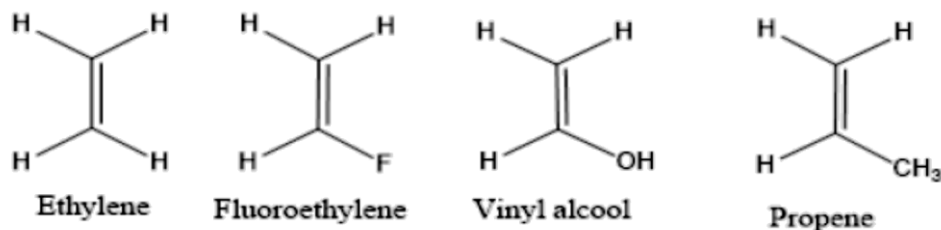


TP N° :03

Réalisation de calculs pour une série de molécules avec la méthode DFT.

Séries de Vinyle CH₂=CHR

- Construire les composées avec le logiciel Gauss View



- Optimiser la géométrie de chaque molécule en utilisant la méthode **B3LYP/6-31G(d)**

- Remplir le tableau suivant pour chaque méthode utilisée :

Système	R	Energie	C=C(Å)	C-C-R (°)	μ	HOMO	LUMO	ΔE	λ(nm)
Ethylène	H								
Fluor éthylène	F								
Propène	CH ₃								
Vinyle alcool	OH								

- Analyser les résultats obtenus

- Quel est l'effet de substituant sur les propriétés précédentes ?

- Comparer entre les écarts énergétiques ΔE (LUMO- HOMO)

- Effectuer les calculs Single Point avec **TD-B3LYP/6-31G (d)** pour toutes les molécules

- Compléter le tableau et comparer entre les valeurs des Bande d'absorption UV (λ)

- Conclure

Remarque : Un compte rendu de TP doit, en général, être composé de 4 parties distinctes :

I. Introduction : Présenter le principe et le but du TP en donnant les concepts de méthodes abordés.

II. Résultats : Présenter les graphes et les tableaux, les calculs des grandeurs demandées (avec unités).

Présenter aussi les étapes qui ne figurent pas dans la brochure

III. Analyse des résultats et discussion : Interpréter les courbes et les tableaux. Commenter les résultats à l'aide d'une approche théorique.

IV. Conclusion : Résumer succinctement les résultats et les commentaires obtenus en II et III, en faisant ressortir les résultats essentiels

Le responsable du Module : Dr. AIT TAYEB