

# SIMULATEUR DE MOLÉCULES COULOMBIQUES

CHM-1000

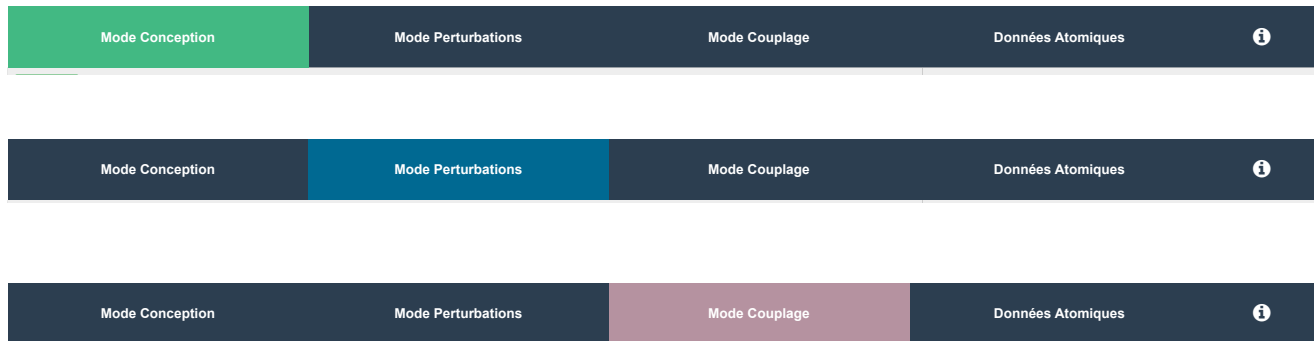
Christophe Bolduc  
Jesse Greener

Département de Chimie  
Université Laval

# Contenu

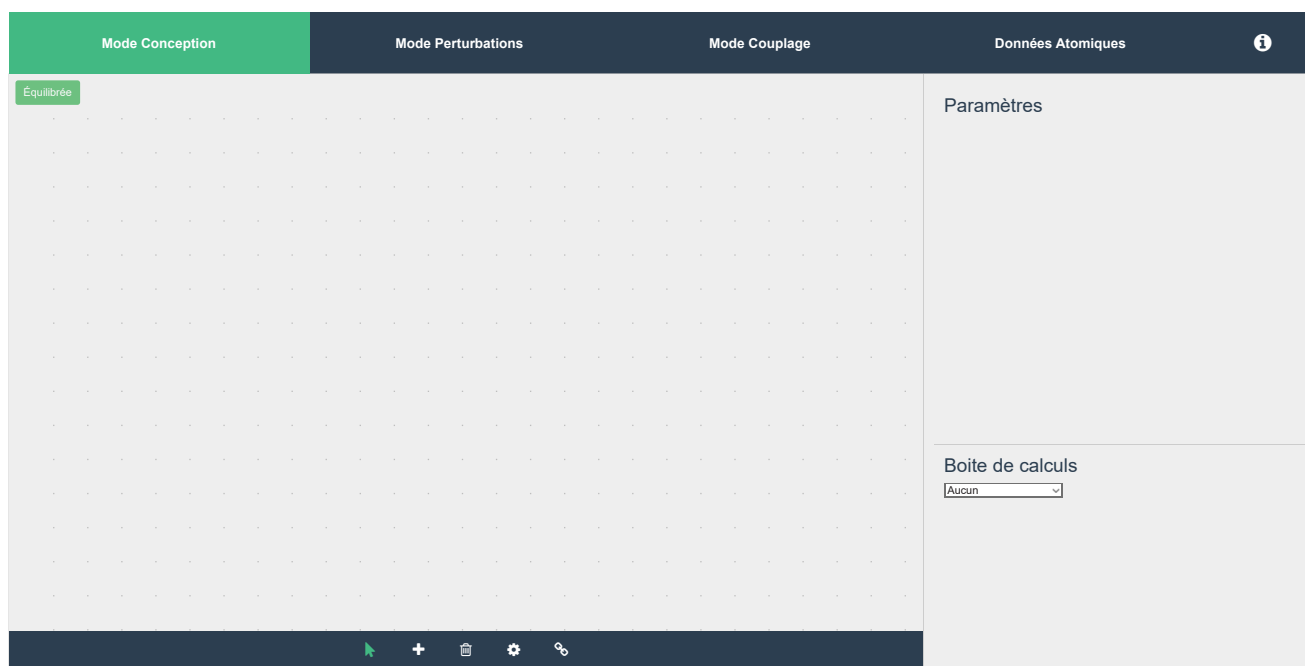
Barre de navigation	3
Mode Conception	4
Mode Perturbations	10
Données Atomiques	14

