
DETERMINATION D'UNE COURBE D'ENERGIE POTENTIELLE BARRIERE DE ROTATION DU CHLOROETHANE

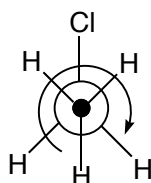
A) Rotation interne du chloréthane

1) *Optimisation de la géométrie moléculaire*

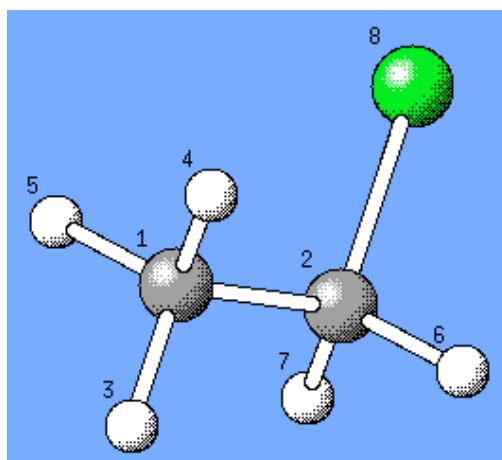
Construire la molécule de chloréthane et lancer un calcul d'optimisation de géométrie (JOBTYP = OPTIMIZATION) avec la paramétrisation AM1.

2) *Configuration du calcul*

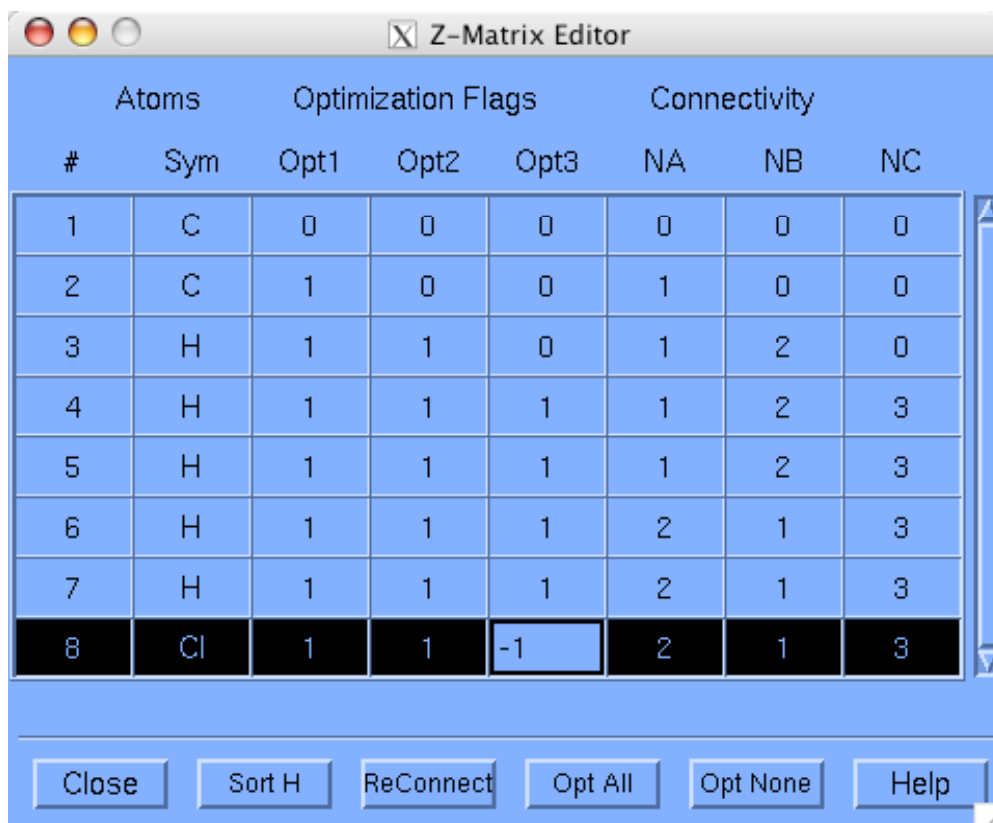
Avec le logiciel xagui, ouvrir le fichier résultat (.vis) contenant la géométrie optimisée. Dans le menu VIEW, sélectionnez « SHOW LABELS » afin d'afficher à l'écran les numéros des atomes dans la molécule. Ces numéros correspondent à l'ordre dans lequel sont définis les atomes dans le fichier de données (.dat). A l'aide de ces numéros, repérer la coordonnée interne (il s'agit ici d'un angle dièdre) permettant de faire tourner le groupe CH_2Cl autour de la liaison C-C comme schématisé ci-dessous en projection de Newman :



Exemple : molécule de chloréthane avec labels atomiques après optimisation de géométrie. La rotation du groupe CH_2Cl autour de la liaison C-C peut être définie indifféremment par rapport aux angles dièdres 8-2-1-3, 8-2-1-4 ou 8-2-1-5 :



