélectionner ou un nouvel atome peut être défini avec le bouton "Nouvel Atome".

Les atomes, maintenant définis, leurs couleurs ont changé de rouge à vert et le symbole de l'atome apparait dans l'interface.

L'icône de poubelle permet de supprimer l'atome sélectionné.

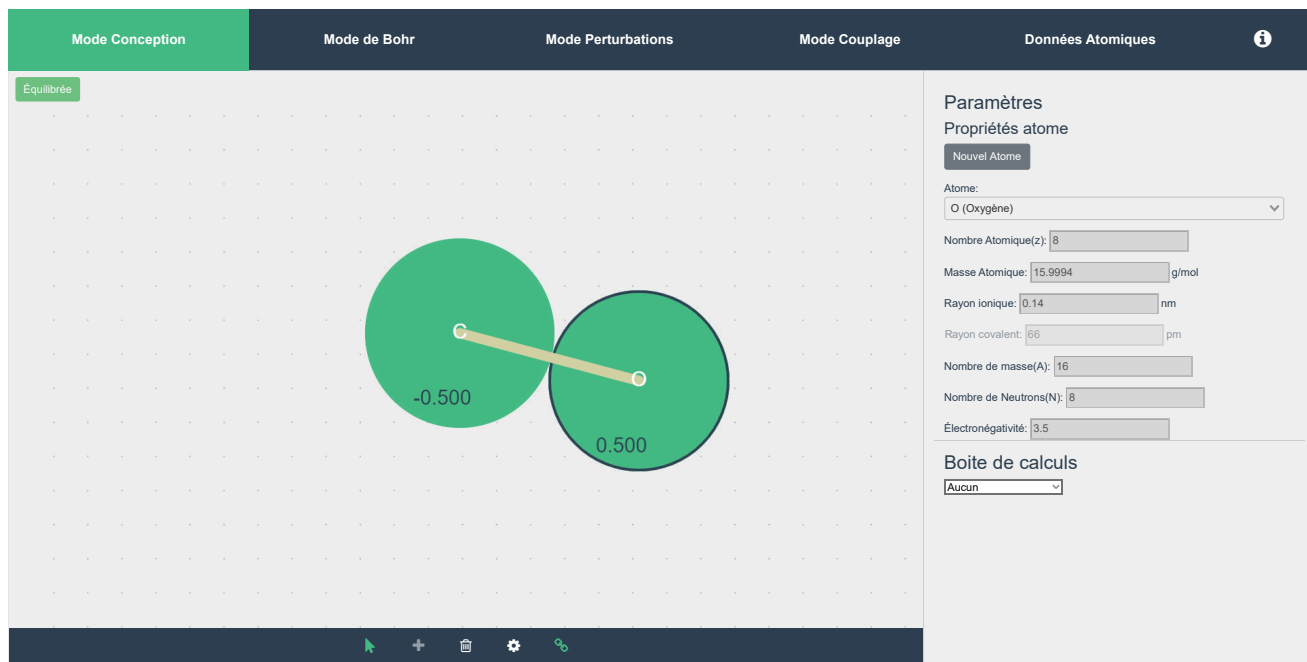
The screenshot shows the 'Mode Conception' tab selected. In the center workspace, two green circular atoms are connected by a yellow bond. The left atom is labeled 'C' with a charge of -0.500. The right atom is labeled 'O' with a charge of 0.500. On the right sidebar, the 'Paramètres' section shows 'Propriétés atome' for 'O (Oxygène)'. Fields include: 'Nombre Atomique(z): 8', 'Masse Atomique: 15.9994 g/mol', 'Rayon ionique: 0.14 nm', 'Rayon covalent: 66 pm', 'Nombre de masse(A): 16', 'Nombre de Neutrons(N): 8', and 'Électronégativité: 3.5'. Below this is a 'Boîte de calculs' with a dropdown set to 'Aucun'. At the bottom, there are icons for selection, addition, deletion, settings, and zoom.

This screenshot shows the 'Nouvel Atome' dialog box open over the workspace. The dialog has a title bar 'Nouvel Atome' and a close button. It contains the following fields: 'Symbole:', 'Nom:', 'Nombre Atomique(z): 0', 'Masse Atomique: 0 g/mol', 'Rayon ionique: 0 nm', 'Rayon covalent: 0 pm', 'Nombre de masse(A): 0', 'Nombre de Neutrons(N): 0', 'Électronégativité: 0', 'Énergie d'ionisation: 0 kJ/mol', 'Électrons de valence: 0', and 'Polarisabilité: 0'. At the bottom of the dialog are two buttons: 'Annuler' (red) and 'Enregistrer' (green). The background workspace shows the same molecule with atoms C and O, but the 'Nouvel Atome' dialog is the primary focus.



L'affichage lié à chaque atome peut être changé en sélectionnant les Options (représenté par un engrenage dans la barre d'outils). Chaque atome peut indiquer sa charge ou son symbole ou la molécule peut indiquer son dipôle.

