

Devoir 2

Niveau de calcul B3LYP/6-31G(d)//B3LYP/6-31(d)
OPPTOL 10^{-4}

■ Géométrie, Orbitales et Hessienne

- Trouvez la géométrie la plus stable pour SF₄
 - Montrez la structure minimisée
 - Indiquez les longueurs des liens et les angles.
- Visualisez la HOMO (avec Mask)
 - Montrez cette orbitale
 - Représentez (façon ChemDraw) la structure 3D de la molécule avec la position de l'orbitale remplie non-liante

DFTTYP=B3LYP1
Après avoir choisi
les bonnes options
pour \$BASIS
GBASIS=N31
NGAUSS=6
NDFUNC=1

Indice

Le plus gros lobe de cette orbitale vous donnera une information supplémentaire sur la répartition des électrons dans la molécule (position d'une paire d'e⁻)

- Identifiez la vibration la plus intense en IR
 - Donnez les valeurs brute et corrigée en cm⁻¹ de cette vibration
 - Décrivez en quoi consiste cette vibration