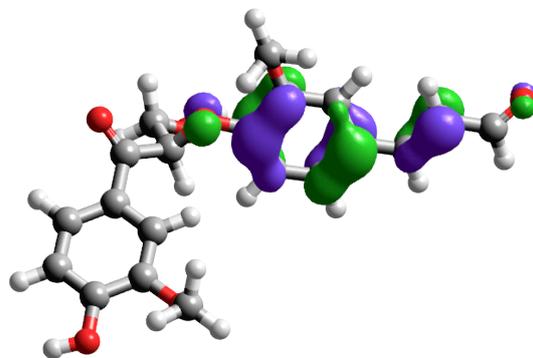


Travaux Pratiques de Chimie Quantique

UAB.Tlemcen



Dr. MANSOURI Hadjer

Université Abou-Bekr Belkaïd –Tlemcen

Faculté des Sciences

Département de Chimie

Email : *hadjer.mansouri@univ-tlemcen.dz*

Table des matières



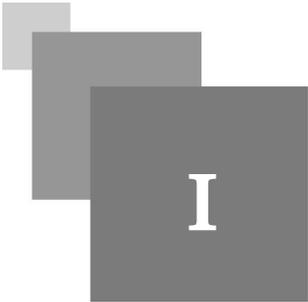
Objectifs	3
I - Chapitre I :Outils et Logiciels de Modélisation	4
1. TP N°1 : Initiation à l'utilisation du logiciel HyperChem	5
2. Manipulation	5
2.1. <i>Menu de calcul</i>	7
3. Applications et exercices	7

Objectifs

Le présent support du cours + fiches de travaux pratiques de la matière « **chimie quantique** » est destiné aux étudiants de 3ème licence chimie (département de chimie, faculté des sciences, université Abou-Bekr Belkaid de Tlemcen). Il vise à fournir aux étudiants un ensemble de connaissances de base sur les méthodes les plus souvent rencontrées en modélisation moléculaire afin d'atteindre différents objectifs :

- Compréhension des Principes Fondamentaux : Les étudiants comprendront les principes de base de la chimie quantique et de la modélisation moléculaire.
- Maîtrise des Outils de Modélisation : Les étudiants sauront utiliser des logiciels de modélisation moléculaire.
- Application des Techniques de Modélisation : Les étudiants appliqueront des techniques spécifiques pour étudier les molécules.
- Analyse et Interprétation des Résultats : Les étudiants interpréteront les données des simulations moléculaires.
- Développement de Compétences Pratiques : Les étudiants développeront des compétences pratiques en modélisation.

Chapitre I : Outils et Logiciels de Modélisation



I

La **chimie quantique** est cruciale pour plusieurs domaines scientifiques elle permet de simuler et de prédire le comportement des systèmes chimiques complexes.

La **modélisation moléculaire** c'est la description des molécules et de leurs interactions. Elle a pour but de prévoir la structure et la réactivité des molécules ou des systèmes de molécules en appliquant les méthodes de la chimie quantique.

Les méthodes de la modélisation moléculaire comprennent trois catégories.

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

En modélisation moléculaire, on trouve différentes techniques de visualisation, de manipulation, d'analyse et de calcul des structures moléculaires.

Schématiquement, on distingue les techniques de graphisme moléculaire permettant de représenter sur un écran la structure 2D ou 3D d'une molécule, de la

manipuler (rotation, translation, changement de conformation, superposition, etc.) de façon interactive et de l'analyser (calculs de paramètres géométriques tels que

distances, angles, calcul de l'énergie, moment dipolaire, la charge, etc.).

Objectifs :

1. Connaissance : **Connaître** les outils et logiciels de modélisation moléculaire tel que hyperchem.
2. Compréhension : **Décrire** les fonctionnalités de base de ces outils et logiciels.
3. Application : **Créer** et effectuer des optimisations de molécules simples.
4. Analyse : **Interpréter** et **identifier** les résultats et les erreurs dans les simulations.
5. Synthèse : **Élaborer** des simulations pour étudier des réactions chimiques spécifiques.
6. Évaluation : **Comparer** et discuter les performances des logiciels de modélisation.

