



التمرين الأول: 5 ن

1. عرف الاختصارات التالية: MM DFT HOMO LUMO QSAR

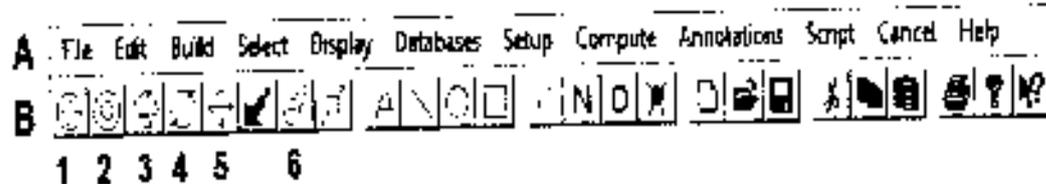
2. ماهي أنواع الطرق احسابية المستخدمة في النمذجة؟ أعطى مثال غير كل نوع؟

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 البكليفيل 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 الاول

215

QSAR: quantitative structure-Activity-Relationship

LUMO: Lowest unoccupied Molecular orbital

HOMO: Highest occupied Molecular orbital

DFT: Density Functional Theory

MM: Molecular Mechanics

115

انواع طرق الحساب

A. طرق المحاكاة الجزيئية: MM, MM+

B. طرق وصف الجزيئات: AM1, PM1, PM2

C. طرق النظرية: HF, MP2, DFT

015

البيانات التجريبية والبيانات النظرية

لان الامثلة: NO, NO2, NO3

015

في الامتحان: طرق الحساب الجزيئية

لان الامثلة: LUMO, HOMO

دریغہ اشافیہ (۱۸)

۱۰ اسم البرنامہ Hypochrom (۱۲۵)

۱۲ A: تصویب زبیر "الأوامر"  
B: تصویب زبیر "الایقونات اولاد"

۱۳ تصویب زبیر "الأوامر" (۱۱۵)  
(۱) رسم (۲) رسم (۳) تصویب زبیر الزمانہ

(۴) تصویب زبیر فی الحک - ۱۰ (۵) ازادہ ۱۰ و ۱۱ (۶) تصویب زبیر و رسم

۱۴ مدفعہ الرسمین ۱ و ۲

(۱) مدفعہ الرسمین ۱ و ۲ بالاسرار الرسم (۱۲۵)  
• رسم  
• رسم

• مدفعہ الرسمین علیہ مرتبہ متناہیہ رسمین الرسمین الرسمین  
• رسمین الرسمین (الاسرار الرسمین الرسمین)

(۲) مدفعہ الرسمین علیہ بالاسرار الرسمین الرسمین (۱۲۵)  
• رسم  
• رسم

• مدفعہ الرسمین علیہ مرتبہ متناہیہ رسمین الرسمین الرسمین  
• رسمین الرسمین الرسمین

۱۵ الاختصاصات اللازمة للرسم الرسمین الرسمین (۱۱۱)

(۱۲۵)

- ۱. رسمین الرسمین الرسمین الرسمین الرسمین الرسمین
- ۲. رسمین الرسمین الرسمین الرسمین الرسمین الرسمین
- ۳. رسمین الرسمین الرسمین الرسمین الرسمین الرسمین
- ۴. رسمین الرسمین الرسمین الرسمین الرسمین الرسمین

وقت كروز جوار ساعة الاسبوع رتبة ٨

٥- مناقشة فخرية ممتازة مع الاميرة رتبة في وقتها اضافة الى التبرير

١٦ / مناقشة في عيشة

٧ / ٦٤ (١, ٦٤٤) - ٦٤ (١, ٦٤٤) = kcal/mol

(٨) طاقة الربط = ٥٣٣,٦٣١٥٨ kcal/mol

الوزن المولاري = ١٦,٥٥٦٩ kcal/mol

مصفوفة التناظر:  $H^A$

التصنيفات الستة: (٩)

١١ / اسم البرنامج: 0.25 (Newstein 0.3)