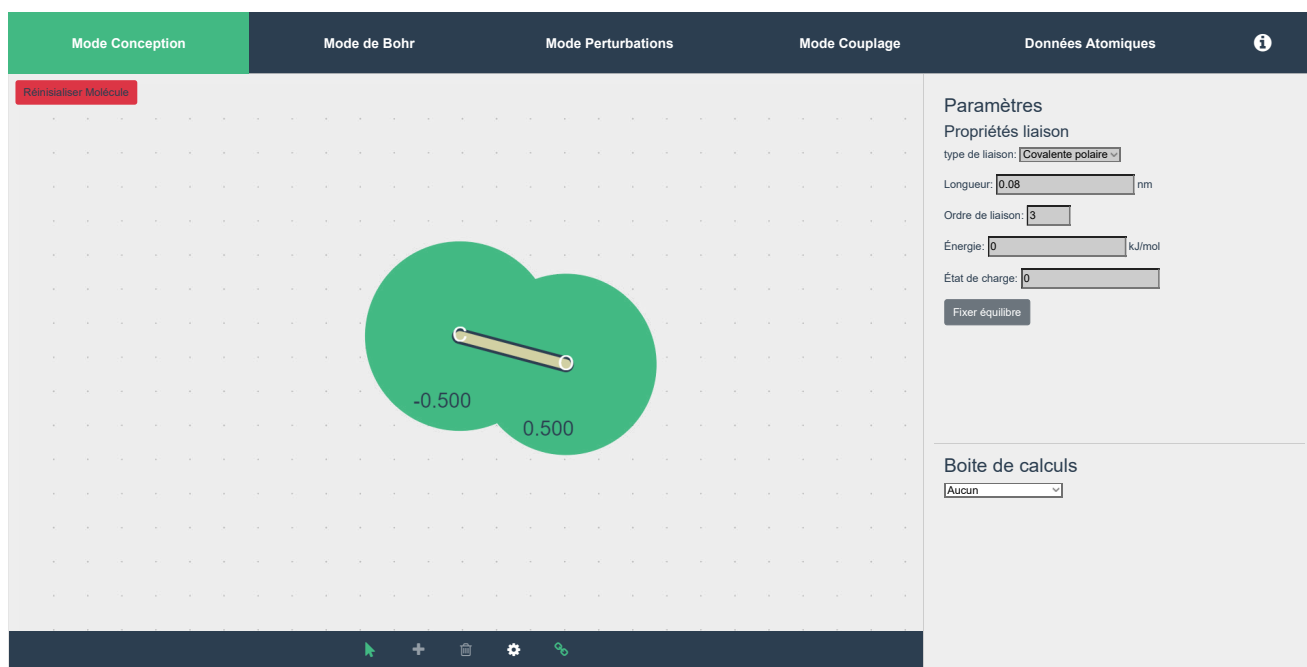
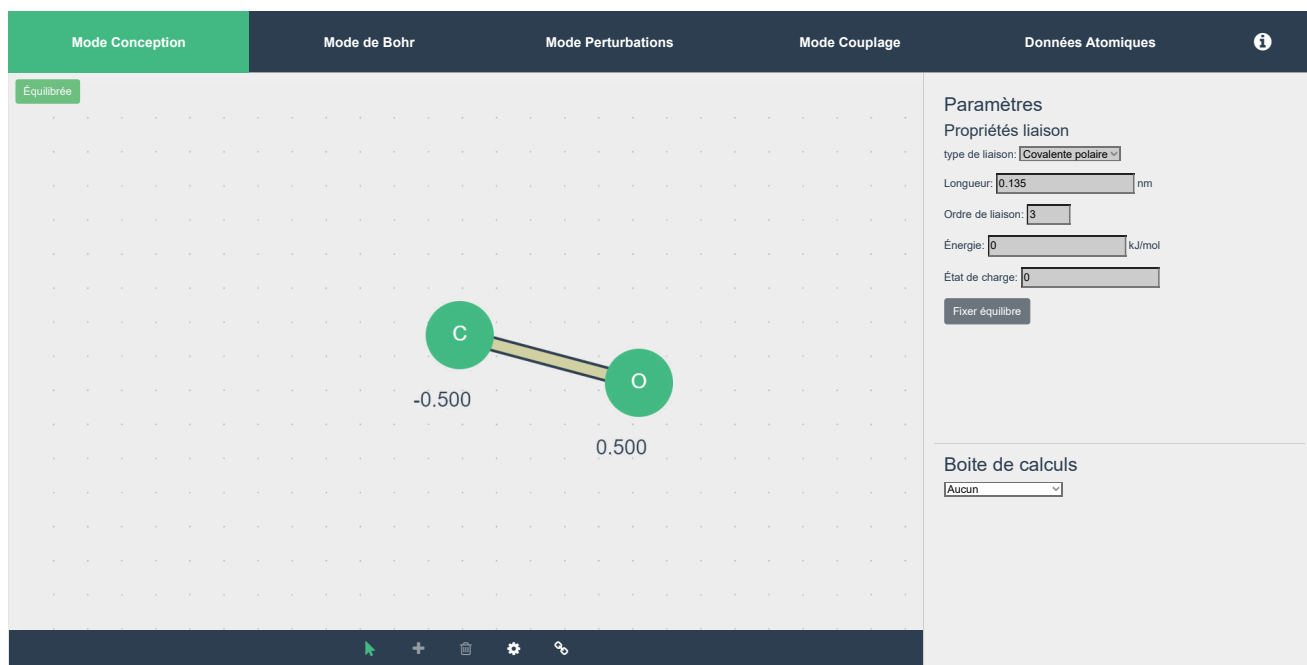
Le paramètre adjacent, représenté par une icône de lien, permet d'activer le mode d'affichage proportionnel des atomes basé sur le rayon de chacun.



Sélectionner la liaison permet d'afficher ses propriétés dans la fenêtre "Paramètres". Les valeurs affichées ont été calculées à partir des propriétés des atomes formant la molécule.

Modifier un des paramètres crée un déséquilibre dans la molécule, représenté par l'indicateur rouge dans le coin supérieur gauche de l'interface. Les calculs dans la boîte de calculs utilisent les valeurs entrées par l'utilisateur.

Cliquer sur l'indicateur permet de recalculer les valeurs et de revenir à l'équilibre. L'option "Fixer l'Équilibre" définit l'état présent comme l'état d'équilibre.





La boîte de calculs permet de développer certains calculs effectués avec les paramètres entrés. Lorsque possible, la formule est présentée, la formule avec les valeurs est ensuite affichée et la réponse est montrée. Des couleurs sont présentes dans les équations pour bien distinguer le développement des différentes variables.

