

TPN°1

Chaque optimisation moléculaire doit être paramétrée de la façon suivante:

- a. **Algorithme de minimisation:** polak Ribi  re
- b. **Champ de force:** MM+
- c. **Mode «bond dipôle»** activ  .
- d. **Mol  cule d'int  r  t** suppos  e dans le vide (**in vacuo**)

Premi  re partie:

- A l'aide du logiciel **Hyperchem**, construire la mol  cule **H₂**.
- Am  liorer la g  om  trie par une optimisation en m  canique mol  culaire. Noter la longueur de la liaison.
- Optimiser la g  om  trie par un calcul Ab-initio en base minimal **STO-3G**, puis en base large **STO 6-31G****.
- V  rifier que la longueur de la liaison augmente en fonction de l'  tendue de la base utilis  e et que cette derni  re tend vers la valeur exp  rimentale $R_{eq}=0.7416 \text{ \AA}$ par curiosit  , relever l'  nergie des deux plus basses OM en s  lectionnant « **Compute /Orbitals** ».

On va recalculer les ´energies et les fonctions d'onde de cette mol  cule dans le cadre de la m  thode semi-empirique **Huckel ´etendue**. Pour ce faire:

- S  lectionner dans «**Setup/Semi-empirical**» la m  thode **Extended Huckel**.
- Avant de lancer le calcul, on va ouvrir un fichier qui contiendra toutes les informations relatives ´a ce calcul. Pour l'ouvrir, s  lectionner « **File / Star Log**», donner un nom ´a ce fichier et, pour qu'il contienne le maximum d'informations mettre le niveau **9** dans « **Quantum Print Level** ».
- Lancer le calcul en s  lectionnant « **Compute / Single Point** ». Une fois le calcul termin  , fermer le fichier en s  lectionnant « **File / Stop Log** ». Ouvrir ce fichier. On y trouve principalement:
 - « **Overlap Matrix** » c'est-`a-dire la matrice des recouvrements S entre les orbitales atomiques.
 - « **Huckel Matrix (eV)** » c'est-`a-dire la matrice relative aux valeurs de $H_{i,j}$ dans le cadre de l'approximation de Huckel ´etendue.
 - « **Eigenvalue** » contient la valeur en eV des ´energies des OM. On y voit aussi la symetrie de ces OM.
 - « **Eigenvectors** » contient les coefficients du d  veloppement des OM sur les OA, une colonne pour chaque OM.
 - « **Atomic Orbital Electron Populations** » contient le nombre d'electron contenu par OA dans le cadre de l'approximation de Mulliken.
 - « **Net Charges and Coordonates** » la charge nette sur chaque atome et leurs coordonn  es cart  siennes, ce qui permet de calculer le moment dipolaire $\vec{\mu}$ de la mol  cule 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.

Sur un diagramme énergétique que l'on dessinera, on mettra en évidence les interactions entre les orbitales atomiques de l'atome A et les orbitales de symétrie du fragment H_n pour aboutir aux orbitales moléculaires données par Hyperchem.

Quatrième partie.

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