

SIMULATEUR DE MOLÉCULES COULOMBIQUES

CHM-1000

Christophe Bolduc
Jesse Greener

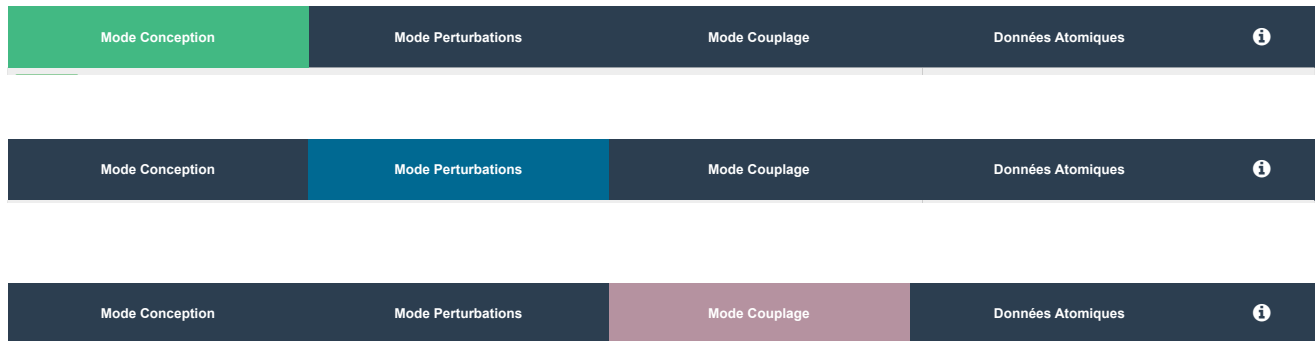
Département de Chimie
Université Laval

Contenu

Barre de navigation 3

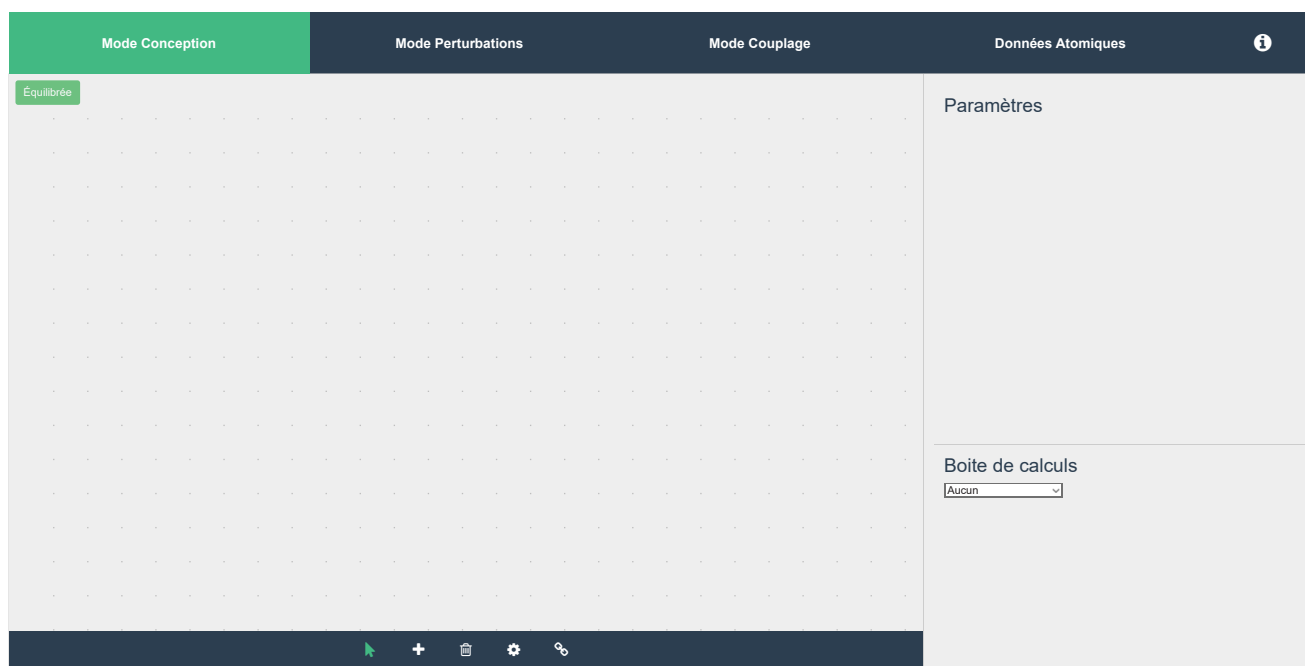
Mode Conception 4

Barre de navigation