Les calculs disponibles sont présentés:

Boîte de calculs

Type de Liaison ▼

$$|\chi_1 - \chi_2|$$

$$|3.5 - 2.5|$$

1.00 < 1.7 : Covalente polaire

Boîte de calculs

Longueur Liaison ▼

$$l = \text{rayonCovalent}_1 + \text{rayonCovalent}_2$$

$$l = 66 \text{ pm} + 69 \text{ pm}$$

$$l = 0.135 \text{ nm}$$

Boîte de calculs

Diagramme de Lewis ▼

$$\underset{\cdot\cdot}{\text{O}} \equiv \underset{\cdot\cdot}{\text{C}}$$

Boîte de calculs

Charges Formelles ▼

$$\text{CF} = [\# \text{ électrons de valences}] - [\# \text{ électrons libres}] - \frac{1}{2} [\# \text{ électrons partagés}]$$

$$\text{O} : 6 - 2 - \frac{1}{2} 6 = 1$$

$$\text{C} : 4 - 2 - \frac{1}{2} 6 = -1$$

Boîte de calculs

Charges Partielles ▼

$$\text{CP} = [\# \text{ électrons de valences}] - [\# \text{ électrons libres}] - \frac{\chi_x}{\chi_x + \chi_y} [\# \text{ électrons partagés}]$$

$$\text{O} : 6 - 2 - \frac{3.5}{3.5 + 2.5} 6 = 0.5$$

$$\text{C} : 4 - 2 - \frac{2.5}{3.5 + 2.5} 6 = -0.5$$

Boîte de calculs

Moment Dipolaire ▼

$$\mu = q * l$$

$$\mu = 0.500 * 1.602 * 10^{-19} \text{ C} * 0.135 * 10^{-9} \text{ m}$$

$$\mu = 1.081 * 10^{-29} \text{ Cm} = 3.244 \text{ D}$$

Boîte de calculs

Masse Réduite ▼

$$m_\mu = \frac{m_O * m_C}{m_O + m_C}$$

$$m_\mu = \frac{15.9994 * 12.011}{15.9994 + 12.011}$$

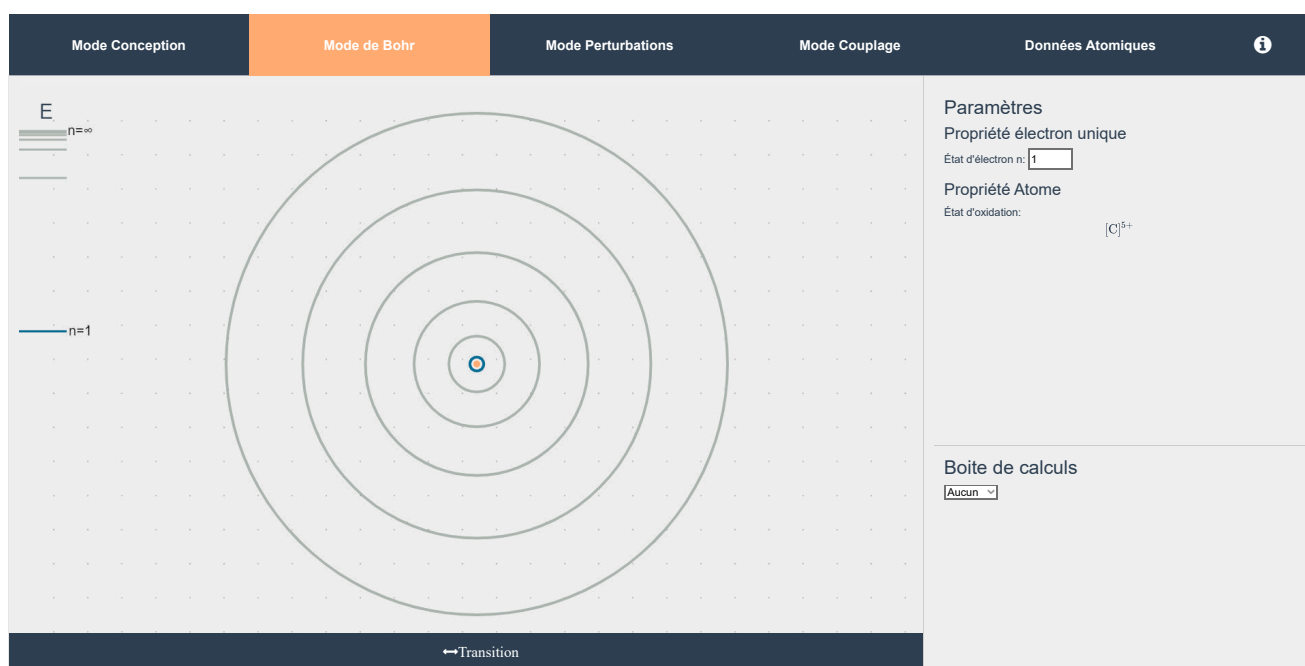
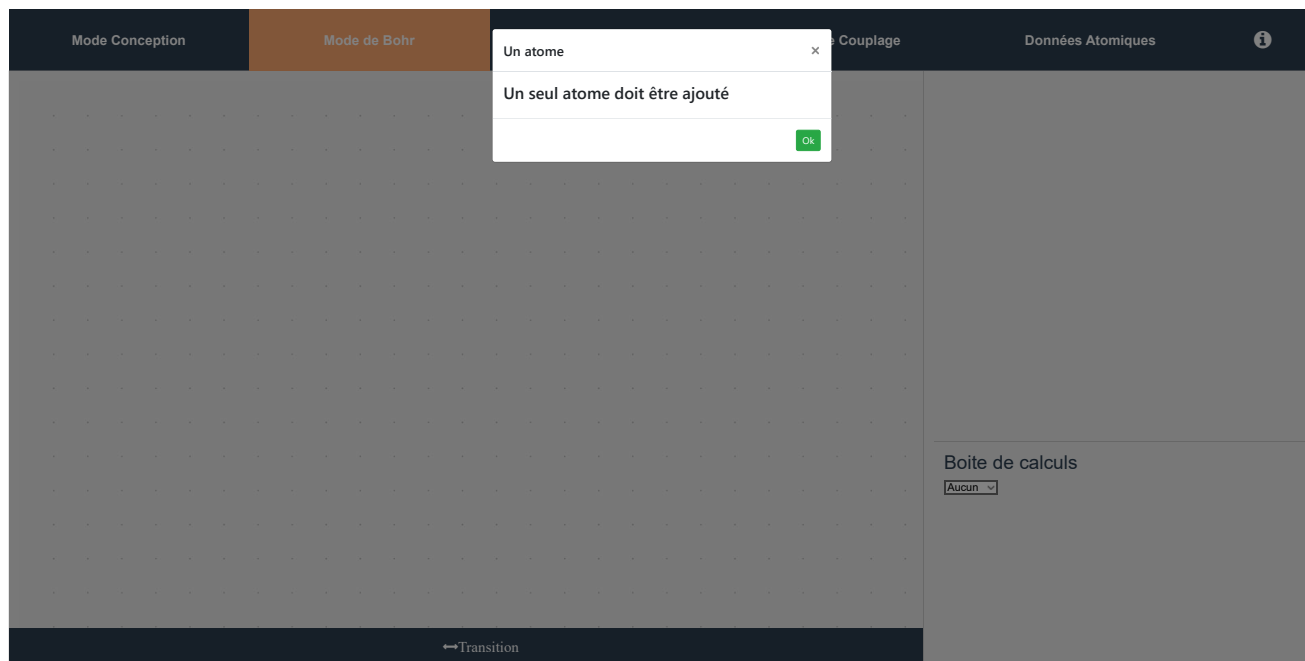
$$= 6.860622961471453 \text{ g/mol}$$

