

Faculté des Sciences.
Département de Chimie
Master Chimie Pharmaceutique
CP 12: Initiation à la modélisation moléculaire.

NOM	Prénom

Travaux pratiques de Modélisation

TP N°1: La théorie des Orbitales Moléculaire Frontières (FMO).

(Changer le numéro de TP et le Titre)

2ème page

Introduction générale: (Faire ici un bref rappel bibliographique sur la FMO (5 à 10 lignes maximum))

But du travail: (Expliquer le but rechercher en faisant ce TP (5 à 10 lignes maximum))

Choix de la réaction chimique: (Expliquer les raisons de votre choix et dessiner la réaction en mettant en relief les réactants, les produits ...etc.)

- Une réaction d'addition de HX sur un alcène
- Une réaction de Diels Alder.
- Une réaction de cycloaddition 1,3- dipolaire.

Procédure:

- Décrire les étapes de votre démarche avec les calculs effectués.
- Faites les schémas réactionnels avec les logiciels de dessin Biovia et Chems sketch.
- Insérer les captures d'écran ou des images de Gaussview de vos résultats.

Commentaires: (faites les commentaires nécessaires en expliquant les résultats trouvés.)

Conclusion: (Conclure en faisant apparaître l'intérêt de la théorie ...dans l'étude des mécanisme des réactions organiques.)