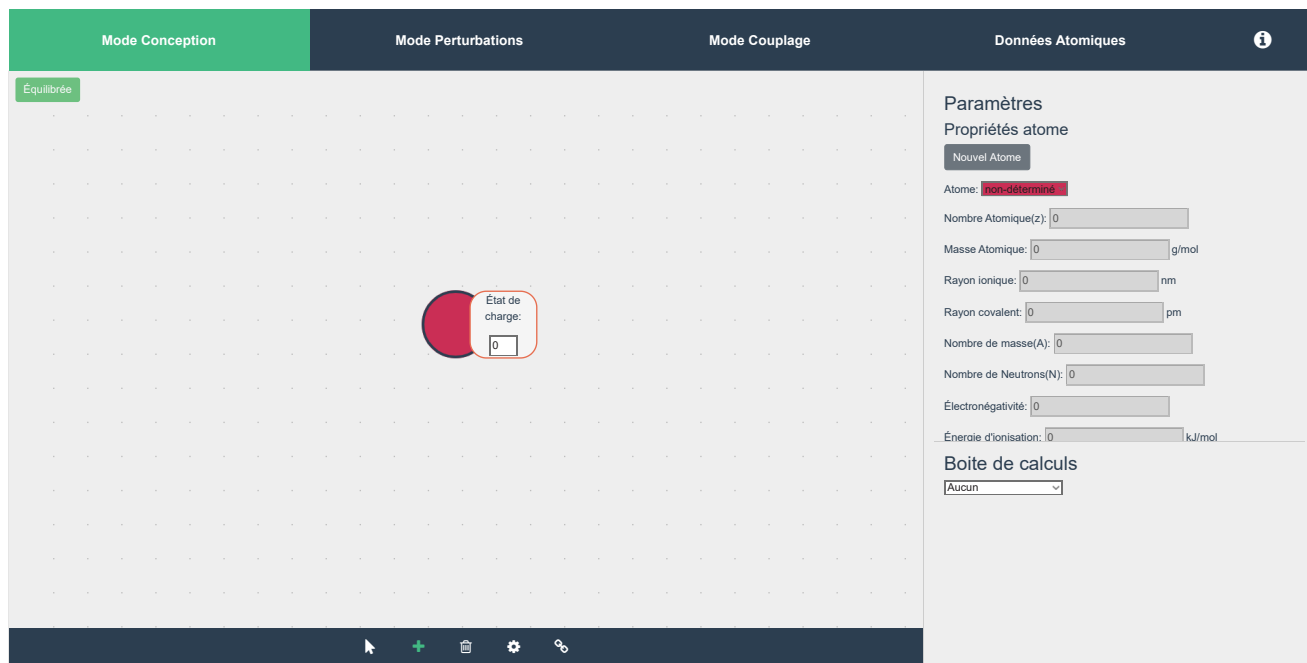
La barre de navigation permet d'accéder aux différents modes du simulateurs. Chacun de ces modes est présenté dans ce document. L'icone d'interrogation permet d'accéder au présent document. Chacun des trois modes a sa couleur caractéristique.

