

## TD3. Interactions : inter-/intra-moléculaires

**L'objectif de cette séance est de mieux comprendre les interactions intermoléculaires et comment elles se différencient par rapport aux interactions intramoléculaires.**

Le calcul gaussien permet de voir les différentes interactions inter/intra moléculaires. Pour cela, on va résoudre l'équation de Schrödinger. On fait des optimisations de la géométrie qui donnent accès aux différentes vibrations moléculaires. Le programme gaussien a besoin de connaître différents paramètres pour résoudre l'équation de Schrödinger.

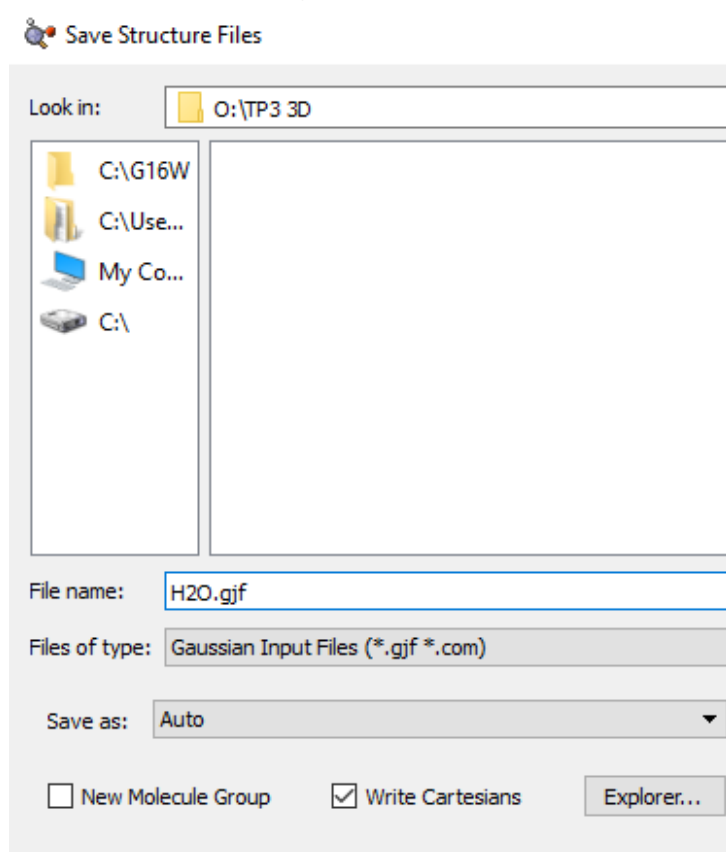
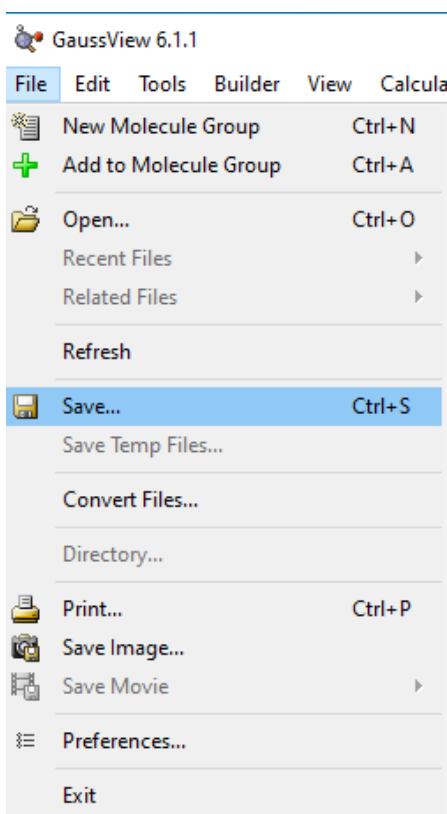
La résolution de l'équation de Schrödinger c'est voir l'optimisation, savoir la fréquence, l'énergie... Calcul gaussien permet de résoudre l'équation de Schrodinger.

**Effectuez des calculs Gaussian avec l'option « opt+freq » et suivez les instructions données en cours pour visualiser les vibrations de la molécule. Dans le cas de l'eau, vous pouvez facilement les décrire en termes de variation de certaines variables géométriques. Lesquelles ?**

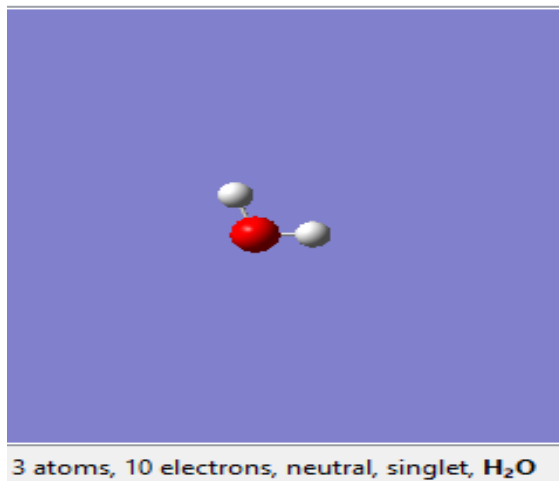


On va dans le logiciel GaussView, puis on clique sur le C et on change avec l'atome d'oxygène car c'est celui qui nous intéresse.