# Mode de Bohr

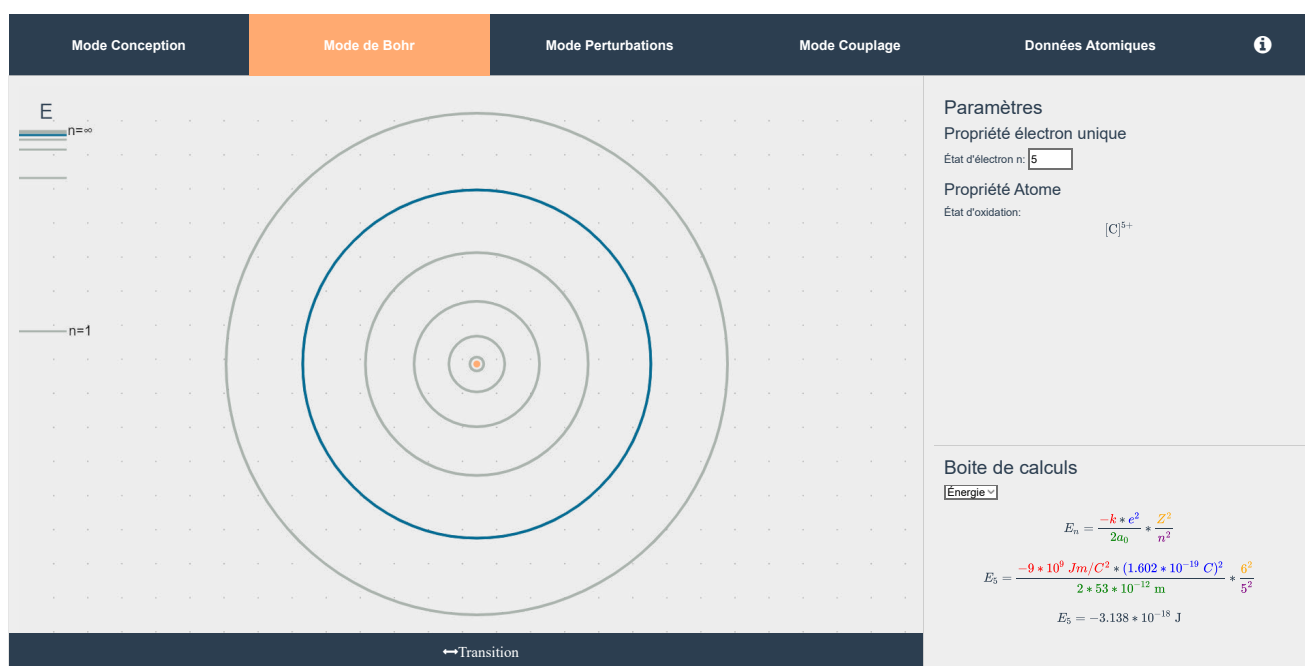
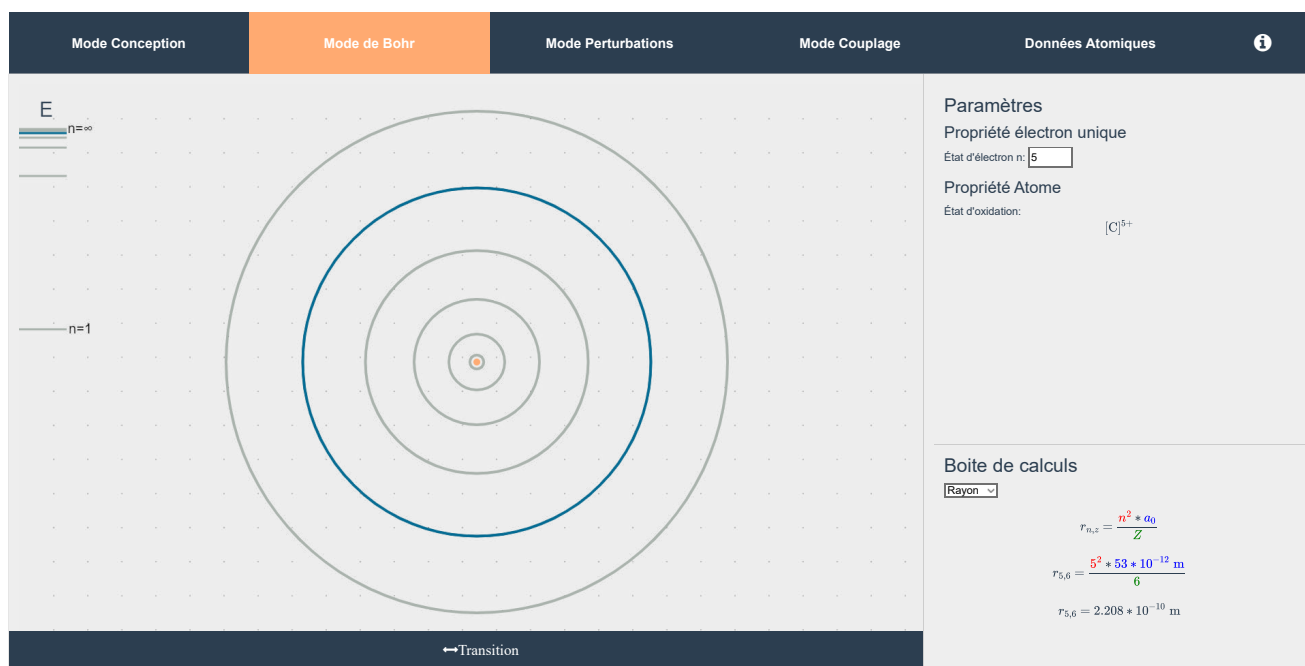
En entrant dans le mode de Bohr, s'il n'y a pas qu'un seul atome qui a été placé, un message apparaît pour vous en informer.