Mode Conception

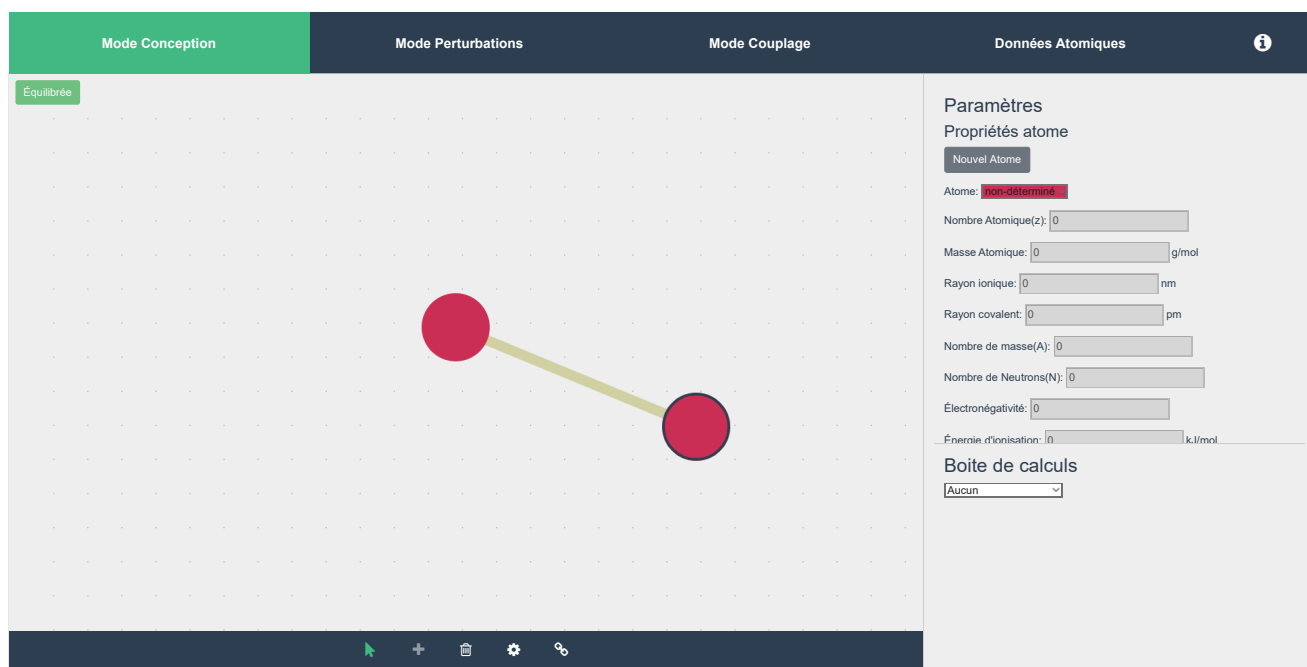


Le mode conception permet de créer la molécule à analyser. La fenêtre comportant le quadrillé représente l'interface graphique où l'utilisateur peut placer et interagir avec les atomes. Une barre d'outils est également disponible au bas pour définir le type d'interaction avec l'interface. La section "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 Centre les deux. Puisque le nombre maximum d'atomes est atteint, l'outil est automatiquement changer pour sélection et l'outil ajouter est indisponible.