# Barre de navigation



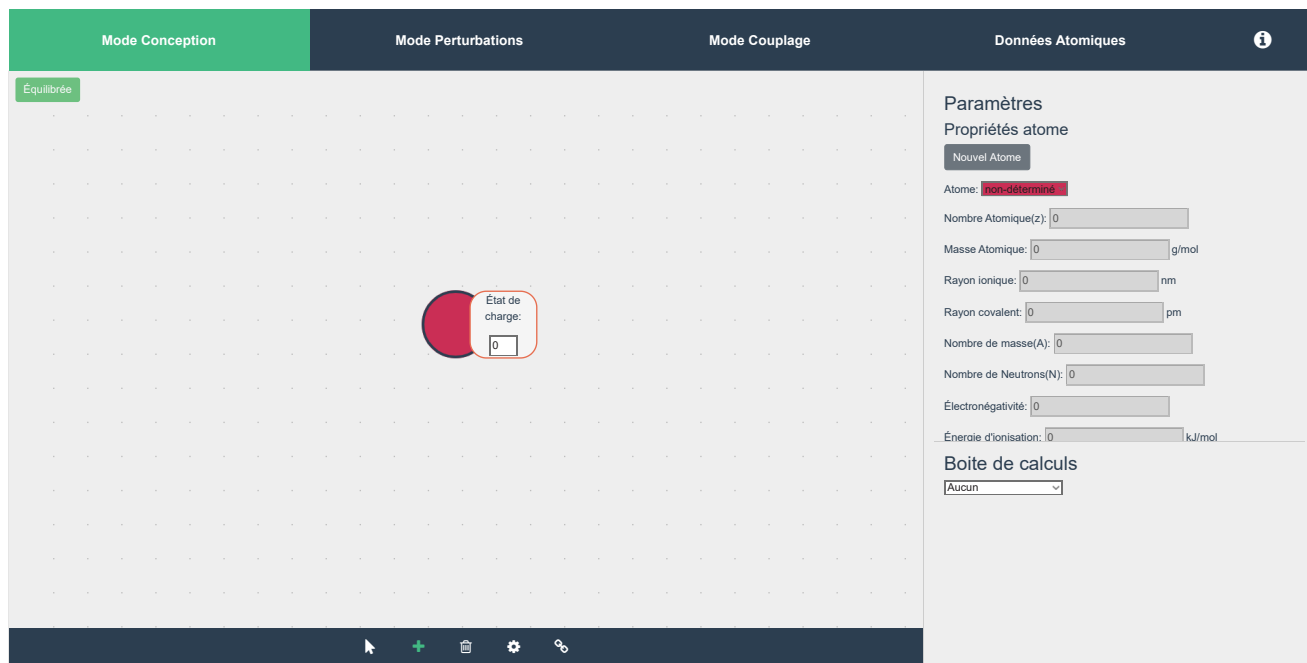
La barre de navigation permet d'accéder aux différents modes du simulateurs. Chacun de ces modes est présenté dans ce document. L'icone d'interrogation permet d'accéder au présent document. Chacun des trois modes a sa couleur caractéristique.

# Mode Conception

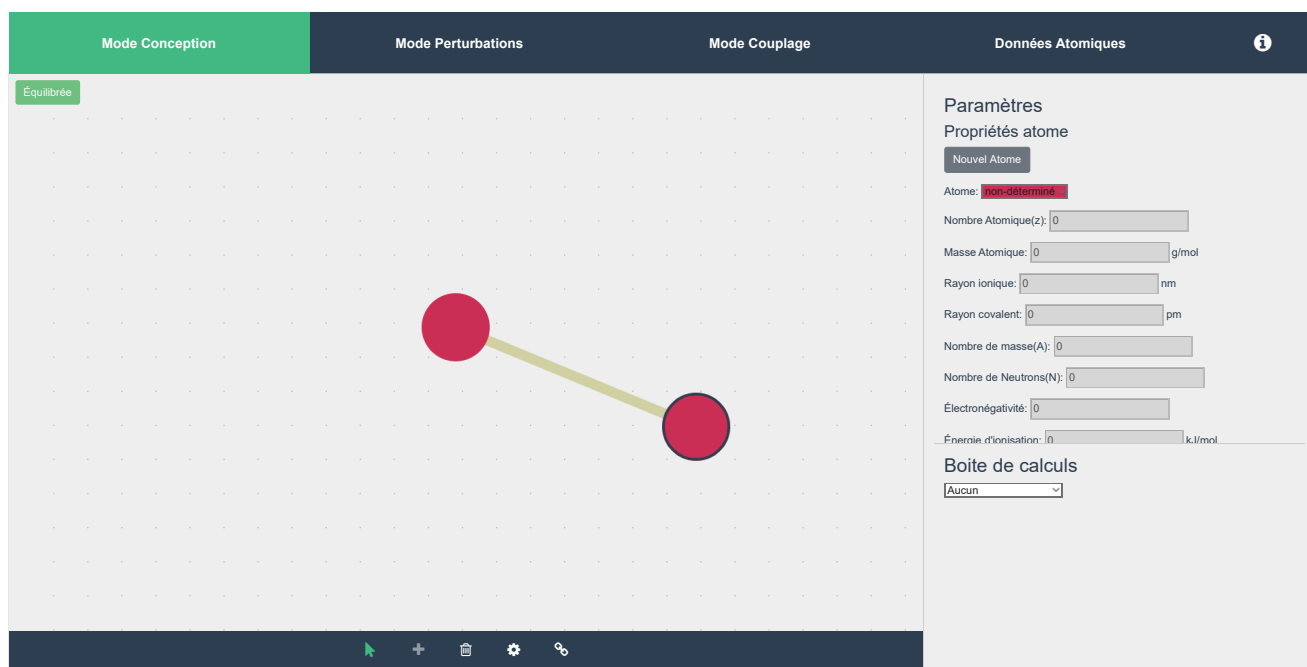


Le mode conception permet de créer la molécule à analyser. La fenêtre comportant le quadrillé représente l'interface graphique où l'utilisateur peut placer et interagir avec les atomes. Une barre d'outils est également disponible au bas pour définir le type d'interaction avec l'interface. La section "Paramètres" permet d'observer et de modifier les paramètres d'un 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 de 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 entre les deux. Puisque le nombre maximum d'atomes est atteint, l'outil est automatiquement changer 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 pré-défini peut-être sélectionner ou un nouvel atome peut être défini avec le bouton "Nouvel Atome".