Pour sauvegarder notre modèle

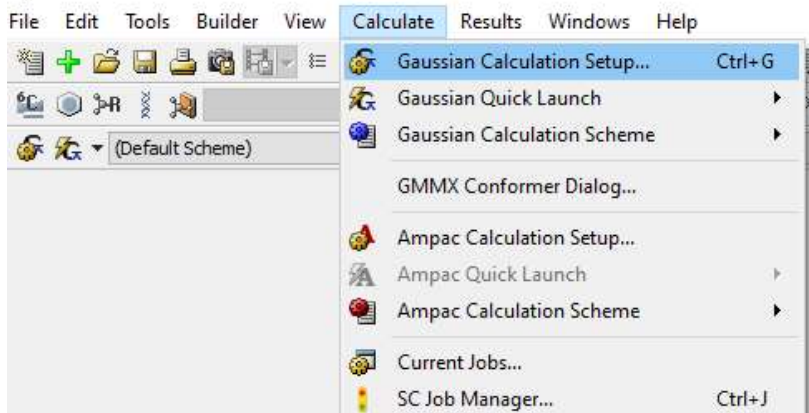


G1:M1:V1 - New



Molécule de H<sub>2</sub>O avant optimisation

GaussView 6.1.1



Effectuez maintenant le même calcul Gaussian sur la molécule H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>. Par rapport à la molécule d'eau, nous avons 'remplacé' un atome -H avec un groupement -OH. Quelles sont les différences que vous observez sur les vibrations ?

On va dans Calculate pour faire des calculs gaussiens.

Opt+freq permet l'optimisation  
Puis on fait method-> DFT->6-31G

Ne pas oublier en bas de la page de cliquer sur « Submit » puis on sauvegarde. Une page de calculs gaussiens va s'ouvrir et on obtiendra la molécule de H<sub>2</sub>O après optimisation.

G1:M1:V1 - Gaussian Calculation Setup

Title: **Title Card Required**

Keywords: **# hf/3-21g geom=connectivity**

Charge/Mult.: **0 1**

Job Type Method Title Link 0 General

- Energy
- Energy
- Optimization
- Frequency
- Opt+Freq
- IRC
- Scan
- Stability
- NMR

G1:M1:V1 - Gaussian Calculation Setup

X

Title: **Title Card Required**

Keywords: **# opt freq b3lyp/6-31g geom=connectivity**

Charge/Mult.: **0 1**

Job Type Method Title Link 0 General Guess Pop. PBC Solvation Add. Inp. Preview

☐ Multilayer ONIOM Model

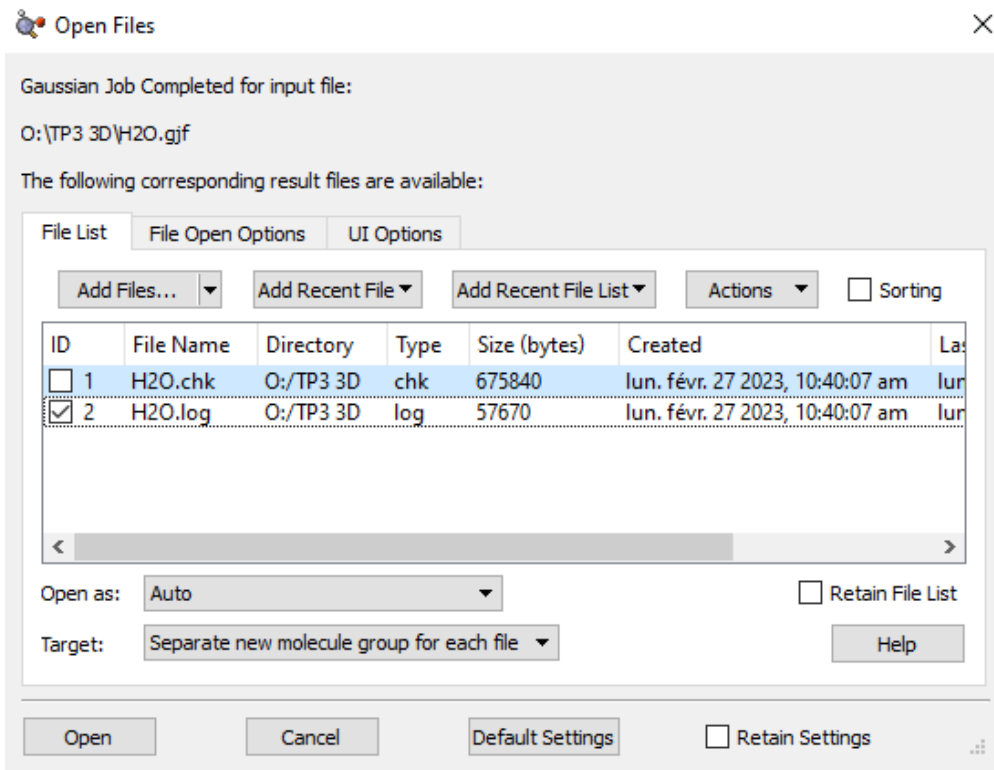
Method: Ground State DFT... Default Spin B3LYP

Basis Set: 6-31G ( , )