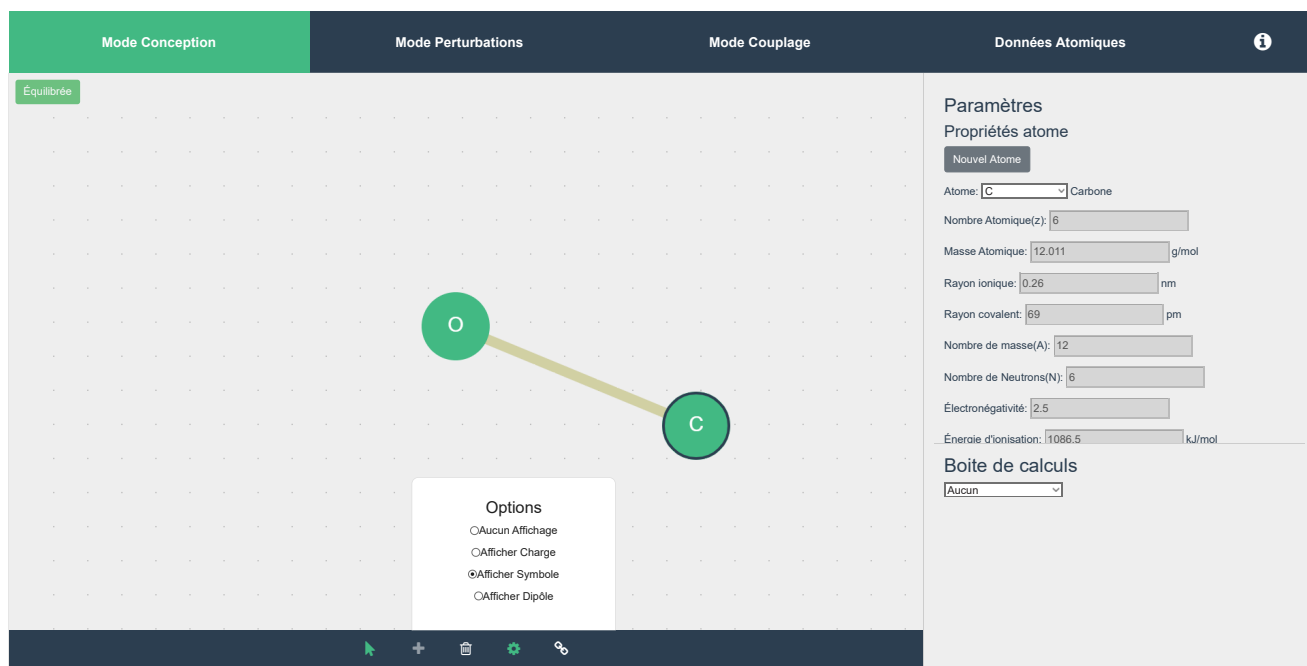
Les atomes ajoutés sont en rouge pour indiquer qu'ils ne sont pas définis. Pour définir un atome, il doit être sélectionné en cliquant sur celui-ci avec l'outil sélection, puis, dans la fenêtre paramètres, un atome pré-défini peut-être sélectionner ou un nouvel atome peut être défini avec le bouton "Nouvel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

