

## Partie Structure électronique n° 2 : les molécules diatomiques

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

### I. Construire et visualiser une molécule dans l'espace avec Molden

- Avec "Zmat editeur", construire la molécule H<sub>2</sub>. On ajoute chaque atome avec la commande "add line".
- Sauver le fichier de la molécule H<sub>2</sub> au format « xyz »
- Constater le résultat en éditant le fichier sauvé par l'éditeur « gedit »
- Recommencer mais au format « Gaussian »

### II. Construire et visualiser une molécule dans l'espace avec Avogadro

- Dessiner la molécule H<sub>2</sub>.
- Regarder le résultat avec "Editeur de coordonnées cartésiennes" dans "Construire".
- Ouvrir l'extension "Gaussian" en sélectionnant le format "Z-matrix" puis "Z-matrix (compact)".

### III. Les molécules diatomiques avec Gaussian

1. A partir d'Avogadro ou de Molden, effectuer un calcul simple d'énergie sur l'hydrogène moléculaire H<sub>2</sub>, dans son état fondamental, en base STO-3G, par la méthode Hartree-Fock. On prendra volontairement une distance internucléaire trop élevée : 1 Å.
2. Une analyse de population et des orbitales moléculaires est également demandée.
3. Optimiser la géométrie et effectuer un calcul de fréquences en ajoutant *opt freq* à la première ligne du fichier de données Gaussian. Comparer les résultats à ceux de la base de données NIST.
4. Faire de même avec MP2 et B3LYP à la place de HF.
5. Tracer les courbes d'énergie potentielles de l'état  $^1\Sigma_g^+$  de la molécule H<sub>2</sub> à l'aide des méthodes HF, MP2 et B3LYP avec les bases STO-3G et 6-31G\*\* (6-31(d,p)). Utiliser au choix les logiciels excel, gnuplot ou autre pour tracer les courbes.
6. En fonction du temps restant, faire de même pour N<sub>2</sub> et LiH.

**IV. Répondre également aux questions suivantes :**  
**Il faudra avoir parcouru le poly de cours jusqu'au bout.**

1. En quoi consiste l'approximation LCAO ? Pourquoi cette approximation est importante pour les études de structure électroniques ?
2. Pourquoi calcule-t-on les fréquences de vibration au minimum de la courbe d'énergie potentielle ?
3. Quelle méthode de calcul électronique vous semble la mieux adaptée pour construire la courbe d'énergie potentielle de  $H_2$  ? Pour quelles raisons ? Vous vous appuyerez sur vos résultats et sur les propriétés de chaque méthode.
4. Quelle base est la mieux adaptée vous semble la mieux adaptée pour construire la courbe d'énergie potentielle de  $H_2$  ? Pour quelles raisons ? Vous vous appuyerez sur vos résultats et sur les propriétés de chaque méthode.
5. En quoi les molécules  $N_2$  et  $LiH$  différent de la molécule  $fe H_2$  ? Comment cela impacte les résultats de calcul électroniques ?

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](mailto: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.