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

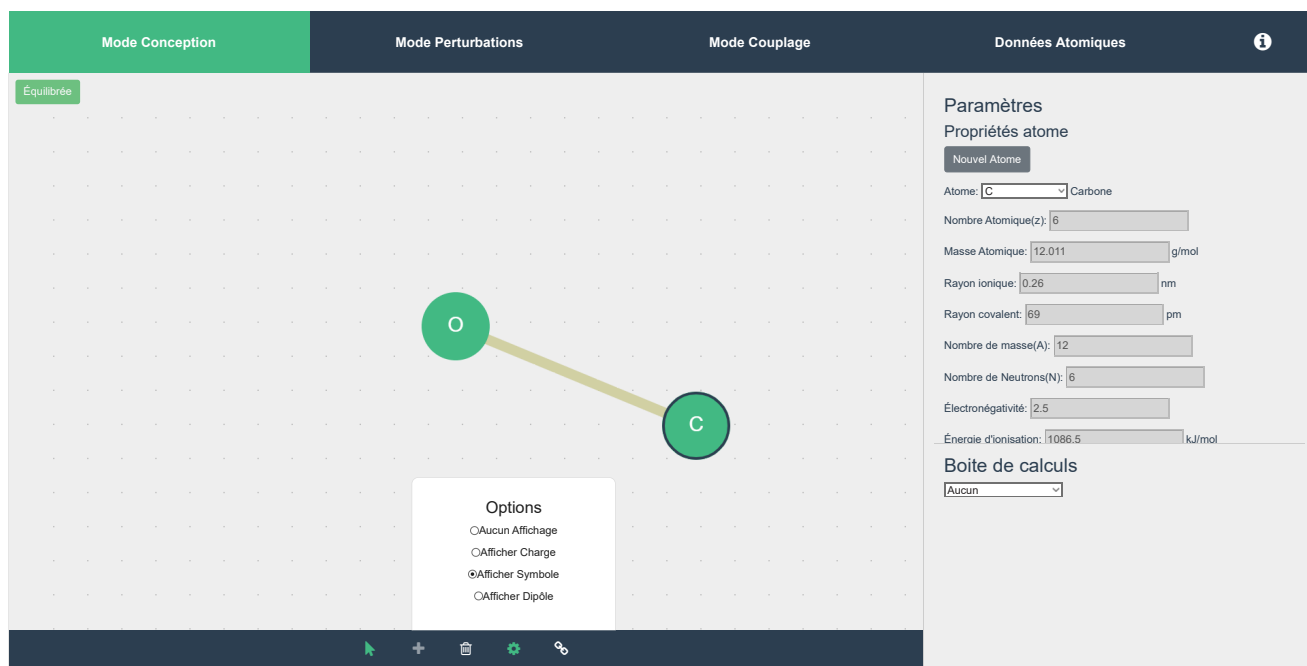
L'icône de poubelle permet de supprimer l'atome sélectionné.

The screenshot displays the software interface with the following components:

- Top Navigation Bar:** Mode Conception (active), Mode Perturbations, Mode Couplage, Données Atomiques.
- Main Canvas:** A grid showing a molecule with two atoms, Oxygen (O) and Carbon (C), connected by a bond. The atoms are green, indicating they are defined.
- Right Panel (Données Atomiques):**
  - Paramètres:**
    - Propriétés atome:**
      - Nouvel Atome:** Button to add a new atom.
      - Atome:** Dropdown menu showing 'Oxygène'.
      - 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
      - Électronégativité:** 3.5
      - Énergie d'ionisation:** 1313.9 kJ/mol
    - Boîte de calculs:** Dropdown menu showing 'Aucun'.