Lorsqu'un seul atome a été ajouté avant d'entrer dans le mode de Bohr, celui-ci apparaît dans l'interface graphique. Six niveaux possibles d'électrons sont également présentés, ainsi que leurs énergies relatives à gauche.

La section paramètres informe sur l'état d'oxydation de l'atome et permet de modifier l'état de l'électron.



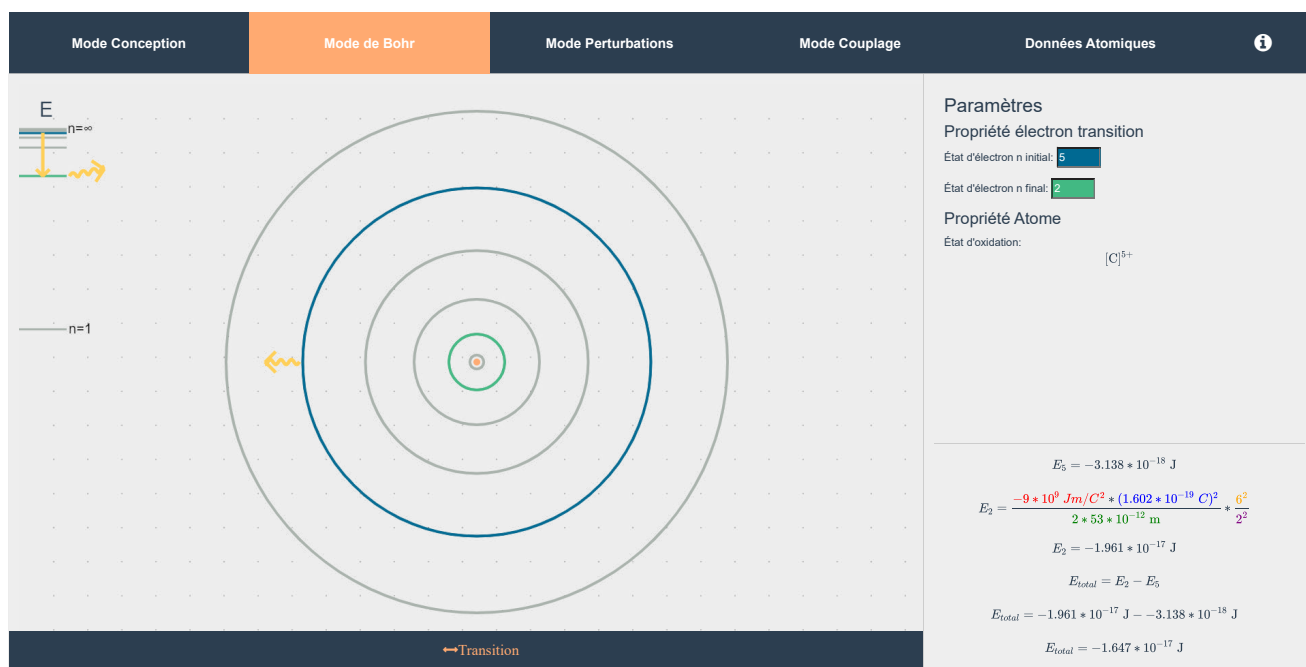
En sélectionnant un état d'électron, son rayon relatif et son énergie relative sont affichés dans l'interface. Les états de 1 à 6 ainsi que infini peuvent être sélectionnés.  
La boîte de calculs permet d'afficher le rayon de l'électron au noyau et son énergie.



Sélectionner l'option transition sans la barre d'outils de l'interface graphique permet de sélectionner un état d'électron initial et un état d'électron final dans la section paramètres. La couleur des paramètres correspond aux couleurs de l'affichage.

La boîte de calculs permet maintenant d'afficher le rayon de l'électron au noyau et son énergie pour chacun des deux états en plus de la différence d'énergie.

Un photon démontre la direction de l'énergie.



# Mode Perturbations



Après la construction d'un atome ou d'une molécule dans le mode conception, le mode perturbations permet d'ajouter une perturbation pour observer son effet sur la molécule en calculant l'énergie et en visualisant la force.

La barre d'outils du mode de perturbations est identique, visuellement et dans ses fonctionnalités, à celle disponible dans le mode de conception.

Les quatre types de perturbations disponibles dans le simulateur sont présentés.



