

TPN° 1

Chaque optimisation moléculaire doit être paramétrée de la façon suivante:

- a. **Algorithme de minimisation:** polak Ribière
- b. **Champ de force:** MM+
- c. **Mode «bond dipôle»** activé.
- d. **Molécule d'intérêt** supposée dans le vide (**in vacuo**)

Première partie:

- A l'aide du logiciel **Hyperchem**, construire la molécule **H₂**.
- Améliorer la géométrie par une optimisation en mécanique moléculaire. Noter la longueur de la liaison.
- Optimiser la géométrie par un calcul Ab-initio en base minimal **STO-3G**, puis en base large **STO 6-31G****.
- Vérifier que la longueur de la liaison augmente en fonction de l'étendue de la base utilisée et que cette dernière tend vers la valeur expérimentale **R_{eq}=0.7416 Å** par curiosité, relever l'énergie des deux plus basses OM en sélectionnant « **Compute /Orbitals** ».

On va recalculer les énergies et les fonctions d'onde de cette molécule dans le cadre de la méthode semi-empirique **Huckel étendue**. Pour ce faire:

- Sélectionner dans «**Setup/Semi-empirical**» la méthode **Extended Huckel**.
- Avant de lancer le calcul, on va ouvrir un fichier qui contiendra toutes les informations relatives à ce calcul. Pour l'ouvrir, sélectionner « **File / Star Log** », donner un nom à ce fichier et, pour qu'il contienne le maximum d'informations mettre le niveau **9** dans « **Quantum Print Level** ».
- Lancer le calcul en sélectionnant « **Compute / Single Point** ». Une fois le calcul terminé, fermer le fichier en sélectionnant « **File / Stop Log** ». Ouvrir ce fichier. On y trouve principalement:
 - « **Overlap Matrix** » c'est-à-dire la matrice des recouvrements **S** entre les orbitales atomiques.
 - « **Huckel Matrix (eV)** » c'est-à-dire la matrice relative aux valeurs de **H_{i,j}** dans le cadre de l'approximation de Huckel étendue.
 - « **Eigenvalue** » contient la valeur en eV des énergies des OM. On y voit aussi la symétrie de ces OM.
 - « **Eigenvectors** » contient les coefficients du développement des OM sur les OA, une colonne pour chaque OM.
 - « **Atomic Orbital Electron Populations** » contient le nombre d'électron contenu par OA dans le cadre de l'approximation de Mulliken.
 - « **Net Charges and Coordonates** » la charge nette sur chaque atome et leurs coordonnées cartésiennes, ce qui permet de calculer le moment dipolaire $\vec{\mu}$ de la molécule ainsi que sa norme.

Seconde Partie:

- Construire maintenant la molécule **HF** en déposant un atome de fluor puis en ajoutant **automatiquement** un atome d'hydrogène en sélectionnant «**Build/ Add Hydrogens**».

En procédant de la sorte, on ajoute un atome d'hydrogène avec les mêmes coordonnées x et z que celles de l'atome de fluor.

- Optimiser la géométrie par un calcul Ab-initio en base médium **STO 6-31G***. Noter la longueur de la liaison. Révéler l'énergie de toutes les OM occupées en sélectionnant «**Comput / Orbitals** ».
- Recalculer les énergies de cette molécule dans le cadre de la méthode semi-empirique **Huckel étendue**.
- Avant de lancer le calcul, on prendra soin d'ouvrir un fichier qui contiendra toutes les informations relatives à ce calcul. Ouvrir ce fichier et discuter les résultats.
 - Quelles sont les valeurs des énergies des OA du fluor ?

Troisième partie.

On s'intéresse maintenant aux molécules suivant: **H₂O**, **BH₃**, **NH₃**, et **CrH₆**. Pour chacune de ces molécules, la construire en déposant l'atome A souhaité puis ajouter les hydrogènes en sélectionnant la commande «**Build/ Add Hydrogens**».

On ne cherchera pas à optimiser la géométrie, on se contentera de faire un calcul Huckel étendu puis de noter l'énergie et la forme des orbitales moléculaires occupées et de la première orbitale moléculaire vacante.

Quatrième partie.

Réaliser l'optimisation de la géométrie de divers composés de votre choix.