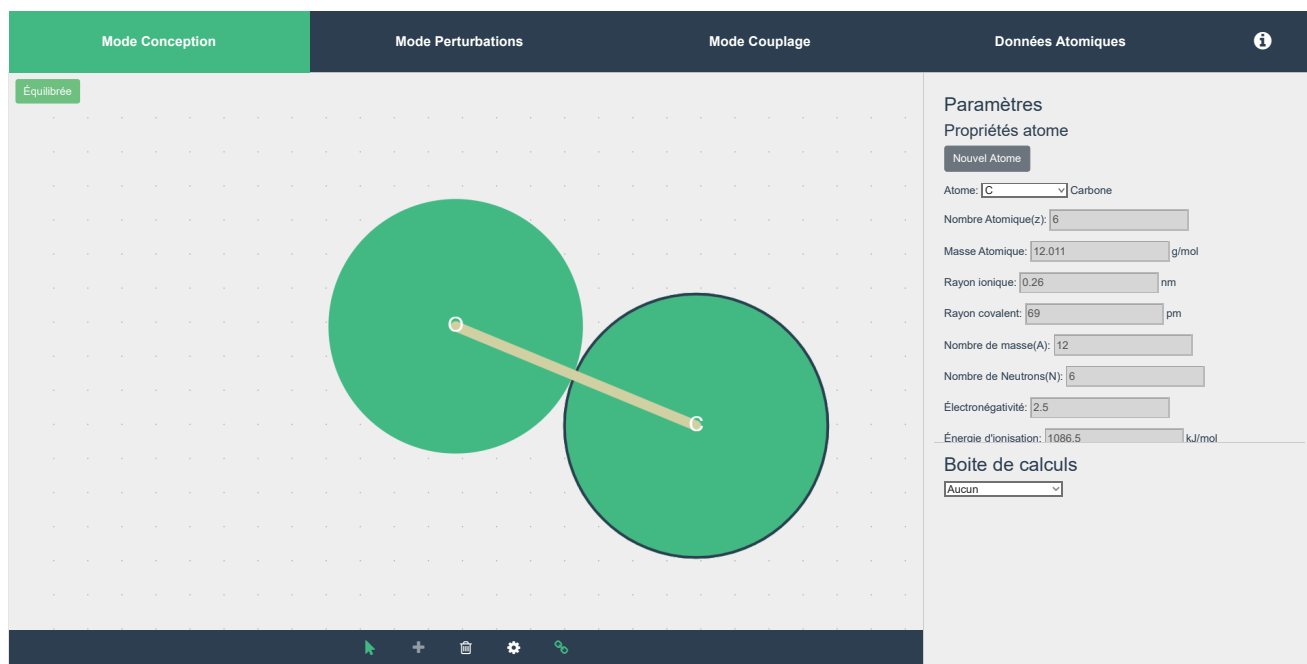
The screenshot displays the software interface with the following components:

- Top Navigation Bar:** Mode Conception (active), Mode Perturbations, Mode Couplage, Données Atomiques.
- Main Canvas:** A grid showing a molecule with two atoms, Oxygen (O) and Carbon (C), connected by a bond. The atoms are green, indicating they are defined.
- Right Panel (Données Atomiques):**
  - Paramètres:**
    - Propriétés atome:**
      - Nouvel Atome:** Button to add a new atom.
      - Atome:** Dropdown menu showing 'Oxygène'.
      - 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
      - Électronégativité:** 3.5
      - Énergie d'ionisation:** 1313.9 kJ/mol
    - Boîte de calculs:** Dropdown menu showing 'Aucun'.



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.

