
Procédure de calcul avec le logiciel SPARTAN

1. Pour construire une molécule :

File - New- Menu - Minimize

2. Pour les calculs de l'énergie en fonction d'un dièdre :

Build- Coordinate Driving - Define Dihedral

3. Sélectionner la méthode semi-empirique *AMI* et l'option *Geometry Optimisation* dans la Boite de Dialogue :

Setup - Semi-Empirical

4. Sélectionner le calcul des Orbitales Moléculaires (*MO*), le Moment Dipolaire (*Dipol*) et les charges de Mulliken (*Mulliken*) dans la Boite de Dialogue :

Setup - Properties

5. Pour calculer des iso-surfaces utiliser :

Setup - Surfaces

Option Surface	Option Property	Propriétés visualisées
<i>density</i>	<i>elpot</i>	densité électronique + potentiel électrostatique
<i>density</i>	<i>HOMO</i>	densité électronique + <i>HOMO</i>
<i>density</i>	<i>LUMO</i>	densité électronique + <i>LUMO</i>
HOMO	none	orbitale <i>HOMO</i>
LUMO	none	orbitale <i>LUMO</i>

6. Lancer des calculs :

Setup - Submit

7. Pour visualiser les iso-surfaces des orbitales frontières, le potentiel électrostatique, la densité électronique :

Display - Surfaces

8. A la fin des calculs, notez la chaleur de formation (**Display - Properties - Energy**), la distribution de charges (**Display - Properties - Charge**), et le moment dipolaire (**Display - Properties - Dipole**), le potentiel électrostatique (**Display - Properties - Surfaces**).

9. Pour mesurer des paramètres géométriques :

Geometry -

10. Pour afficher l'information textuelle (énergies des OMs, charges, coefficients des orbitales atomiques, ...)

Display - Output

References:

W.J. Hehre, A.J. Shusterman, W. Huang *A laboratory book of computational organic chemistry*, 1996. Wavefunction Inc.