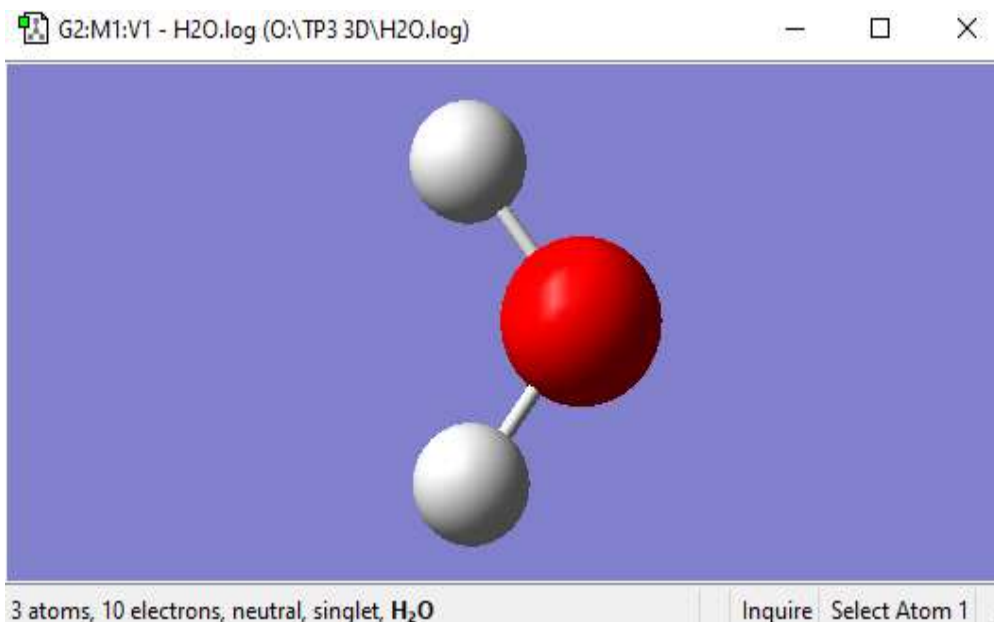
Charge: 0 Spin: Singlet

☐ Use sparse matrices

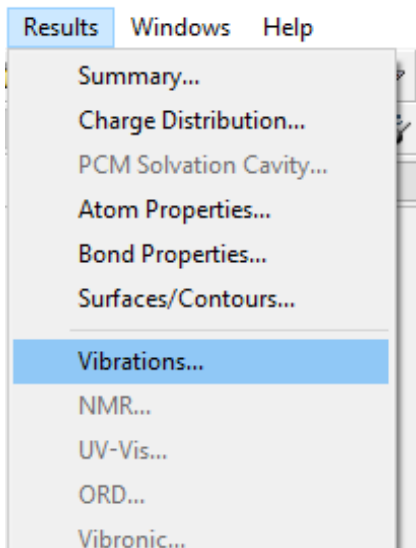
Empirical dispersion: Default



On désélectionne  
H2O.chk et on ouvre  
H2O.log



Voici la molécule d'H<sub>2</sub>O  
après optimisation. Puis on  
va dans Results->Vibrations  
afin de voir les différentes  
fréquences.

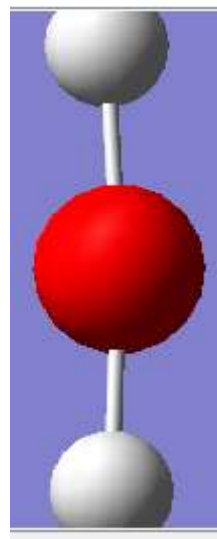
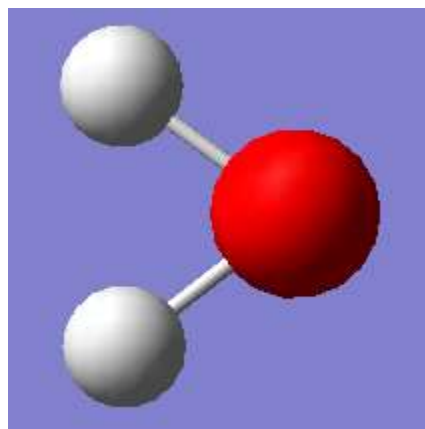


G2:M1:V1 - Vibrations

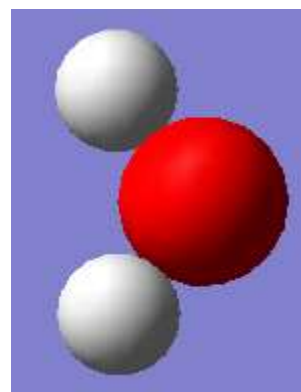
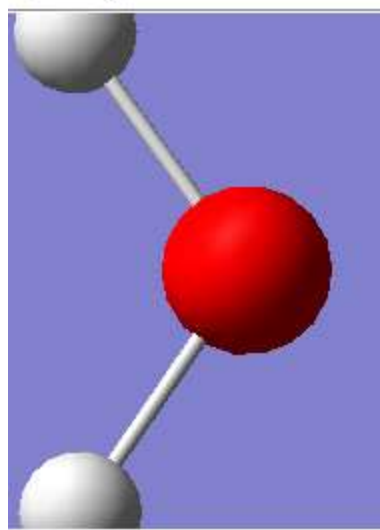
Harmonic			
	Mode #	Frequency	Infrared
1	1	1619.30	68.3504
2	2	3616.11	4.4101
3	3	3780.97	8.8045

Animate Vibration:

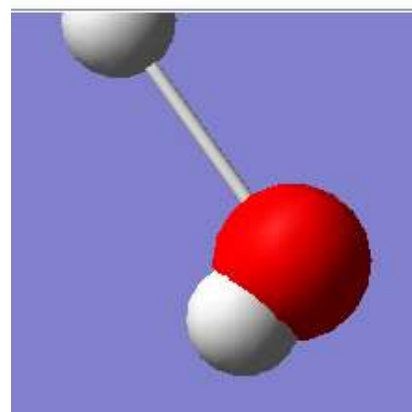
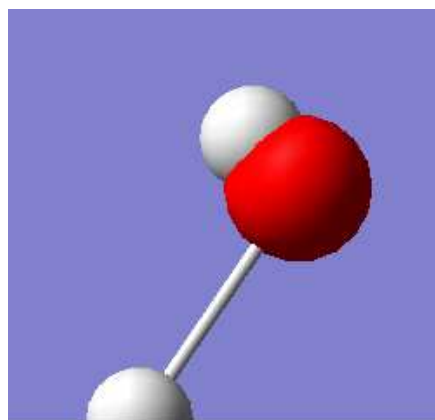
1<sup>ère</sup> vibration: variation de l'angle téta dans la molécule H<sub>2</sub>O. Déformation