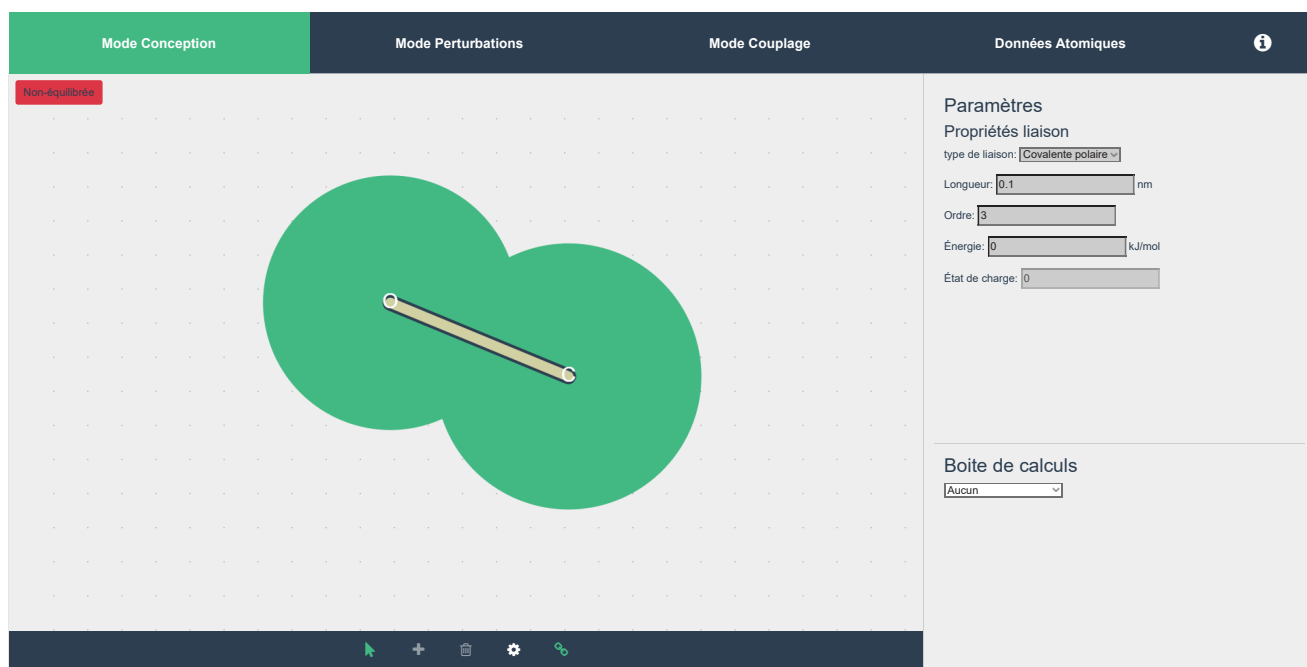
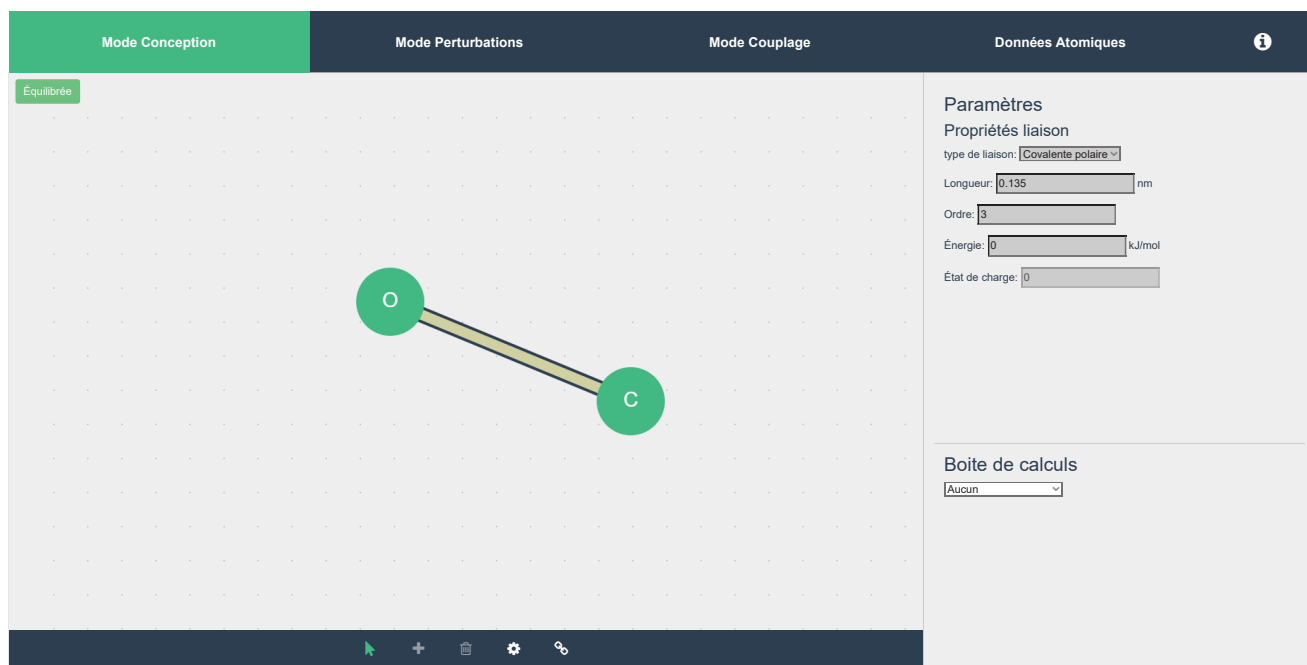
Le paramètre adjacent représenté par un icon de lien, permet d'activer le mode d'affichage proportionnel des atomes basé sur le rayon de chaque.



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.