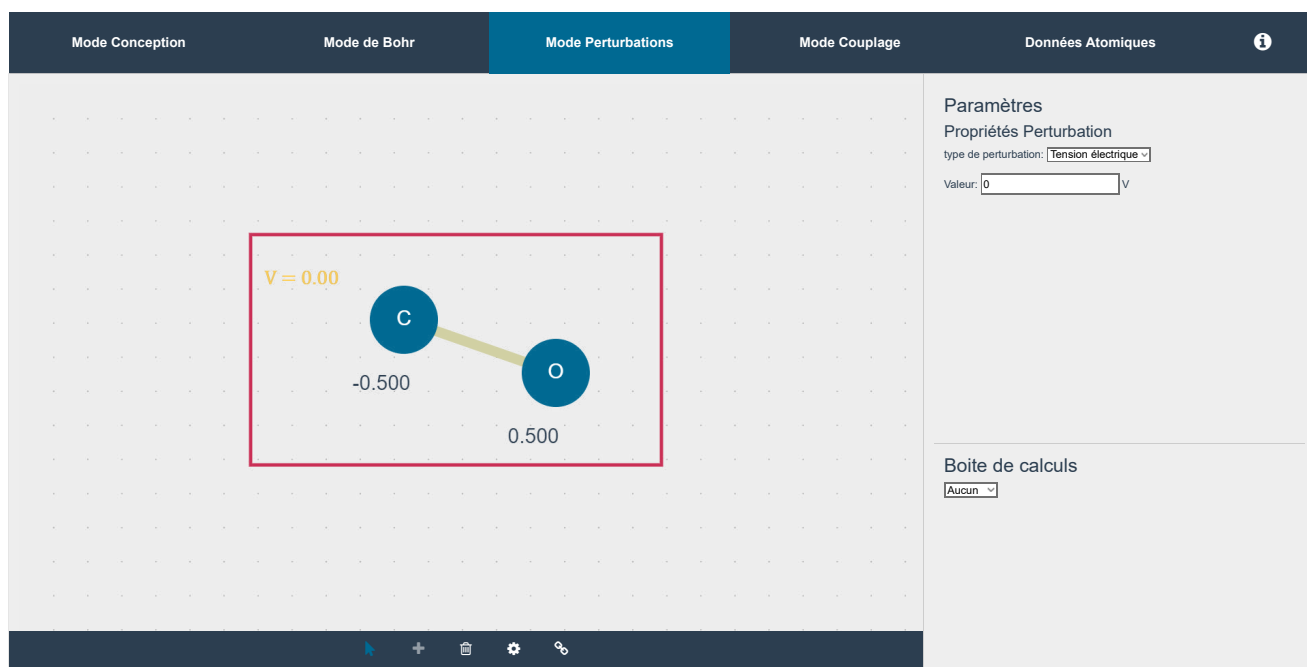
La perturbation de type champ électrique a une valeur d'intensité et un angle, et est appliquée de manière uniforme sur la molécule.



La perturbation de type charge ponctuelle a une valeur d'intensité et une distance, mais ne peut être placée que sur l'axe de la liaison lorsqu'une est présente.



La perturbation de type dipôle a une valeur d'intensité, une distance et un angle. L'orientation du dipôle est conservée parallèle au dipôle de la molécule et l'angle représente sa position polaire relative à la molécule.



La perturbation de tension électrique a une valeur d'intensité. La perturbation est uniforme sur la molécule.

Mode Conception

Mode de Bohr

Mode Perturbations

Mode Couplage

Données Atomiques

q

2.000

C

Paramètres

Propriétés Perturbation

type de perturbation: Charge ponctuelle

Valeur: 2  $\times 1.602 \times 10^{-19}$  C

Distance: 10 nm

Boite de calculs

Energie

$$U = \frac{k_c \cdot q_1 \cdot q_2}{d}$$

$$= \frac{9 \times 10^9 \text{ Jm/C}^2 \cdot 2.000 \cdot 1.602 \times 10^{-19} \text{ C} \cdot 2 \cdot 1.602 \times 10^{-19} \text{ C}}{10 \times 10^{-9} \text{ m}}$$

$$U = 9.239 \times 10^{-38} \text{ J}$$

Le calcul de l'énergie est disponible dans la boite de calcul.

Mode Conception

Mode de Bohr

Mode Perturbations

Mode Couplage

Données Atomiques

q

2.000

C

Paramètres

Propriétés Perturbation

type de perturbation: Charge ponctuelle

Valeur: 2  $\times 1.602 \times 10^{-19}$  C

Distance: 10 nm

Boite de calculs

Force

$$F = \frac{k_c \cdot q_1 \cdot q_2}{d^2}$$

$$= \frac{9 \times 10^9 \text{ Jm/C}^2 \cdot 2.000 \cdot 1.602 \times 10^{-19} \text{ C} \cdot 2 \cdot 1.602 \times 10^{-19} \text{ C}}{(10 \times 10^{-9})^2 \text{ m}^2}$$