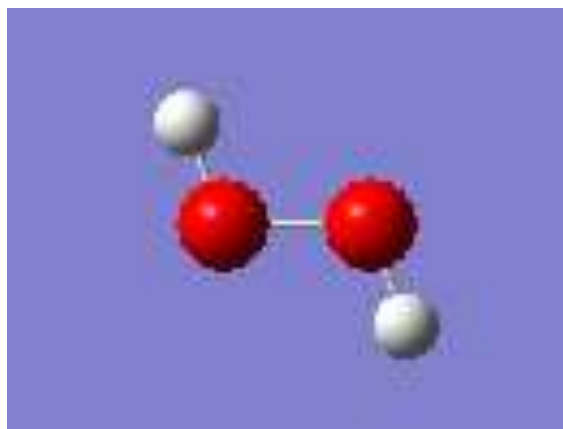


2<sup>ème</sup> vibration: Vibration d'élongation symétrique, liaison qui va s'allonger

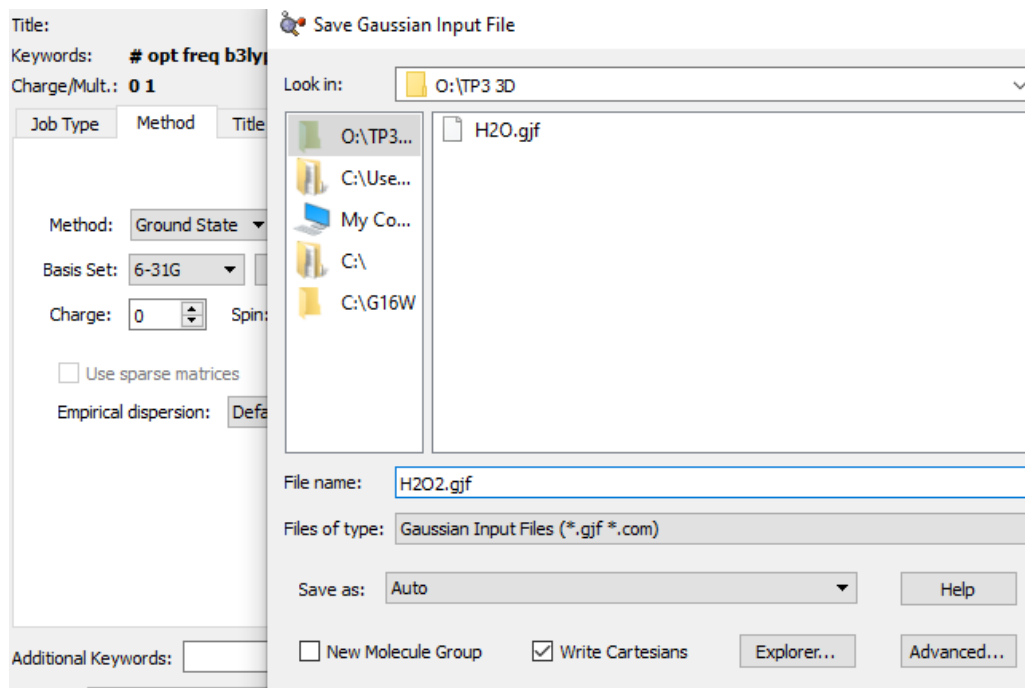


3<sup>ème</sup> vibration: elongation antisymétrique de la liaison OH





Molécule de H2O2 avant optimisation.  
On substitue un H avec un O puis on effectue la même démarche que précédemment. En bas de la page, c'est une capture d'écran de la fenêtre de calculs gaussiens.



Gaussian 16 Revision C.01 WIN64

File Process Utilities View Help

Batch Data: Processing:

Active Job: O:\TP3 3D\H2O2.LOG Output File: H2O2.LOG

Run Progress: C:\G16W\I103.exe is processing...

```

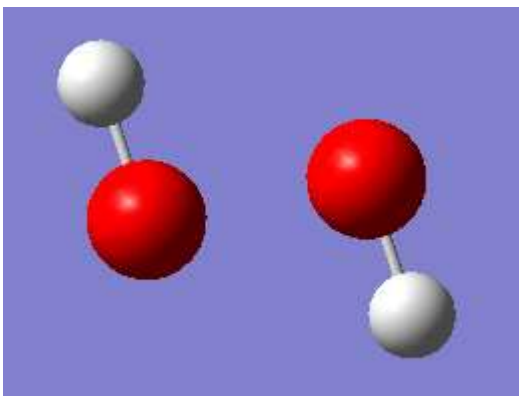
Requested convergence on MAX density matrix=1.00D-06.
Requested convergence on          energy=1.00D-06.
No special actions if energy rises.
Integral accuracy reduced to 1.0D-05 until final iterations.
Initial convergence to 1.0D-05 achieved. Increase integral accuracy.
SCF Done:  E(RB3LYP) = -151.490494552      A.U. after   10 cycles
              NFOck= 10  Conv=0.55D-08      -U/T= 2.0054
Calling FoFJK, ICtrl=      2127 FMM=F ISym2X=0 IICent= 0 IOpClX= 0 NMat=
***** Axes restored to original set *****

