

TP Structure électronique n° 1 : atomes et molécules diatomiques

Dans ce TP, on utilisera les codes Gaussian et 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
- laisser l'enseignant vous connecter.

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 :

"g09 <fichier.com >fichier.log &". On peut aussi soumettre des calculs simples directement à partir de l'interface Molden.

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

```
#P HF/STO-3G POP=FULL GFINPUT IOP(6/7=3)
```

mon premier calcul de chimie quantique

0 1

Kr

quelques explications :

- « STO-3G » : base d'orbitales atomiques choisie
- « HF » : 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

1. Recopier l'exemple de fichier de données ci-dessus et l'adapter au calcul HF de He.
2. Visualiser l'orbitale obtenue avec Molden.
3. Faire de même avec Ne, F. Retrouver le label des orbitales et leur classement en énergie. Que pouvez-vous constater ?

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

- Avec "Zmat editeur", construire la molécule H₂. On ajoute chaque atome avec la commande "add line".
- Sauver le fichier de la molécule H₂ au format « xyz »
- Constater le résultat en éditant le fichier sauvé par l'éditeur « gedit »
- Recommencer mais au format « Gaussian »

Les molécules diatomiques avec Gaussian

1. A partir de Molden, effectuer un calcul simple d'énergie sur l'hydrogène moléculaire H₂, 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. Que constatez-vous ?
5. Tracer les courbes d'énergie potentielles de l'état $^1\Sigma_g^+$ de la molécule H₂ à l'aide des méthodes HF, MP2 et B3LYP avec les bases STO-3G et 6-31G**. Commentaires ?
6. En fonction du temps restant, faire de même pour N₂ et LiH.

Le compte-rendu doit fournir les éléments suivants :

Description de la méthode et explication de son choix.

Analyse des résultats qualitative et quantitative.

Comparaison avec d'autres résultats publiés (articles scientifiques, bases de données, ...)

Bibliographie