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 ▼

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

**Boîte de calculs**

Charges Formelles ▼

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

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

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

**Boîte de calculs**

Charges Partielles ▼

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

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

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

**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**

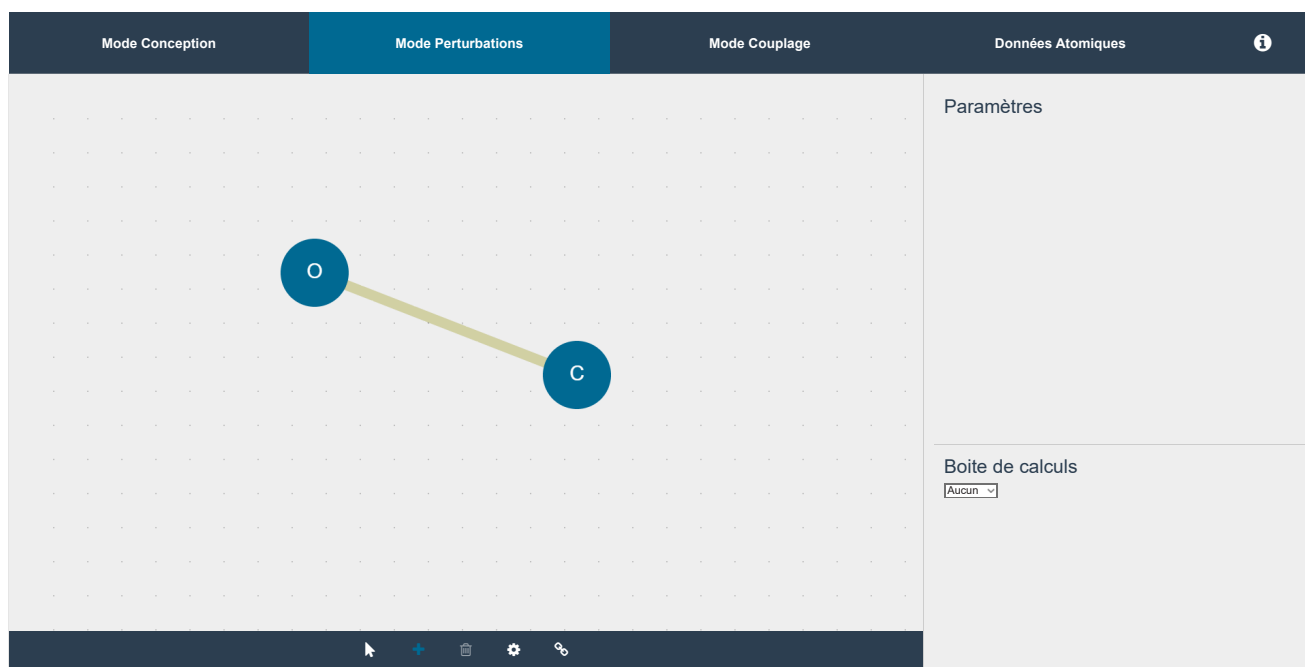
Masse Réduite ▼

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