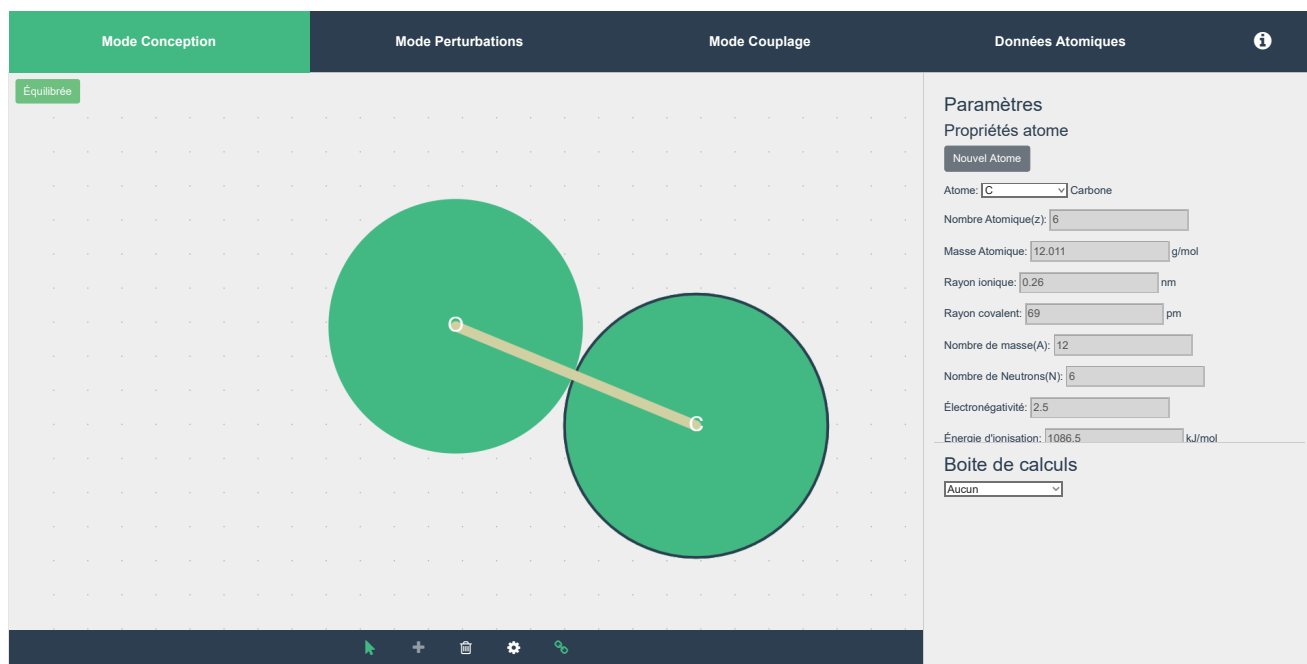
The screenshot shows the 'Mode Conception' tab selected. In the center workspace, two green circular atoms are connected by a yellow bond. The atom on the left is labeled 'O' (Oxygen) and the one on the right is labeled 'C' (Carbon). The right sidebar is titled 'Données Atomiques' and contains a 'Paramètres' section. Under 'Propriétés atome', there is a 'Nouvel Atome' button and a dropdown menu currently showing 'Oxygène'. Below this are input fields for various atomic properties: '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', and 'Énergie d'ionisation: 1313.9 kJ/mol'. At the bottom of this section is a 'Boîte de calculs' dropdown menu set to 'Aucun'. The bottom toolbar contains 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' with a close button. It contains a 'Propriétés atome' section with the following fields: 'Symbole:' (text input), 'Nom:' (text input), 'Nombre Atomique(z):' (input with value 0), 'Masse Atomique:' (input with value 0 and unit 'g/mol'), 'Rayon ionique:' (input with value 0 and unit 'nm'), 'Rayon covalent:' (input with value 0 and unit 'pm'), 'Nombre de masse(A):' (input with value 0), 'Nombre de Neutrons(N):' (input with value 0), 'Électronégativité:' (input with value 0), 'Énergie d'ionisation:' (input with value 0 and unit 'kJ/mol'), 'Électrons de valence:' (input with value 0), and 'Polarisabilité:' (input with value 0). At the bottom right of the dialog are two buttons: 'Annuler' (red) and 'Enregistrer' (green). The background workspace shows the same molecule with the 'O' atom selected.



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.