```

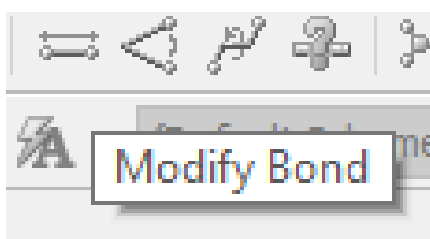
Center Number	Atomic Number	X	Forces (Hartrees/Bohr) Y	Z
1	8	-0.005746741	0.010591248	-0.000000326
2	1	-0.005959340	-0.003193441	-0.000000391
3	8	0.005746745	-0.010591247	0.000001724
4	1	0.005959336	0.003193441	-0.000001007

Cartesian Forces: Max 0.010591248 RMS 0.005640794

Reorienting Coordinates, Calculating Symmetry, and Checking Variables



C'est la molécule de H<sub>2</sub>O après optimisation pour faire apparaître la liaison entre les deux O, il faut cliquer sur « Modify Bond ».



On passe maintenant au dimère d'eau (deux molécules d'eau qui interagissent entre elles). Préparez une liste des interactions intermoléculaires qui sont actives entre ces deux molécules. Visualisez les vibrations. Pour chaque vibration, décidez s'il s'agit d'un mouvement intra- ou inter- moléculaire.

G2:M1 - Bond Semichem SmartSlide (tm)

Bond Type:

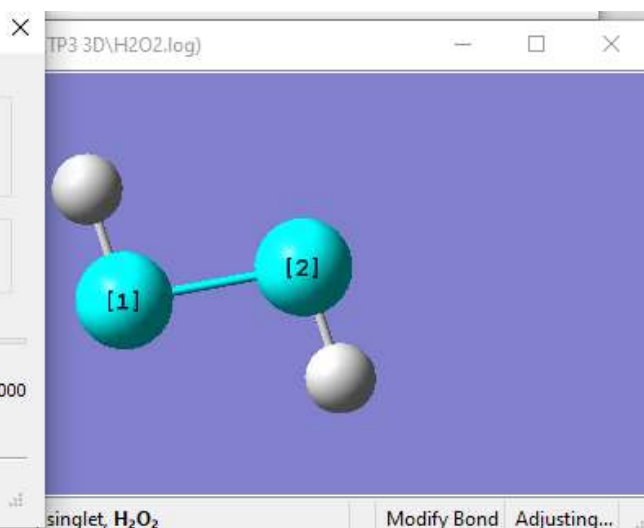
☐ None
 ☒ —
 ☐ ==
 ☐ ===
 ☐ =====
 ☐ .....

Bond:

Atom 1: Translate group Atom 2: Translate group

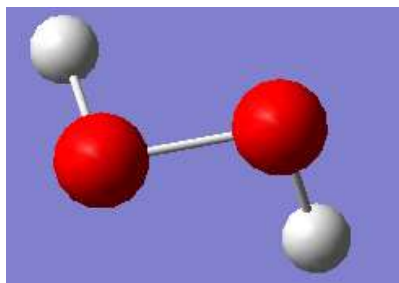
0.66000 1.53179 2.64000

Ok Cancel Help

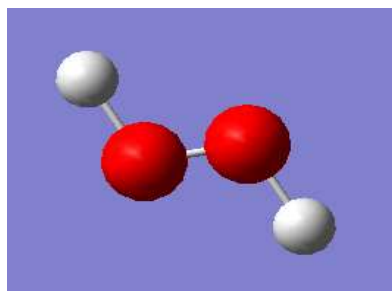


	Mode #	Frequency	Infrared
1	1	107.87	419.5378
2	2	879.29	0.0000
3	3	1162.15	148.9062
4	4	1490.46	0.0000
5	5	3595.89	0.0000
6	6	3613.74	42.6037

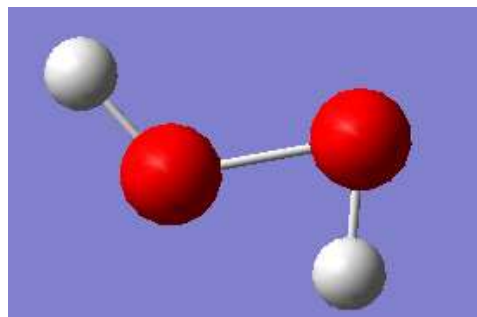
Les différents modes de vibrations de la molécule  $H_2O_2$ .



