جامعــة باجـي مختـار- عنـابة

**BADJI MOKHTAR-ANNABA UNIVERSITY**

**UNIVERSITE BADJI MOKHTAR ANNABA**

**Vice-Rectorat de la Graduation نيابة المديرية** **للتدرج**

Faculté :………………Sciences………………………………………………………………

Département : ………Chimie………………………………………………………………

**SYLLABUS**

Domaine : …………………………………………Sciences de la matière…………………

 Filière : …………………………………………Chimie……………………………………

 Spécialité :……………**Chimie organique**…………………………………………

 Semestre :……2eme Semestre ….……Année universitaire :…… 2019-2020……………

Unité d’enseignement :…UE fondamentale 6………

Matière :………………**Initiation Modélisation moléculaire**…………………………………

 Crédit …………………2……………………………Coefficient…………………2……….………..

Volume horaire hebdomadaire total :………45……………………………………………

* Cours (nombre des heures par semaine) : 02 heures à 04 h par semaines (6 chapitres 20 heures)
* Travaux dirigés : 2 heures en alternance. (3 TD, 10 heures)
* Travaux pratiques (nombre des heures par semaine) : 02 heures en alternance avec le TD. (3 TP, 12 heures )
* Contrôle des connaissances. (2 fois 1,5 heures)

Langue d’enseignement : ………………………………Français…………………………………………………………

Responsable de la matière :…Dr Abdelhafid Djerourou…..Grade :…Professeur

Localisation du bureau :…Hall de Recherche Bloc E, 1er étage , Campus Sidi Amar

 Email……………..djerourou@univ-annaba.org....Numéro Téléphone…0662449093

Emploi du temps de tutorat **:**

Réception des étudiant( e)s sur leur demande……………………………………………

**Objectifs** **:** Apprendre les techniques de modélisation en chimie organique.

Les cours en ligne sont disponibles sur le site [elearning](https://elearning.univ-annaba.dz/course/view.php?id=2941) ou le de la [classroom](https://classroom.google.com/u/0/c/NjE3NDEzMDU4OTha?hl=fr)

**Cours théorique :**

**Le 9/02/2020** *Chapitre1*: Définitions : Modélisation Modèle Modèle mathématique d'un système physique, Modélisation moléculaire, Simulation numérique

Rappels :

**Le 16/02/2020** : La liaison chimique et la théorie de Lewis

**Le 17/02/2020 Début du TD 1 :** Calcul du degré de liberté, charge formelle et paramétrisation en MM**.**

**Le 23/02/2020** *Chapitre 2* **: Approximation de base.**

a) Ecriture de l’Hamiltonien d’une molécule (enligne)

c) Séparation des mouvements nucléaires et les mouvements électroniques : approximation Born-Oppenheimer (en ligne)

**Le 24/02/2020** Séparation entre les mouvements des électrons : approximation orbitalaire.

e) Forme de la fonction d’onde totale d’une molécule dans le cadre de l’approximation orbitalaire : Application du principe de Pauli. (en ligne)

f) Approximation CLOA

**le 01/03/2020 : Suite TD1**

**Le 02/03/2020** *Chapitre 3* **:** Approche qualitative dans l’étude des structures de molécules diatomiques.

g) Interaction de deux orbitales atomiques identique : les molécules diatomiques homonucléaires,

**08/03/2020** h) Interaction de deux orbitales atomiques différentes : les molécules diatomiques hétéronucléaires .

i) Interaction entre 3 orbitales : molécules AH (en ligne)

j) Interactions entre 4 orbitales : molécules A2 (en ligne)

k) Interactions entre 4 orbitales : molécule AB (en ligne)

l) Propriétés électroniques de molécules diatomiques : Analyse de population , charges de Mulliken, indice de liaison (en ligne)

**22/03/2020 Chapitre 4 : Méthodes de Huckel** (en ligne)

m) Méthode de Huckel simple

n) Application de la Méthode de Huckel simple au système pi de molécules

o) Méthode de Huckel étendue

**05/04/2020 TD 2 :** CLAO, Etude de NO, NO+ (en ligne)

**12/04/2004 Chapitre 5 :** Les Logiciels de modélisation en Chimie Organique (en ligne)

**19/04/2018 Chapitre 8 :** La modélisation de la réactivité en Chimie Organique (en ligne)

**Travaux Pratiques :**

Le 21/04/2020 *TP N°1 :* PES et Paramétrisation à rendre avant le 10/05/2020 (en ligne)

Le 10/05/2020 TP N°1: La théorie des orbitales frontières. à rendre avant le 13/05/2020 (en ligne)

Le 30/05/2020 TP N°2 : La théorie de l’état de transition. à rendre avant le 15/05/2020 (en ligne)

Evaluation : Contrôle des connaissances et pondérations :

|  |  |
| --- | --- |
| Contrôle des connaissances | Pondérations (%) |
| Examen finalTravaux dirigésTravaux pratiquePrésence et participationMicro-interrogationsProjet de coursExposésDevoirs à domicileSortis sur terrainAutres (A préciser) |  1/2 1/2  |
| Total | 100% |

Références bibliographiques **:**

* Leo, A., & Hoekman, D. H. (1995). *Exploring QSAR.:. Fundamentals and applications in chemistry and biology* (Vol. 1). An American Chemical Society Publication.
* . Smith, W. B. (1996). *Introduction to theoretical organic chemistry and molecular modeling*. VCH Publishers.

Date et Signature du responsable de la matière :

Syllabus 2/3

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 01 | Nom et Prénoms  | Signature |
| 02 |  |  |
| 03 |  |  |
| 04 |  |  |
| 05 |  |  |
| 06 |  |  |
| 07 |  |  |
| 08 |  |  |
| 09 |  |  |
| 10 |  |  |
| 11 |  |  |
| 12 |  |  |
| 13 |  |  |
| 14 |  |  |
| 15 |  |  |
| 16 |  |  |
| 17 |  |  |
| 18 |  |  |
| 19 |  |  |
| 20 |  |  |
| 21 |  |  |
| 22 |  |  |
| 23 |  |  |
| 24 |  |  |
| 25 |  |  |
| 26 |  |  |
| 27 |  |  |
| 28 |  |  |
| 29 |  |  |
| 30 |  |  |
| 31 |  |  |
| 32 |  |  |
| 33 |  |  |
| 34 |  |  |
| 35 |  |  |
| 36 |  |  |
| 37 |  |  |
| 38 |  |  |
| 39 |  |  |
| 40 |  |  |
| 41 |  |  |
| 42 |  |  |
| 43 |  |  |
| 44 |  |  |
| 45 |  |  |
| 46 |  |  |
| 47 |  |  |

Syllabus 3/3