

التمرين الأول: 5 ن

1. عرف الاختصارات التالية: MM DFT HOMO LUMO QSAR

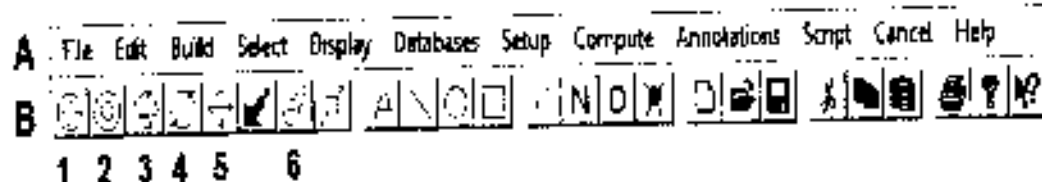
2. ماهي أنواع الطرق احسابية المستخدمة في النمذجة؟ أعطى مثال غير كل نوع؟

3. قسما بحساب قيم طاقات المدارات الجزيئية المحسوبة لثلاث مركبات:

المركب	$E_{HOMO}$	$E_{LUMO}$
1	-0.388	0.146
2	-0.245	0.095
3	-0.200	-0.113

1- أيهما الكليوفيل الأقوى و أيهما الإلكتروني الأقوى؟ لماذا؟

التمرين الثاني: 8 ن



الشكل 1

1. ما هو اسم البرنامج الخاص بشكل 1؟
2. سمى لشريطين A و B؟
3. عرف الرموز من 1 إلى 6؟
4. صف كل المهام الخاصة بالرموز 1 و 2؟
5. اشرح بالتفصيل و بدقة الخطوات اللازمة لرسم مركب  $C_2H_4$  بواسطة البرنامج الخاص بشكل 1 و أذكر الأيقونات المستخدمة في كل خطوة

للمرشد في الامتحان - كبرياء شريفة

المرشد في الأول

215

QSAR: quantitative structure-Activity-Relationship

LUMO: Lowest unoccupied Molecular orbital

HOMO: Highest occupied Molecular orbital

DFT: Density Functional Theory

MM: Molecular Mechanics

115

MMT: Molecular Mechanics

AM1, PM3, PM5

HF, MP2, DFT

3\*115 كبرياء شريفة الامتحان 3  
لان الامتحان الامتحان الامتحان

3\*115 كبرياء شريفة الامتحان 3  
لان الامتحان الامتحان الامتحان

دریغہ اشافیہ (۱۸)

۱۰ اسم البرنامہ Hypochrom (۱۲۵)

۱۲ A: تقوید زبجہ الأوامر (۱۱۵)  
B: تصدیقہ ایقونات اولاد

۱۳ استوریہ المصنوعہ (۱۱۵)  
(۱) رسم (۲) رسم (۳) تصدیقہ الزمانہ

(۴) تصدیقہ فی الحک - ۱۰ (۵) ازادہ ۱۰ (۶) تصدیقہ و رسم

۱۴ مدفعہ الموزونہ ۱ و ۲

(۱) مدفعہ الموزونہ بالعدد الموزون (۱۱۲۵)  
• تصدیقہ الموزونہ بالعدد

• مدفعہ الموزونہ علیہ مرتبہ متتالیاتہ و جدول الجدول الموزونہ  
• ازادہ الموزونہ (الأحادیث الموزونہ)

(۲) مدفعہ الموزونہ علیہ بالعدد الموزونہ (۱۱۲۵)  
• تصدیقہ الموزونہ بالعدد الموزونہ

• مدفعہ الموزونہ علیہ مرتبہ متتالیاتہ علیہ ازادہ الموزونہ

۱۵ الاختصاصات اللازمة لرسم الموزون (۱۱۲۵)

(۱۱۲۵)

- ۱. رسم الموزونہ علیہ الموزونہ الموزونہ
- ۲. رسم الموزونہ علیہ الموزونہ الموزونہ
- ۳. رسم الموزونہ علیہ الموزونہ الموزونہ
- ۴. رسم الموزونہ علیہ الموزونہ الموزونہ

وقت كروز جوار ساعة الاسبوع رقم ٨

٥- مناقشة فترتيه هذنا المشي على الاسبوع رقم ٤ وقتها اضافة الالفيدروجين  
والتعبير بالجدول

16 اضافة ابي عبيد

٧ يوم = (68(, 688) - kcal/mol = 10,9425 kcal/mol

(٨) طاقة الربط = 533,63108 kcal/mol

الوزن المولوي = 16,5569 kcal/mol

مصفوفة التناظر:  $H^A$

التصنيفات الستة: (٩)

11 اضافة الربط في دسوس: (10)  $CO_2$

12 اضافة الربط في دسوس: (11)  $CO_2$

(1) الحصول الترميز (2) الحلقان (3) الجذور الألكيلية

(4) اربطة و تحصيل الروابط (5) تعديل الروابط الأيونية (الذواجن)

(6) تعديل الروابط الأيونية (7) اضافة الالفيدروجين

(8) حذف الذرات (9) تحصيل الركل (10) ترميزها

(11) الجذور الحرة (12) ترميزها (13) التناظر

(14) حذف الكربون (حذف الركل)

1. در احدی حساب می شود

calculate -> Commission calculation setup -> job type ->

optimization -> Method -> PM3 -> salami:

0.75

• lacy

• 14 - 15 - 16 - 17 - 18 - 19 - 20

• c-hh

• g-gg

0.75

15 عدد از روابط 5

5 عدد از روابط الکترونی

5 عدد از روابط کربون