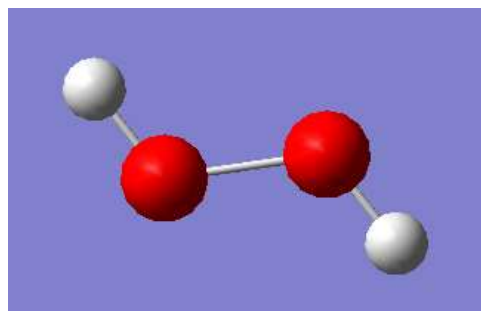
1



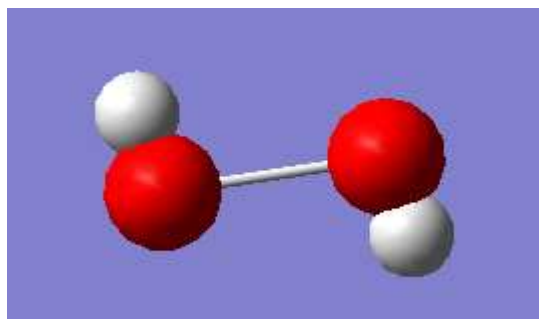
2



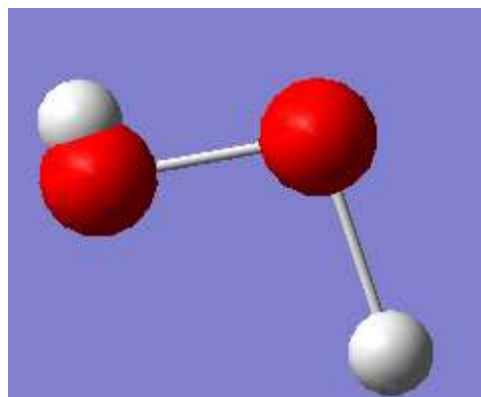
3



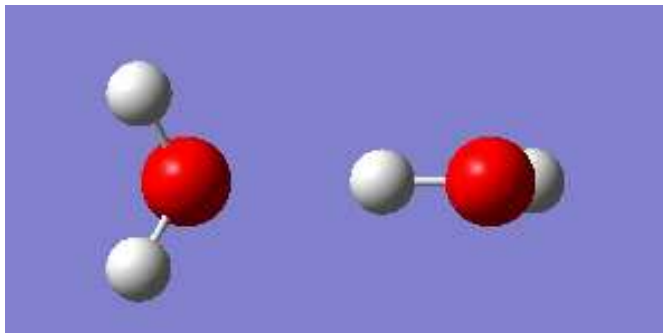
4



5



6



Dimère de H<sub>2</sub>O avant optimisation dossier présent sur arche puis on suit les mêmes démarches que précédemment.

Save Gaussian Input File

Look in: O:\TP3 3D

O:\TP3...

C:\Use...

My Co...

C:\

C:\G16W

H2O.gjf

H2O2.gjf

File name: H2O\_2.gjf

Files of type: Gaussian Input Files (\*.gjf \*.com)

Save as: Auto ▼

☐ New Molecule Group    ☒ Write Cartesians    Explorer...

File List    File Open Options    UI Options

Add Files... ▼    Add Recent File ▼    Add Recent File List ▼    Actions ▼    ☐ Sorting

ID	File Name	Directory	Type	Size (bytes)	Created
<input type="checkbox"/> 1	provadimero.chk	C:/G16W	chk	761856	lun. févr. 27 2023, 11:16:36 a
<input checked="" type="checkbox"/> 2	H2O_2.log	O:/TP3 3D	log	144196	lun. févr. 27 2023, 11:17:45 a

<

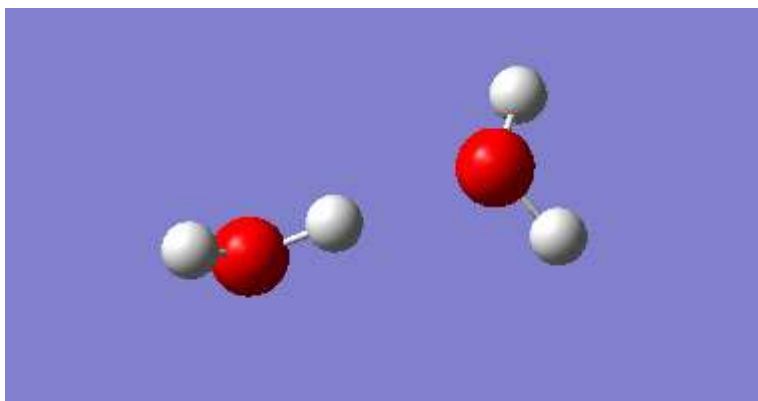
Open as: Auto ▼    ☐ Retain File Lis

Target: Separate new molecule group for each file ▼    Help

Open    Cancel    Default Settings    ☐ Retain Settings



	Mode #	Frequency	Infrared
1	1	126.23	14.9196
2	2	164.11	414.0351
3	3	166.60	225.7665
4	4	235.94	20.3646
5	5	444.70	125.2384
6	6	782.16	260.7987
7	7	1620.41	95.5781
8	8	1658.68	72.3561
9	9	3465.88	327.7912
10	10	3643.74	0.0481
11	11	3738.15	43.9413
12	12	3801.41	40.5846



**1,2,3** Vitesse de rotation qui varie, molécules rigides, les angles et les distances OH ne changent pas. Chaque molécule a une orientation ce sont des interactions intermoléculaires. Cela change des deux molécules observées précédemment puisque c'était des interactions intramoléculaires.

**4,5** Ce sont des translations d'une molécule par rapport à l'autre, pas de modif des angles ni liaisons, ce sont des interactions intermoléculaires.

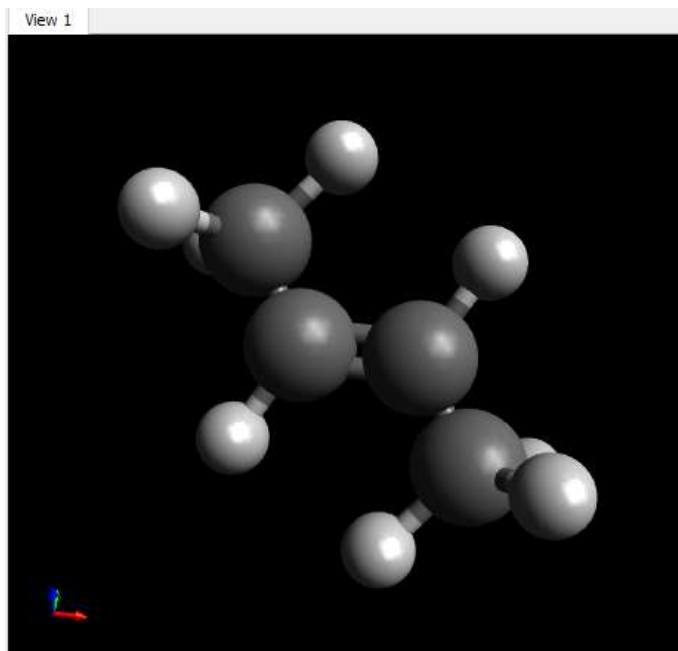
**6,7,8,9,10** Les angles, les liaisons, la fréquence de vibration augmente de manière beaucoup plus importante. Il s'agit d'interactions intramoléculaires.