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

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

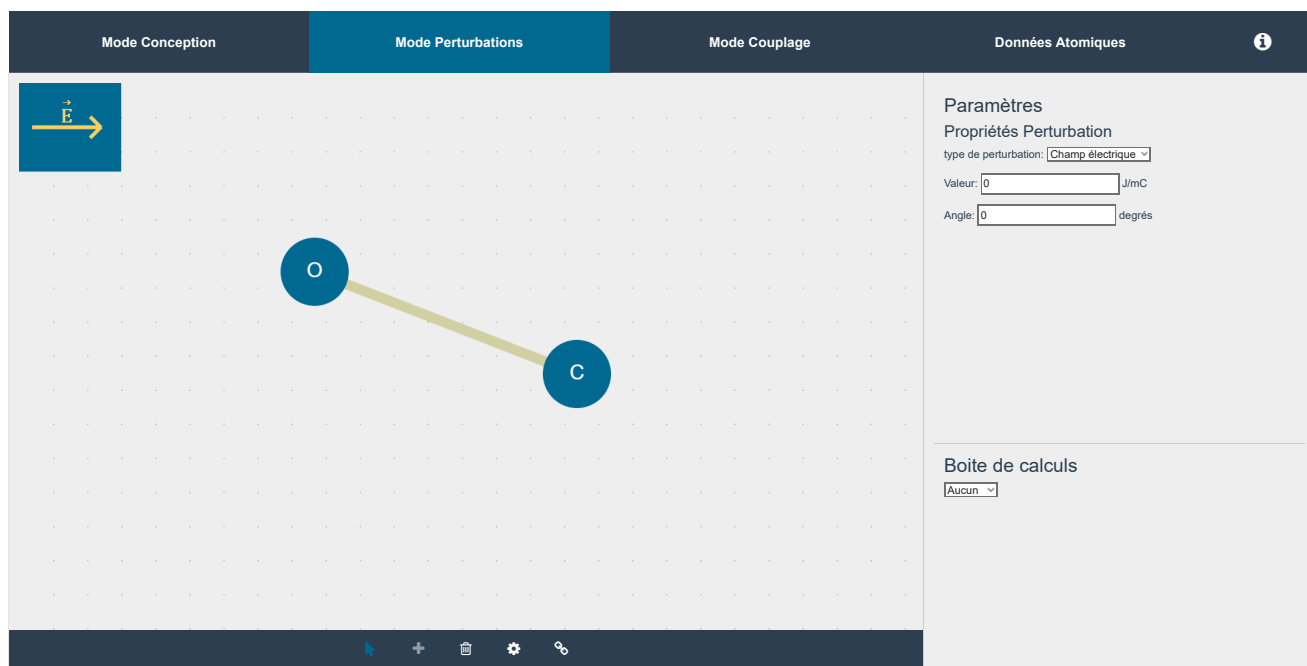
# Mode Perturbations



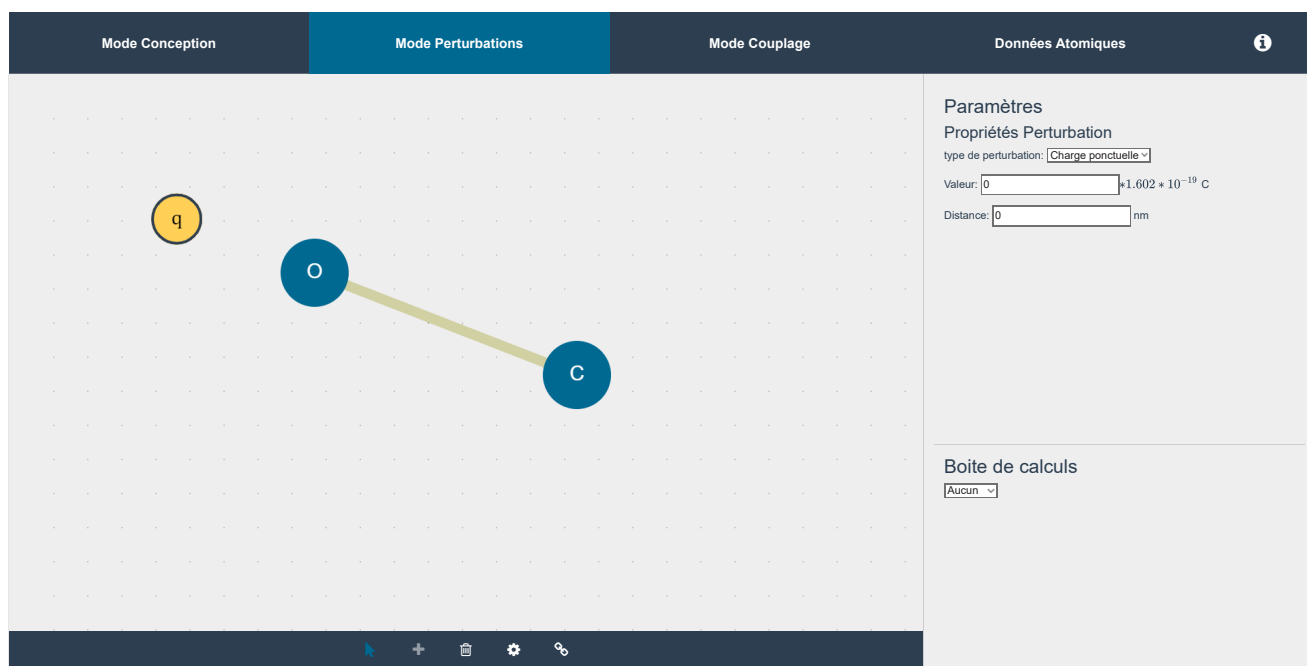
Après la construction d'un atome ou d'une molécule dans le mode conception, le mode perturbations permet d'ajouter une perturbation. Pour observer son effet sur la molécule en calculant l'énergie et en visualisant la force.

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.



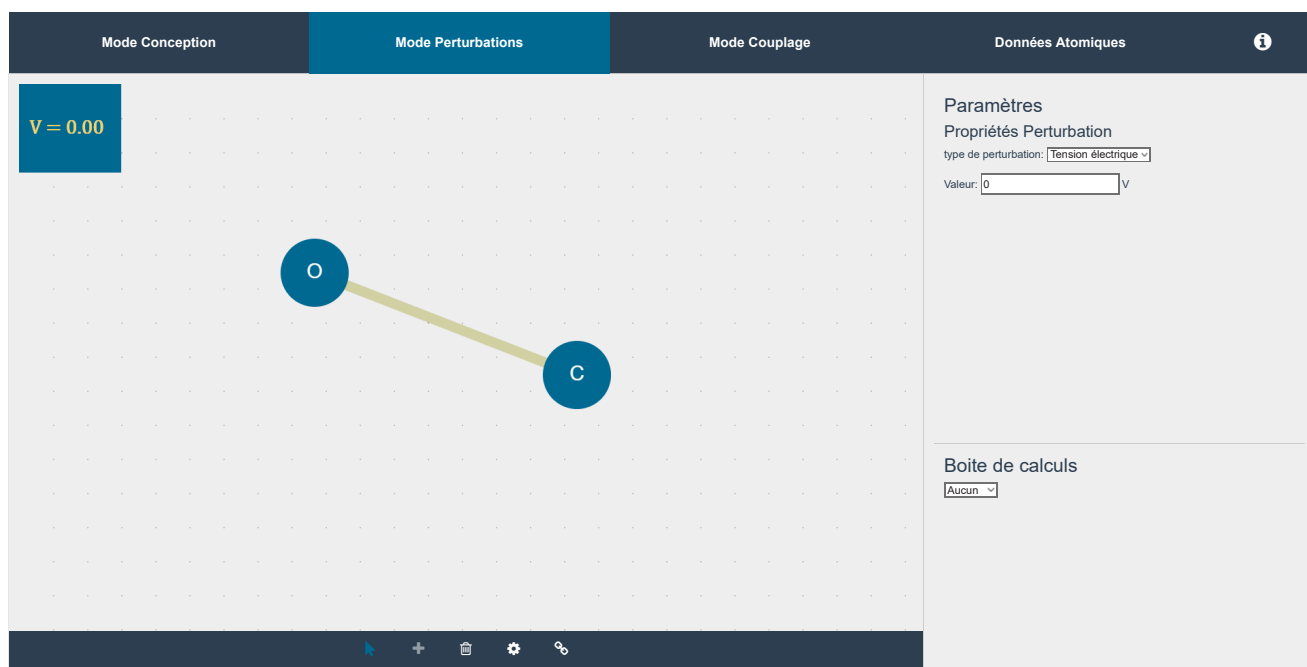
La perturbation de type champ électrique a une valeur d'intensité et un angle, et est appliquée de manière uniforme sur la molécule.