1. TP N°1 : Initiation à l'utilisation du logiciel HyperChem

1. Information sur le logiciel

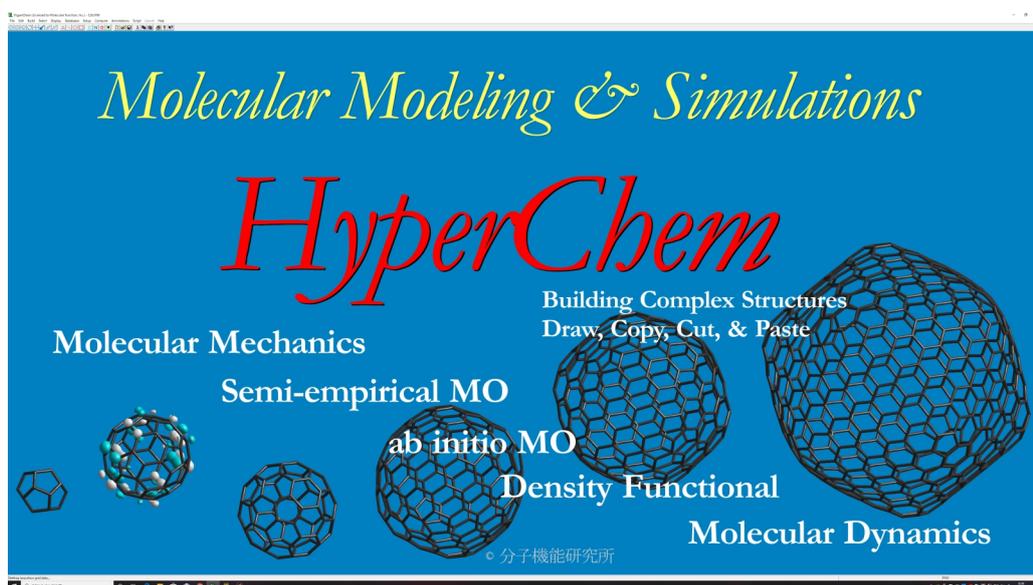
Hyperchem est un logiciel complet de modélisation moléculaire permettant des études de structure de spectroscopie et de réactivité moléculaires. Il incorpore

une interface graphique pour unifier la visualisation et l'animation '2D/3D' avec des calculs de chimie quantique de mécanique et dynamique moléculaires.

Cf. "Introduction and Use of HyperChem"

2. But du TP

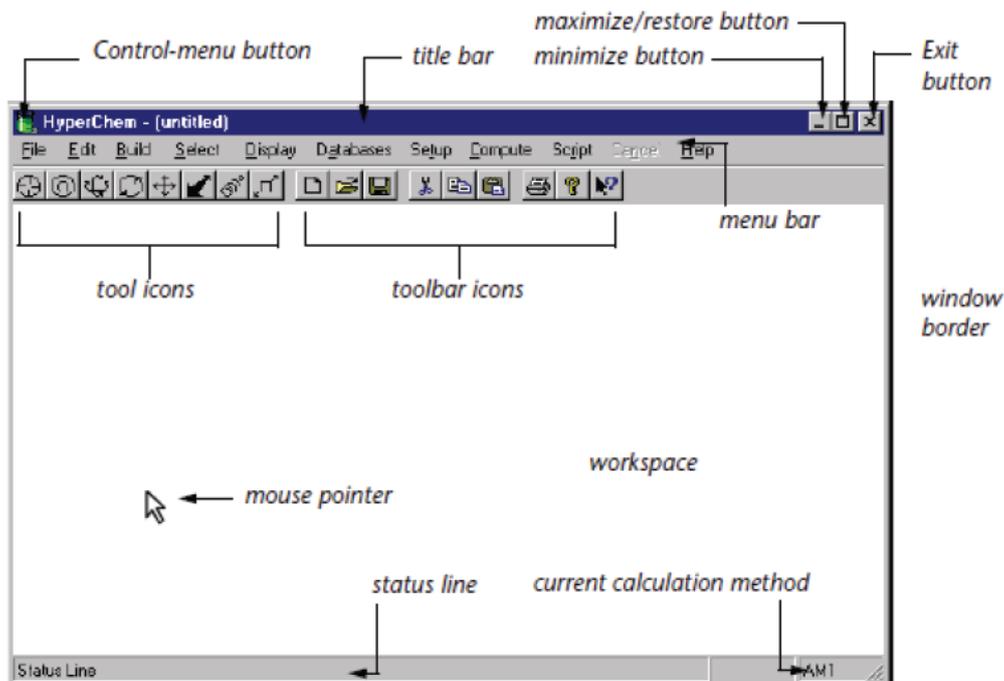
Initiation à l'utilisation de l'interface graphique du logiciel HyperChem pour la représentation et le traitement quantochimique des molécules.



Logiciel HyperChem

2. Manipulation

Pour lancer l'application HyperChem: Cliquez sur le raccourci du programme, un bécquet contenant une solution verte. La fenêtre HyperChem apparaît comme suit



Familiarisez-vous avec les différentes parties de la fenêtre HyperChem.

- Title Bar (Barre de titre)
- Menu Bar (Barre de menus)
- Tool Bar (Barre d'outils)
- Workspace (Espace de travail)
- Status Line (Ligne d'état)
- Help (Aide)
- Control Menu Button (Menu Bouton de contrôle)
- Maximize/Minimize Buttons (Boutons pour Maximiser / Minimiser)

Le menu principal contient les différentes fonctionnalités de HyperChem : **File** (fichier); **Edit** (éditer); **Build** (construire); **Select** (sélectionner), **Display** (afficher);

Databases (base des données); **Setup** (méthode); **Compute** (calcul), ...etc.