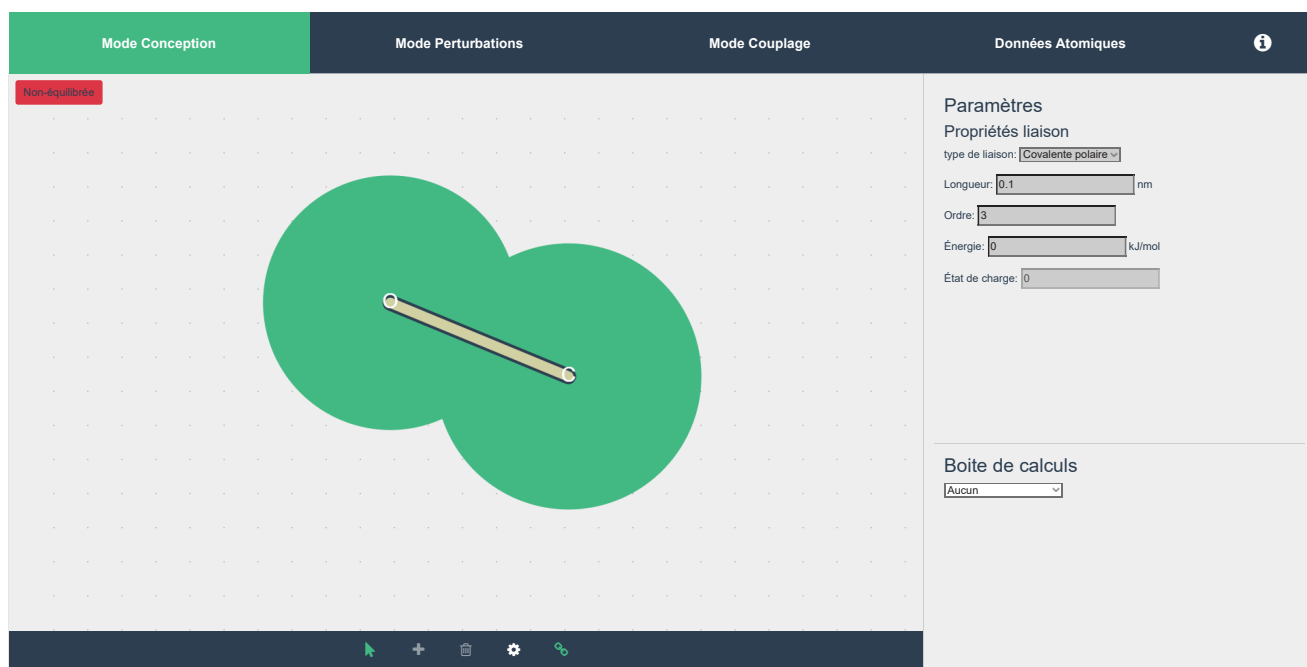
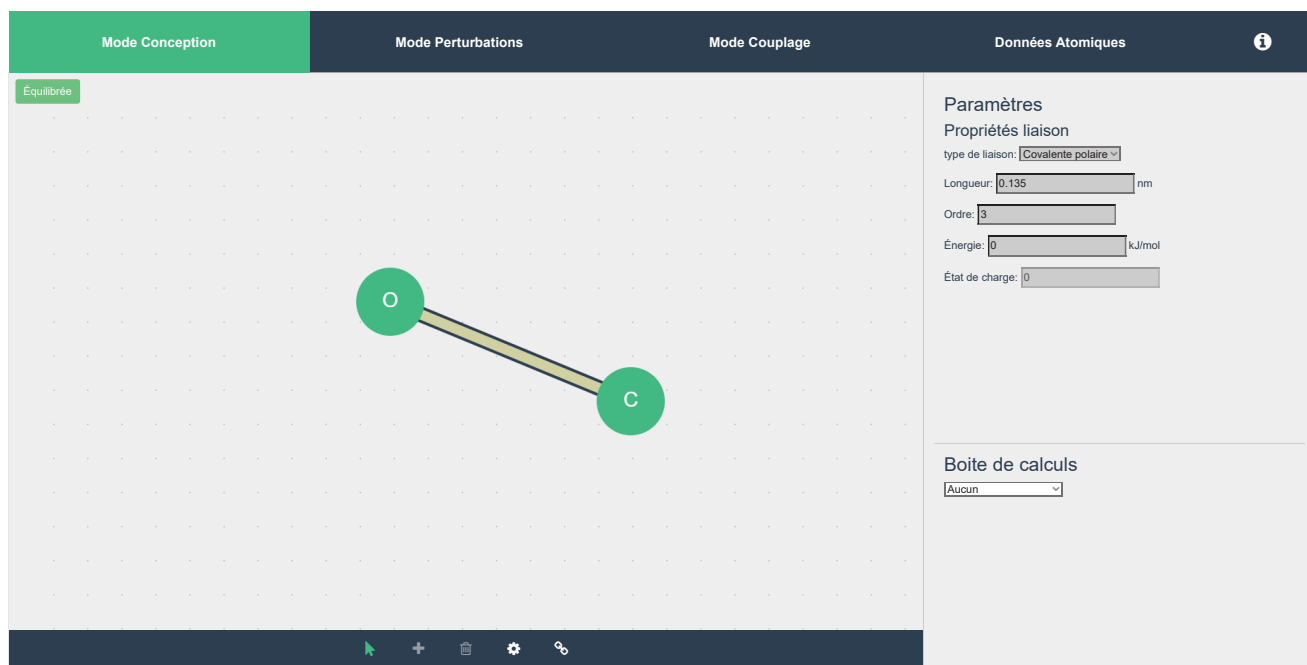
Le paramètre adjacent représenté par un icon de lien, permet d'activer le mode d'affichage proportionnel des atomes basé sur le rayon de chaque.



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 ▼

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

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

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