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 conservé parallèle au dipôle de la molécule et l'angle représente sa position polaire relatif à la molécule



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

Mode Conception
Mode Perturbations
Mode Couplage
Données Atomiques

### Paramètres

#### Propriétés Perturbation

type de perturbation: Charge ponctuelle

Valeur: 3  $\times 1.602 \times 10^{-19}$  C

Distance: 100 nm

---

#### Boite de calculs

Energie

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

$$= \frac{9 \times 10^9 \text{ Jm/C}^2 \times 2.000 \times 1.602 \times 10^{-19} \text{ C} \times 3 \times 1.602 \times 10^{-19} \text{ C}}{100 \times 10^{-9} \text{ m}}$$

$$U = 1.386 \times 10^{-38} \text{ J}$$

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

Mode Conception
Mode Perturbations
Mode Couplage
Données Atomiques

### Paramètres

#### Propriétés Perturbation

type de perturbation: Charge ponctuelle

Valeur: 3  $\times 1.602 \times 10^{-19}$  C

Distance: 100 nm

---

#### Boite de calculs

Force

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

$$= \frac{9 \times 10^9 \text{ Jm/C}^2 \times 2.000 \times 1.602 \times 10^{-19} \text{ C} \times 3 \times 1.602 \times 10^{-19} \text{ C}}{(100 \times 10^{-9})^2 \text{ m}^2}$$

$$F = 1.386 \times 10^{-38} \text{ N}$$

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

# Données Atomiques

Mode Conception			Mode Perturbations			Mode Couplage			Données Atomiques		<div><div></div></div>	
Télécharger CSV												
Recherche												<div><div></div></div>
Symbole	Nom	Nombre Atomique	Masse Atomique	Rayon Ionique	Rayon Covalent	Nombre de Masse	Nombre de Neutrons	Électronégativité	Première Énergie Ionisation	Électrons de Valence	Polarisabilité	
H	Hydrogène	1	1.00797	0.208	30	1	0	2.1	1312	1	4.50711	
He	Hélium	2	4.0026	--	28	4	2	--	2372.3	2	1.38375	
Li	Lithium	3	6.941	0.068	128	7	4	1	520.2	1	164.1125	
Be	Béryllium	4	9.01218	0.031	96	9	5	1.6	899.5	2	37.74	
B	Bore	5	10.81	--	84	11	6	2	800.6	3	20.5	
C	Carbone	6	12.011	0.26	69	12	6	2.5	1086.5	4	11.3	
N	Azote	7	14.0067	0.171	71	14	7	3	1402.3	5	7.4	
O	Oxygène	8	15.9994	0.14	66	16	8	3.5	1313.9	6	5.3	
F	Fluor	9	18.998403	0.136	57	19	10	4	1681	7	3.74	
Ne	Néon	10	20.179	--	58	20	10	--	2080.7	8	2.6611	
Na	Sodium	11	22.98977	0.095	166	23	12	0.9	495.8	1	162.7	
Mg	Magnésium	12	24.305	0.065	141	24	12	1.3	737.7	2	71.2	
Al	Aluminium	13	26.98154	0.05	121	27	14	1.6	577.5	3	57.8	
Si	Silicium	14	28.0855	0.041	111	28	14	1.9	786.5	4	37.3	
P	Phosphore	15	30.97376	0.212	107	31	16	2.2	1011.8	5	25	

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 Perturbations				Mode Couplage			Données Atomiques			<div><div></div><div></div><div></div></div>	
Télécharger CSV															
Recherche															<div><div></div><div></div><div></div></div>
<div><div></div><div></div><div></div></div> Symbole	<div><div></div><div></div><div></div></div> Nom	<div><div></div><div></div><div></div></div> Nombre Atomique	<div><div></div><div></div><div></div></div> Masse Atomique	<div><div></div><div></div><div></div></div> Rayon Ionique	<div><div></div><div></div><div></div></div> Rayon Covalent	<div><div></div><div></div><div></div></div> Nombre de Masse	<div><div></div><div></div><div></div></div> Nombre de Neutrons	<div><div></div><div></div><div></div></div> Électronégativité	<div><div></div><div></div><div></div></div> Première Énergie Ionisation	<div><div></div><div></div><div></div></div> Électrons de Valence	<div><div></div><div></div><div></div></div> Polarisabilité				
XX	Test	10	3	30	200	20	10	4	3	2	13				
H	Hydrogène	1	1.00797	0.208	30	1	0	2.1	1312	1	4.50711				
He	Hélium	2	4.0026	--	28	4	2	--	2372.3	2	1.38375				
Li	Lithium	3	6.941	0.068	128	7	4	1	520.2	1	164.1125				
Be	Béryllium	4	9.01218	0.031	96	9	5	1.6	899.5	2	37.74				
B	Bore	5	10.81	--	84	11	6	2	800.6	3	20.5				
C	Carbone	6	12.011	0.26	69	12	6	2.5	1086.5	4	11.3				
N	Azote	7	14.0067	0.171	71	14	7	3	1402.3	5	7.4				
O	Oxygène	8	15.9994	0.14	66	16	8	3.5	1313.9	6	5.3				
F	Fluor	9	18.998403	0.136	57	19	10	4	1681	7	3.74				
Ne	Néon	10	20.179	--	58	20	10	--	2080.7	8	2.8611				
Na	Sodium	11	22.98977	0.095	166	23	12	0.9	495.8	1	162.7				
Mg	Magnésium	12	24.305	0.065	141	24	12	1.3	737.7	2	71.2				
Al	Aluminium	13	26.98154	0.05	121	27	14	1.6	577.5	3	57.8				
Si	Silicium	14	28.0855	0.041	111	28	14	1.9	786.5	4	37.3				