Créer un fichier des données (file.hin) et utiliser le menu suivant pour dessiner une molécule, en cliquant sur l'option utile :



Complément : Examiner les boutons de raccourcis

a. Outil de construction : cliquer pour ajouter un atome. Auparavant, il faut définir l'atome choisi dans le tableau

périodique des éléments, soit par un double clic sur cette icône, soit par le menu Build / Default element.

b. Outil de sélection/désélection : cliquer à gauche pour sélectionner un ou plusieurs atomes, ou une ou plusieurs

liaisons. Cet outil permet aussi d'afficher le type et le numéro d'un atome quelconque de la molécule et ainsi de mesurer les distances, les angles et les angles de torsion entre atomes. Les valeurs de distance et d'angles sont données en bas de de l'interface.

- Cliquer à droite sur un atome ou une liaison pour désélectionner, ou encore cliquer à droite dans l'espace de l'écran pour désélectionner l'ensemble.

c. Rotation de la molécule autour des 2 axes dans le plan de l'écran.

d. Rotation de la molécule autour de l'axe perpendiculaire au plan de l'écran.

e. Translation de la molécule : déplacer la molécule dans le plan de l'écran.

f. Z-Translation de la molécule : afficher le système d'axe (Oxyz) et sélectionner un atome considéré comme origine.

g. Zoom : agrandir ou réduire la structure.

h. Z-Clipping planes : afficher le système d'axe (Oxyz) et sélectionner une liaison considérée comme axe principal de

la molécule.

i. Clear the workspace : pour effacer l'écran.

Conseil

- Pour augmenter la valence d'un atome, sélectionner-le, puis cliquer sur **Build** suivi par **Allow Arbitrary Valence**.

2.1. Menu de calcul

- Cliquer sur **Setup** et choisir la famille des méthodes quantochimiques (semiempiriques, ab-initio, ...), puis cliquer sur la méthode de calcul préférée.

- Dans **Options**, on peut tenir compte de la charge de la molécule (cation, anion ou neutre).

- Sauvegarder le fichier des données sous forme file.hin.

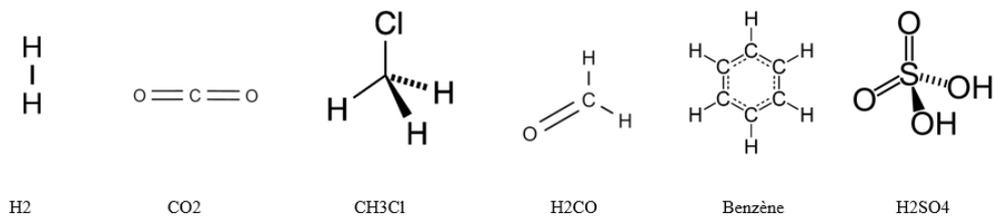
- Réserver l'espace de stockage des résultats de calcul en sauvegardant le fichier sous forme file.log.

- Lancer le calcul en cliquant sur Compute suivi par **Single Point**.

3. Applications et exercices

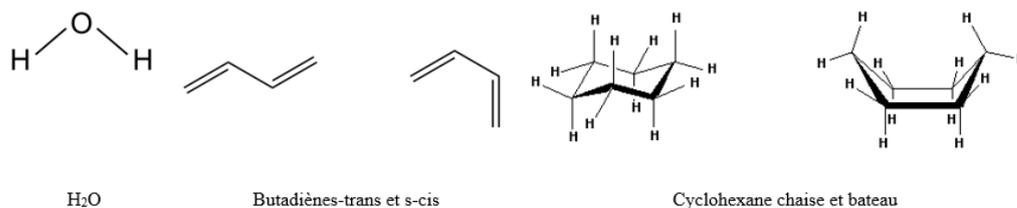
a. Dessiner les molécules suivantes en mode « *model Build* » et mesurer les paramètres géométriques (**longueurs de liaisons, angles de liaisons, angles dièdres**) :

H₂, CO₂, CH₃Cl, H₂CO, Benzène, H₂SO₄.



b. Représenter les molécules suivantes :

- H₂O avec les paramètres OH=0.95Å°, HOH=105°.
 - Butadiène : configurations géométriques s-trans et s-cis (dessiner la forme **s-trans** puis la transformer en forme **s-cis**).
 - Cyclohexane : conformations chaise et bateau (dessiner la forme **chaise** puis la transformer en forme **bateau**).
 - Configurations absolues R et S :
- Dessiner une molécule avec un atome de carbone asymétrique (4 groupements différents).
 - Sélectionner l'atome asymétrique, puis aller à **Display/Labels/Chirality** pour voir la configuration R ou S.
 - Permuter entre deux groupements pour avoir la deuxième configuration.



□