**11,12** Elongation antisymétrique une molécule est fixe et l'autre bouge. Ce sont des interactions intramoléculaires.

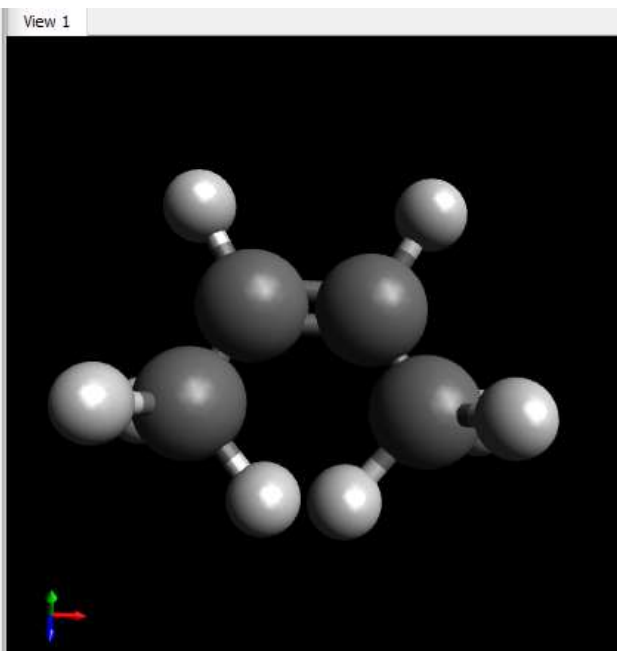
Voici les structures des deux isomères du 2-butène :

Dessinez-les avec Avogadro, dans deux fenêtres différentes, et effectuez une optimisation.

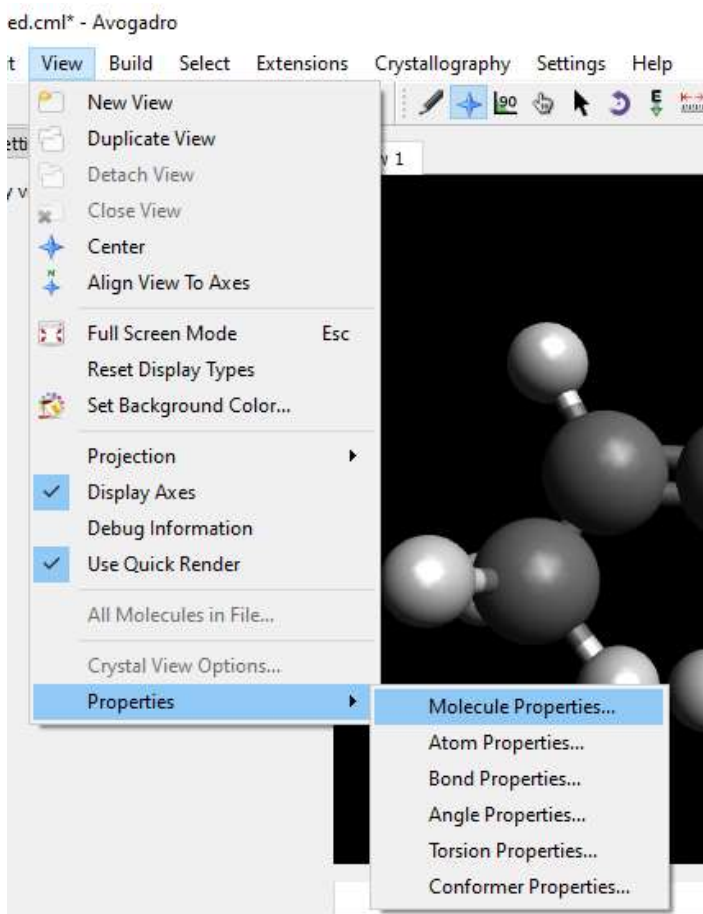
On remplace un H par un C pour établir la base de la molécule.