$$F = 9.239 \times 10^{-12} \text{ N}$$

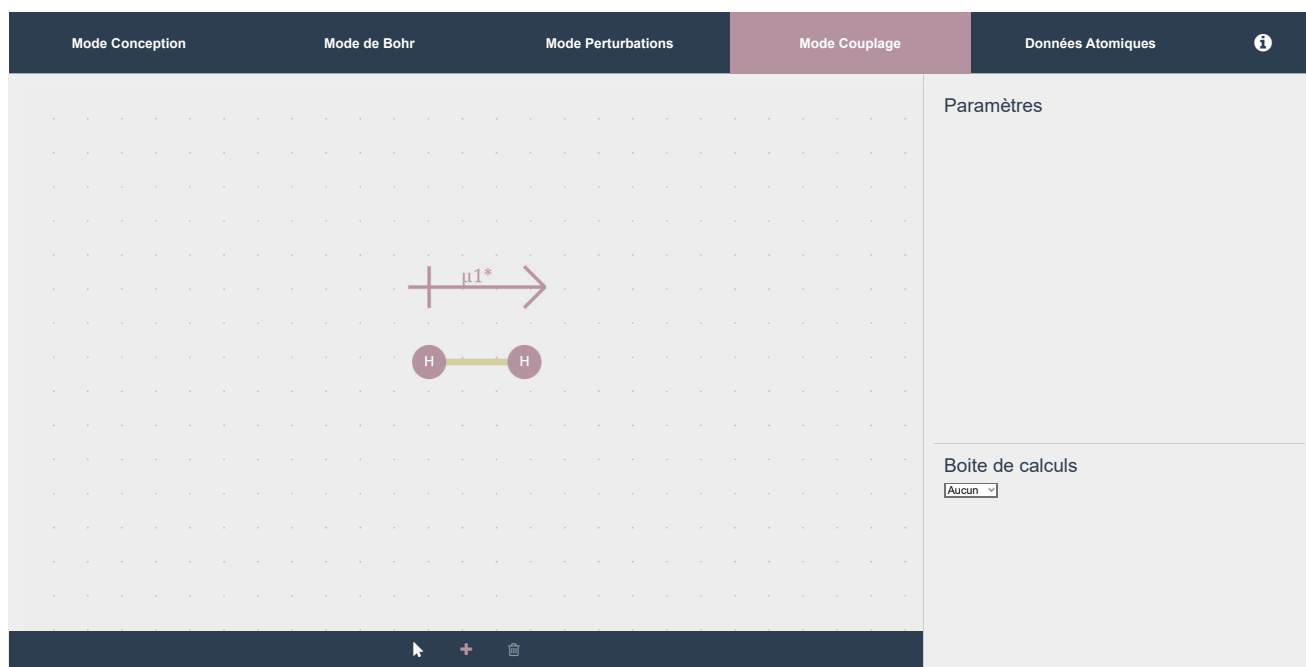
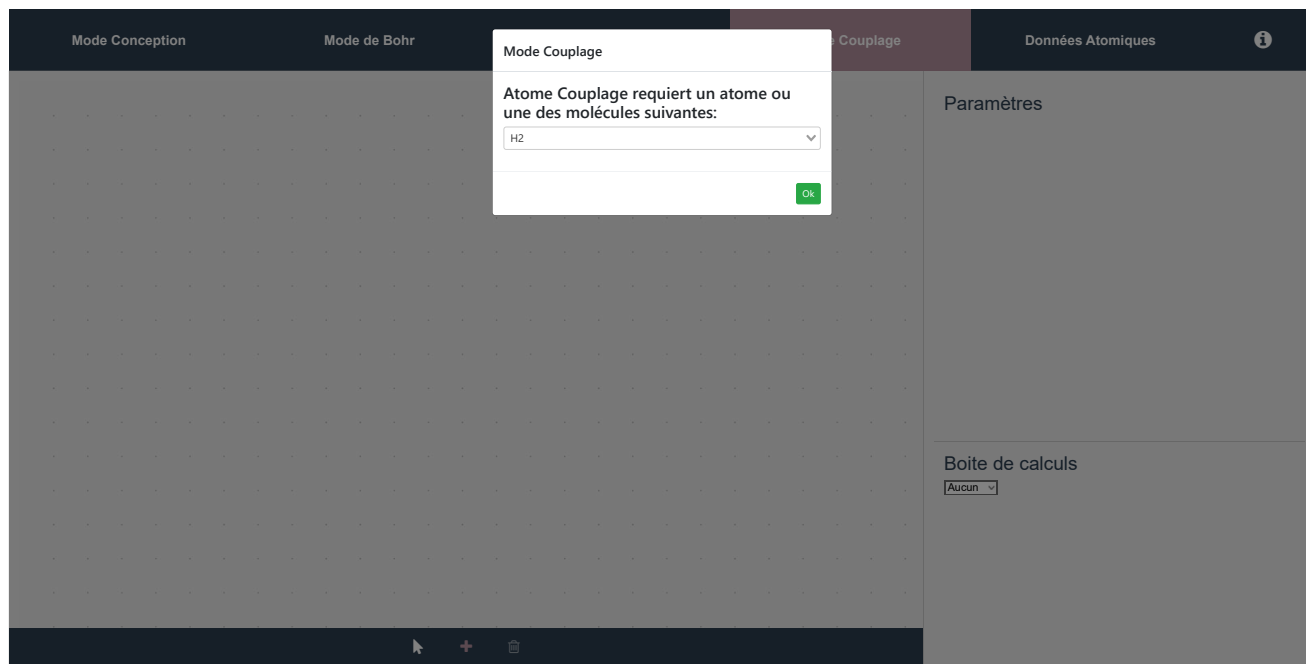
Le calcul de la force est disponible dans la boite de calcul. La direction de la force est également illustrée dans l'interface graphique.



# Mode Couplage

En entrant dans le mode de couplage, si un seul atome ou une molécule valide n'a pas été ajouté au mode de conception, un message apparaît pour vous permettre de sélectionner une molécule valide.

Lorsqu'une configuration valide est sélectionnée, le mode couplage sera disponible.



La barre d'outils permet d'ajouter une particule de couplage: une charge ponctuelle, une polarisabilité ponctuelle ou un dipôle ponctuel.

Lorsqu'une particule est ajoutée, ses options sont disponibles dans la fenêtre paramètres. Les trois types de particules ont les options de valeur et de distance, mais la polarisabilité ponctuelle requiert également une première énergie d'ionisation. Pour ce dernier type, un atome existant peut être sélectionné.

La fenêtre boîte de calculs affiche l'énergie du couplage.