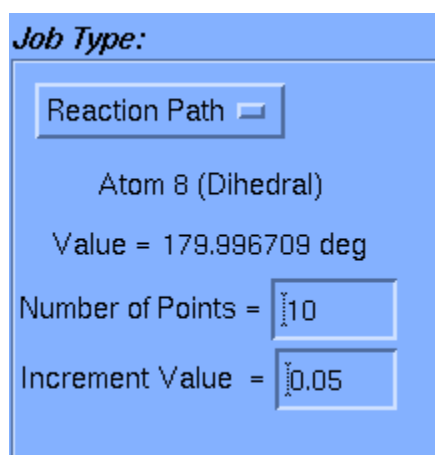
3) Lancer un calcul afin d'obtenir la courbe d'énergie potentielle en fonction de l'angle dièdre déterminé en 2). Pour cela, choisir « REACTION PATH » dans la fenêtre « CALCULATION SETUP » (menu « CALCULATE < AMPAC »). Cette option permet de calculer la valeur de l'énergie potentielle d'un système moléculaire en faisant varier pas par pas la valeur d'une coordonnée interne. Cliquer sur l'onglet « SELECT COORDINATE ». Une fenêtre s'ouvre alors permettant de configurer la matrice des coordonnées internes (« matrice Z ») pour le calcul de la SEP. Pour chaque atome, les colonnes Opt1, Opt2 et Opt3 contiennent les drapeaux d'optimisation (« optimization flags ») associés aux 3 coordonnées internes (distance, angle et angle dièdre) ; les trois dernières colonnes reportent les connectivités. Donner une valeur de -1 au drapeau d'optimisation associé à l'angle dièdre que vous voulez faire varier, puis cliquez ailleurs dans la matrice Z afin de valider la modification. Fermer la fenêtre.



Atoms		Optimization Flags			Connectivity		
#	Sym	Opt1	Opt2	Opt3	NA	NB	NC
1	C	0	0	0	0	0	0
2	C	1	0	0	1	0	0
3	H	1	1	0	1	2	0
4	H	1	1	1	1	2	3
5	H	1	1	1	1	2	3
6	H	1	1	1	2	1	3
7	H	1	1	1	2	1	3
8	Cl	1	1	-1	2	1	3

Buttons: Close, Sort H, ReConnect, Opt All, Opt None, Help

Dans la fenêtre « CALCULATION SETUP », indiquer le nombre de points et la valeur d'incrément de l'angle dièdre de façon ce que le groupe CH_2Cl effectue un tour complet autour de la liaison C-C.



Job Type:

Reaction Path ☒

Atom 8 (Dihedral)

Value = 179.996709 deg

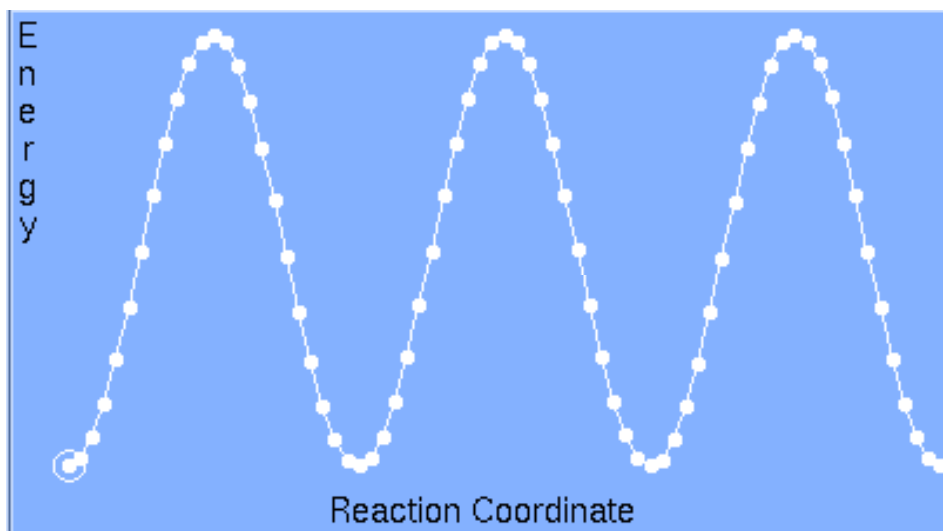
Number of Points =

Increment Value =

Lancer le calcul (« SUBMIT »).

4) *Visualisation de la SEP*

Une fois le calcul terminé, ouvrir le fichier .arc correspondant. Dans le menu « RESULTS », choisir « REACTION PROFILE ». On obtient alors une courbe d'énergie potentielle telle que représentée ci-dessous. La commande « Run » permet de visualiser la déformation géométrique subie par la molécule, alors qu'un curseur indique sur la courbe l'énergie correspondante. Notez la valeur de l'angle dièdre correspondant au minimum et au maximum de l'énergie.



5) *Estimation de la barrière de rotation*

Ouvrir le fichier .arc avec nedit, puis relever les valeurs de l'énergie totale correspondant aux extrema de l'énergie. En déduire la barrière de rotation interne du chloroéthane.

B) Rotation interne du dichloroéthane et du trichloroéthane

Effectuer la même série de calculs pour les molécules de dichloroéthane et de trichloroéthane.