

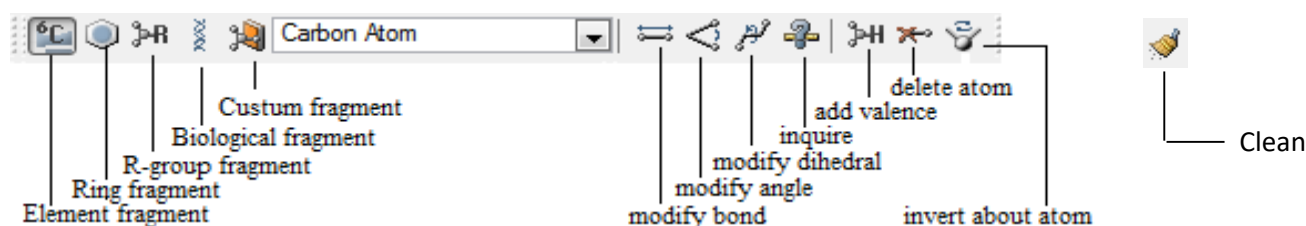
TP N° :01

Les premiers pas avec Gaussian

Description du programme

Le logiciel Gaussian est composé de 2 programmes complémentaires, GaussView permettant le dessin et la visualisation des structures. Le second programme de Gaussian sert aux calculs.

Les Icones



Element Fragment : Ouvrir la palette des éléments (tableau périodique).

Ring fragment: accéder à un ensemble de cycles..

R-group fragment: Prévoit un ensemble de fragments de groupes fonctionnels

Biological fragment: Réunit des fragments d'acides aminés et de nucléosides.

Custom fragment: Accès à une collection de fragments personnalisés.

Modify bond: Accès à la boîte de dialogue Bond Smart-slide après avoir sélectionné deux atomes. Modifier le type de liaison et/ou la distance inter-atomique.

Modify angle: Accès à la fenêtre d'ajustement de l'angle de liaison après avoir sélectionné trois atomes. Ajuste l'angle de liaison

Modify dihedral: Accès à la fenêtre d'ajustement de l'angle dièdre après la sélection de quatre atomes. Ajuste l'angle dièdre.

Inquire Mode: examine les données structurales de la molécule en cours.

Add valence: Ajoute un hydrogène supplémentaire à l'atome sélectionné.

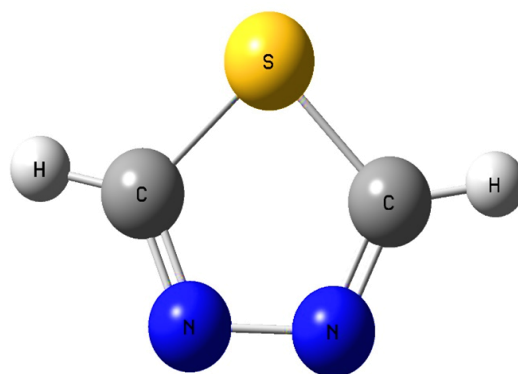
Delete atom: Éliminer les atomes et/ou les valences ouvertes (les demi liaisons pendantes).

Invert About Atom: Inverser la structure moléculaire autour d'un atome sélectionné.

Clean: ajustement de la géométrie moléculaire selon un ensemble défini en vue d'une meilleure adaptation aux principes de la chimie.

Propriétés électroniques et géométrique d'une molécule : exemple du 1, 3,4-thiadiazole

Paramètres		EXP.	Calc.
Longueur de la liaison (angstrom)	C-S	1.720	
	C-N	1.302	
	C-H	1.077	
	N-N	1.371	
Angle de valence (degree)	S-C-N	114.640	
	C-N-N	112.200	
	C-S-C	86.380	
	S-C-H	122.490	



- À partir de l'icône Element fragment, sélectionnez un atome et dessinez dans la fenêtre GaussView tous les atomes seuls sans liaison.

- Cliquez sur l'icône Modify bond puis sélectionnez 2 atomes et définissez le type de liaisons comme indiqué dans la figure ci-dessus.

- Cliquez avec le bouton droit de la souris sur la fenêtre Gaussien View, puis sélectionnez builder dans le menu View et cliquez sur l'icône Clean pour construire le modèle.

Après avoir dessiné la molécule, choisissez Gaussian Calculation Setup dans le menu Calculate.

- Dans la fenêtre qui apparaît, définissez ces paramètres
 - **Job Type:** Optimization.
 - **Method:** **MP2/6-31G**
 - **Title :** Mettez un titre de job par exemple mol_opt1 (choisissez un titre court).
 - **General :** décochez la case Write Connectivity (pour gagner du temps)
 - Cliquez sur Submit et sauvegardez le travail (le nom du fichier doit être le même que **Title**).
- Après l'optimisation, ouvrir le fichier .log en utilisant le Bloc-note (ou avec GaussView, menu Results, View/Edit file).
- Sur le tableau Optimized Parameters après avoir atteint 4 YES, trouvez les paramètres géométriques de la molécule et complétez le tableau.
- Calcul des paramètres électroniques : Remplir le tableau suivant et comparez les résultats obtenus :

$E_{opt}(a.u)$	μ (Debye)	q (S)	q (C)	q (N)	q (H)	HOMO (a.u)	LUMO (a.u)	ΔE (a.u)

-Depuis le bureau, ouvrir le fichier .log via GaussView

E_{opt} and μ : Cliquez sur Summary à partir du menu Results.

Charges calculation : Choisissez Display Charges Distributions dans le menu Results.

HOMO and LUMO : Choisissez Molecular Orbitals (MOs) dans le menu Edit.

ΔE : Energetic Gap = HOMO – LUMO.

-Depuis le bureau, ouvrir le fichier .chk via GaussView

Dans le menu Edit, cliquez sur Molecular Orbitals (MOs) puis choisissez l'onglet Visualize et Mise à jour des orbitales (avec Update).