Mode Conception
Mode de Bohr
Mode Perturbations
Mode Couplage
Données Atomiques

### Paramètres

#### Propriétés Couplage

type de couplage: α Ponctuelle

Atome existant: B (Bore)

Valeur: 3.04199418 m<sup>3</sup>

Première énergie d'ionisation: 800.6 kJ/mol

Distance: 0.28 nm

---

**Energie**

$$U_{\mu_1\mu_2} = \frac{1}{r^6} + \frac{2}{3} * (\alpha_1 r) * (\alpha_2 r) * k_e^2 * \frac{I_1 * I_2}{I_1 + I_2}$$

$$U_{\mu_1\mu_2} = \frac{1}{(0.28 * 10^{-9} \text{ m})^6} + \frac{2}{3} * (0.819 * 10^{-30} \text{ m}^3) * (3.04199418 * 10^{-30} \text{ m}^3) * (9 * 10^6)^2$$

$$= \frac{1488 \text{ kJ/mol} * \frac{1000 \text{ J/kJ}}{6.022 * 10^{23} \text{ mol}} + 800.6 \text{ kJ/mol} * \frac{1000 \text{ J/kJ}}{6.022 * 10^{23} \text{ mol}}}{1488 \text{ kJ/mol} * \frac{1000 \text{ J/kJ}}{6.022 * 10^{23} \text{ mol}} + 800.6 \text{ kJ/mol} * \frac{1000 \text{ J/kJ}}{6.022 * 10^{23} \text{ mol}}}$$

$$U_{\mu_1\mu_2} = 2.413 * 10^{-1} \text{ J}$$

# Données Atomiques

Mode Conception		Mode de Bohr		Mode Perturbations		Mode Couplage		Données Atomiques		<div><div></div></div>	
Télécharger CSV											
Recherche											<div><div></div></div>
Symbole	Nom	Nombre Atomique	Masse Atomique [g/mol]	Rayon Ionique [nm]	Rayon Covalent [pm]	Nombre de Masse	Nombre de Neutrons	Électronégativité	Première Énergie Ionisation [kJ/mol]	Électrons de Valence	Polarisabilité (x10 <sup>-24</sup> ) [m <sup>3</sup> ]
H	Hydrogène	1	1.00797	0.208	30	1	0	2.1	1312	1	0.6688098726156001
He	Hélium	2	4.0026	--	28	4	2	--	2372.3	2	0.20533460715000001
Li	Lithium	3	6.941	0.068	128	7	4	1	520.2	1	24.352647310500004
Be	Béryllium	4	9.01218	0.031	96	9	5	1.6	899.5	2	5.600237090400001
B	Bore	5	10.81	--	84	11	6	2	800.6	3	3.04199418
C	Carbone	6	12.011	0.26	69	12	6	2.5	1086.5	4	1.6768065480000003
N	Azote	7	14.0067	0.171	71	14	7	3	1402.3	5	1.0980857040000003
O	Oxygène	8	15.9994	0.14	66	16	8	3.5	1313.9	6	0.786466788
F	Fluor	9	18.998403	0.136	57	19	10	4	1681	7	0.5549784504
Ne	Néon	10	20.179	--	58	20	10	--	2080.7	8	0.39488052255600004
Na	Sodium	11	22.98977	0.095	166	23	12	0.9	495.8	1	24.143046492
Mg	Magnésium	12	24.305	0.065	141	24	12	1.3	737.7	2	10.565365152000002
Al	Aluminium	13	26.98154	0.05	121	27	14	1.6	577.5	3	8.576939688000001
Si	Silicium	14	28.0855	0.041	111	28	14	1.9	786.5	4	5.534945508
P	Phosphore	15	30.97376	0.212	107	31	16	2.2	1011.8	5	3.7097490000000004

La section Données Atomiques permet d'accéder aux données pour chaque atome. Une barre de recherche permet de rapidement trouver une valeur recherchée.

L'option de téléchargement facilite une utilisation externe des données en permettant d'ouvrir le fichier dans un éditeur de tableau tel Excel.

Lorsque de nouveaux atomes sont ajoutés dans le mode conception, ceux-ci apparaîtront au haut du tableau en bleu.

Mode Conception			Mode de Bohr			Mode Perturbations			Mode Couplage			Données Atomiques		<div><div></div></div>	
Télécharger CSV															
Recherche															X
Symbole	Nom	Nombre Atomique	Masse Atomique [g/mol]	Rayon Ionique [nm]	Rayon Covalent [pm]	Nombre de Masse	Nombre de Neutrons	Électronégativité	Première Énergie Ionisation [kJ/mol]	Électrons de Valence	Polarisabilité (x10 <sup>-24</sup> ) [m³]				
Test	Tt	10	20	100	100	20	10	4	5	1	0.6				
H	Hydrogène	1	1.00797	0.208	30	1	0	2.1	1312	1	0.6688098726156001				
He	Hélium	2	4.0026	--	28	4	2	--	2372.3	2	0.20533460715000001				
Li	Lithium	3	6.941	0.068	128	7	4	1	520.2	1	24.352647310500004				
Be	Béryllium	4	9.01218	0.031	96	9	5	1.6	899.5	2	5.600237090400001				
B	Bore	5	10.81	--	84	11	6	2	800.6	3	3.04199418				
C	Carbone	6	12.011	0.26	69	12	6	2.5	1086.5	4	1.6768065480000003				
N	Azote	7	14.0067	0.171	71	14	7	3	1402.3	5	1.0980857040000003				
O	Oxygène	8	15.9994	0.14	66	16	8	3.5	1313.9	6	0.786466788				
F	Fluor	9	18.998403	0.136	57	19	10	4	1681	7	0.5549784504				
Ne	Néon	10	20.179	--	58	20	10	--	2080.7	8	0.39488052255600004				
Na	Sodium	11	22.98977	0.095	166	23	12	0.9	495.8	1	24.143046492				
Mg	Magnésium	12	24.305	0.065	141	24	12	1.3	737.7	2	10.565365152000002				
Al	Aluminium	13	26.98154	0.05	121	27	14	1.6	577.5	3	8.576939688000001				
Si	Silicium	14	28.0855	0.041	111	28	14	1.9	786.5	4	5.534945508				