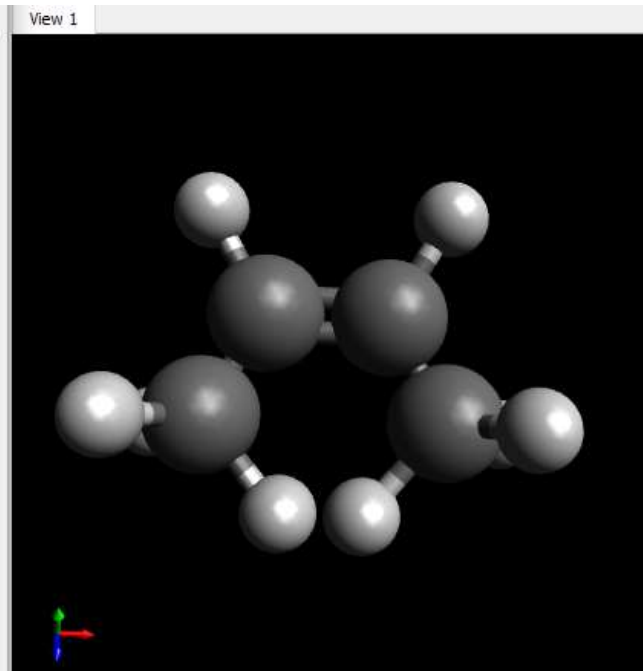
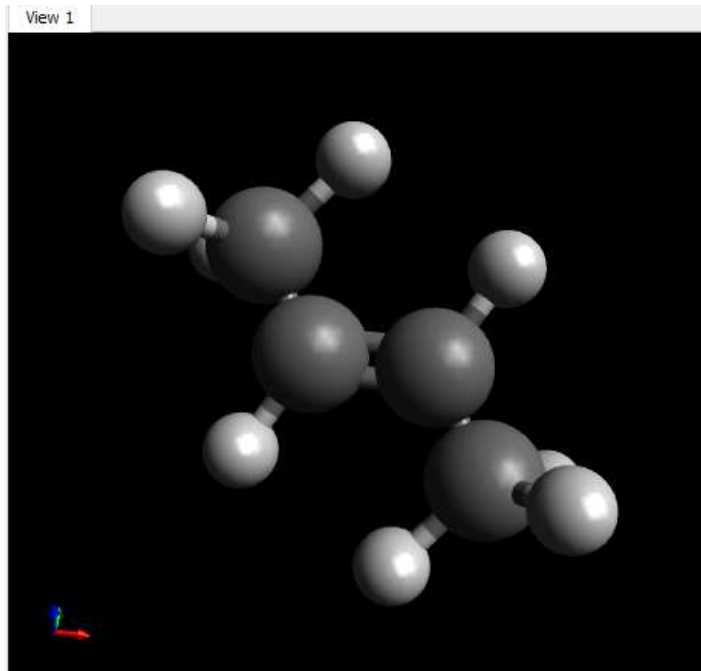
Forme E la plus stable car  
les CH<sub>3</sub> sont à l'opposé  
Moment dipolaire: 0 D



Forme Z  
Moment dipolaire: 0,054D



Démarche à suivre pour  
afficher le moment dipolaire.



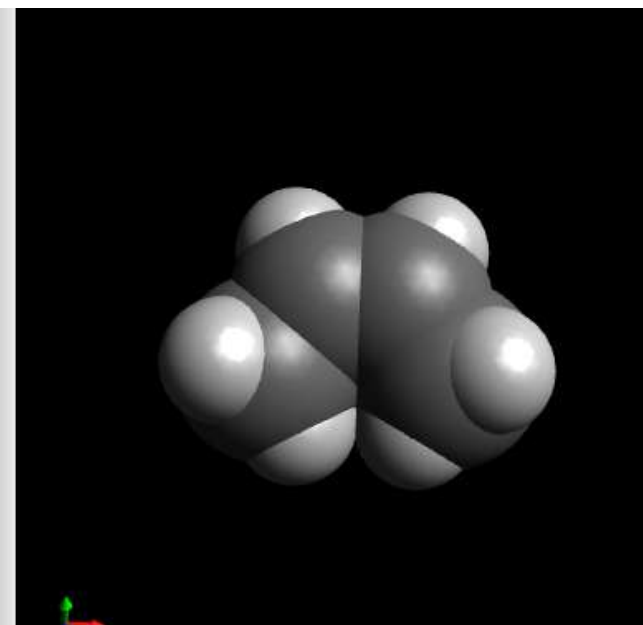
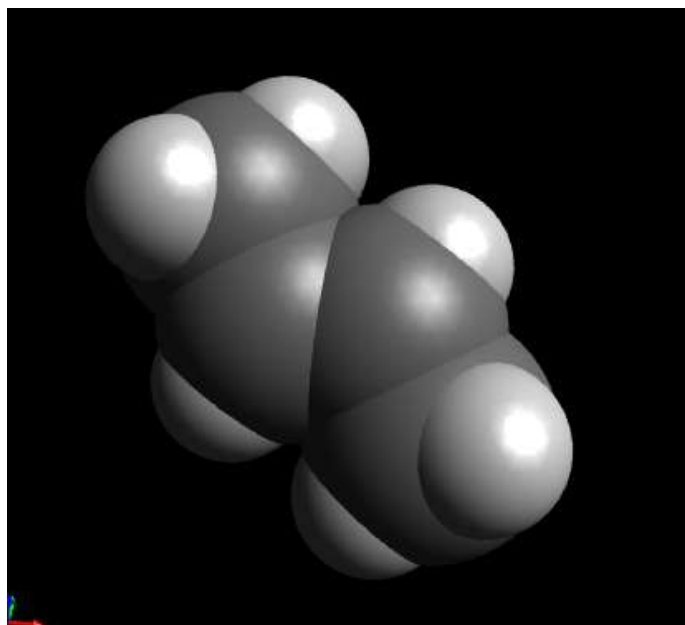
#### Molecule Properties

IUPAC Molecule Name:	unknown
Molecular Weight (g/mol):	56,106
Chemical Formula:	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub>
Energy (kJ/mol):	20,293
Estimated Dipole Moment (D):	0,000
Number of Atoms:	12
Number of Bonds:	11

IUPAC Molecule Name:	unknown
Molecular Weight (g/mol):	56,106
Chemical Formula:	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub>
Energy (kJ/mol):	25,950
Estimated Dipole Moment (D):	0,100
Number of Atoms:	12
Number of Bonds:	11

Z: moment dipolaire 0,1D et énergie 25 kJ/mol

E: moment dipolaire 0 D et énergie la plus basse, donc molécule la plus stable.



Van der Waals