

Partie Structure électronique n° 1 : prises en main informatiques et orbitales atomiques

On utilisera les codes Gaussian, Avogadro et/ou Molden.

I. Prise en main « informatique » : les détails pratiques

- se « logger » (taper son login)
- entrer son mot de passe
- ouvrir un « terminal » en cliquant sur l'icône appropriée

Quelques autres commandes linux :

- « ls » pour voir le contenu d'un répertoire
- « cd .. » pour revenir en arrière dans l'arborescence
- « rm nom_d'un_fichier » pour effacer un fichier d'un répertoire
- « rm dir nom_d'un_repertoire » pour effacer un répertoire vide
- « vi » pour lancer l'éditeur de texte
- « pwd » pour voir où l'on se trouve dans l'arborescence

II. Calculs avec Gaussian

Le code Gaussian s'exécute de la façon suivante :

"g16 <fichier.com >fichier.log &". On peut aussi construire les fichiers de données directement à partir des interfaces d'Avogadro ou de Molden.

Le fichier de données "fichier.com" a la structure suivante :

```
%Chk=Kr.chk  
#P RHF/STO-3G POP=FULL GFINPUT IOP(6/7=3)
```

mon premier calcul de chimie quantique

```
0 1  
Kr
```

quelques explications :

- « Kr.chk » : fichier contenant les informations sur les orbitales de Kr. A utiliser avec Avogadro.
- « STO-3G » : base d'orbitales atomiques choisie
- « RHF » : la méthode pour le calcul de l'énergie : Hartree-Fock

- « POP=FULL » : une analyse complète de la population électronique (charges) est demandée
- « GFINPUT IOP(6/7=3) » : permet de visualiser les résultats par Molden ensuite
- « 0 1 » : charge et multiplicité de spin du système
- « Kr » : description des atomes présents et coordonnées (fourni par Molden) : une ligne par atome

Etude d'orbitales atomiques avec Gaussian

I. Observations :

1. Recopier l'exemple de fichier de données ci-dessus et l'adapter au calcul Hartree-Fock de He.
2. Lancer le calcul de l'état électronique fondamental de He avec Gaussian.
3. Visualiser les orbitales obtenues avec Avogadro ou Molden. Si Avogadro est utilisé, il faut d'abord convertir le fichier fichier.chk avant d'ouvrir le fichier.log.

```
"formchk -3 fichier.chk fichier.fchk"
```

 Attention les fichiers .fchk et .log doivent porter le même nom.
4. Faire de même avec Ne et F. Attention, il peut être utile d'écrire les configurations électroniques de ces atomes pour retrouver la bonne multiplicité de spin. Retrouver le label des orbitales et leur classement en énergie. Pour les atomes ayant des électrons célibataires, changer RHF en HF pour la deuxième ligne du fichier .com.

II. Répondre également aux questions suivantes :

Il faudra avoir parcouru le poly de cours jusqu'à la page 41.

1. En quoi consiste l'approximation de Born-Oppenheimer ? Pourquoi cette approximation est importante pour les études de structure électroniques ?
2. Comparer les orbitales des atomes étudiés ci-dessus avec celles de l'atome d'hydrogène (forme). En déduire pourquoi la théorie des perturbations est bien adaptée pour l'étude de l'énergie électronique des atomes. A quelle condition ?
3. Comparer les orbitales des atomes étudiés ci-dessus entre elles (forme, énergie). En quoi différent-elles le plus ?
4. Pouvez-vous expliquer les tendances observées au niveau des énergies ?

Envoyer un fichier .pdf avec vos observations (des captures d'écran seront utiles) et les réponses aux questions posées par mail à l'adresse suivante avant le prochain cours : celine.leonard@u-pem.fr Ces questions seront discutées au début du prochain cours et vos réponses seront corrigées pour la séance d'après. L'ensemble des fichiers corrigés vous servira pour construire votre "rapport" de TP final.