١٢ / تعريف الدالة: 3.15

- (١) الحصول التام على الحلقات (٣) الجذور الأربعة
- (٢) اعداد و تحميل الذاكرة (٥) تعديل الذاكرة (١٠) اعداد
- (٣) تعديل الذاكرة (١١) اعداد الذاكرة (١٢) اعداد
- (٤) حذف الذاكرة (١٣) اعداد الذاكرة (١٤) اعداد
- (٥) اعداد الذاكرة (١٥) اعداد الذاكرة (١٦) اعداد
- (٦) اعداد الذاكرة (١٧) اعداد الذاكرة (١٨) اعداد
- (٧) اعداد الذاكرة (١٩) اعداد الذاكرة (٢٠) اعداد
- (٨) اعداد الذاكرة (٢١) اعداد الذاكرة (٢٢) اعداد
- (٩) اعداد الذاكرة (٢٣) اعداد الذاكرة (٢٤) اعداد
- (١٠) اعداد الذاكرة (٢٥) اعداد الذاكرة (٢٦) اعداد
- (١١) اعداد الذاكرة (٢٧) اعداد الذاكرة (٢٨) اعداد
- (١٢) اعداد الذاكرة (٢٩) اعداد الذاكرة (٣٠) اعداد
- (١٣) اعداد الذاكرة (٣١) اعداد الذاكرة (٣٢) اعداد
- (١٤) اعداد الذاكرة (٣٣) اعداد الذاكرة (٣٤) اعداد
- (١٥) اعداد الذاكرة (٣٥) اعداد الذاكرة (٣٦) اعداد
- (١٦) اعداد الذاكرة (٣٧) اعداد الذاكرة (٣٨) اعداد
- (١٧) اعداد الذاكرة (٣٩) اعداد الذاكرة (٤٠) اعداد
- (١٨) اعداد الذاكرة (٤١) اعداد الذاكرة (٤٢) اعداد
- (١٩) اعداد الذاكرة (٤٣) اعداد الذاكرة (٤٤) اعداد
- (٢٠) اعداد الذاكرة (٤٥) اعداد الذاكرة (٤٦) اعداد
- (٢١) اعداد الذاكرة (٤٧) اعداد الذاكرة (٤٨) اعداد
- (٢٢) اعداد الذاكرة (٤٩) اعداد الذاكرة (٥٠) اعداد
- (٢٣) اعداد الذاكرة (٥١) اعداد الذاكرة (٥٢) اعداد
- (٢٤) اعداد الذاكرة (٥٣) اعداد الذاكرة (٥٤) اعداد
- (٢٥) اعداد الذاكرة (٥٥) اعداد الذاكرة (٥٦) اعداد
- (٢٦) اعداد الذاكرة (٥٧) اعداد الذاكرة (٥٨) اعداد
- (٢٧) اعداد الذاكرة (٥٩) اعداد الذاكرة (٦٠) اعداد
- (٢٨) اعداد الذاكرة (٦١) اعداد الذاكرة (٦٢) اعداد
- (٢٩) اعداد الذاكرة (٦٣) اعداد الذاكرة (٦٤) اعداد
- (٣٠) اعداد الذاكرة (٦٥) اعداد الذاكرة (٦٦) اعداد
- (٣١) اعداد الذاكرة (٦٧) اعداد الذاكرة (٦٨) اعداد
- (٣٢) اعداد الذاكرة (٦٩) اعداد الذاكرة (٧٠) اعداد
- (٣٣) اعداد الذاكرة (٧١) اعداد الذاكرة (٧٢) اعداد
- (٣٤) اعداد الذاكرة (٧٣) اعداد الذاكرة (٧٤) اعداد
- (٣٥) اعداد الذاكرة (٧٥) اعداد الذاكرة (٧٦) اعداد
- (٣٦) اعداد الذاكرة (٧٧) اعداد الذاكرة (٧٨) اعداد
- (٣٧) اعداد الذاكرة (٧٩) اعداد الذاكرة (٨٠) اعداد
- (٣٨) اعداد الذاكرة (٨١) اعداد الذاكرة (٨٢) اعداد
- (٣٩) اعداد الذاكرة (٨٣) اعداد الذاكرة (٨٤) اعداد
- (٤٠) اعداد الذاكرة (٨٥) اعداد الذاكرة (٨٦) اعداد
- (٤١) اعداد الذاكرة (٨٧) اعداد الذاكرة (٨٨) اعداد
- (٤٢) اعداد الذاكرة (٨٩) اعداد الذاكرة (٩٠) اعداد
- (٤٣) اعداد الذاكرة (٩١) اعداد الذاكرة (٩٢) اعداد
- (٤٤) اعداد الذاكرة (٩٣) اعداد الذاكرة (٩٤) اعداد
- (٤٥) اعداد الذاكرة (٩٥) اعداد الذاكرة (٩٦) اعداد
- (٤٦) اعداد الذاكرة (٩٧) اعداد الذاكرة (٩٨) اعداد
- (٤٧) اعداد الذاكرة (٩٩) اعداد الذاكرة (١٠٠) اعداد

1. در احدی حساب می شود

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

optimization -> Method -> PM3 -> salinity

0.75

• laccy

• 14 - 15 - 16 - 17 - 18 - 19 - 20

• c-hh

• ggg

0.75

5 عدد از روابط 5

5 عدد از روابط 5

5 عدد از روابط 5