Nom & prénom : …………………………………………………………………………………………………………………………… Groupe :………………….

**TP N°1 : Initiation à l’utilisation du logiciel HYPERCHEM**

**( Compte rendu A)**

1. But :

………………………………………………………………………………………………………………………………...……………………………………………………………………............................................................................

1. Quel est le rôle de chacun des raccourcis suivants ?

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |
| ………………………...........................……………………………………….. | ………………………......................…………………………………….. | ……………………….........................……………………………………… |

1. Décrire les différentes étapes à suivre pour dessiner la molécule BH3 avec une longueur de liaison **B-H=1.10A°** et un angle de liaison **HBH=120°.**

………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………

………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………

………………….……………………………………………………………………………………………………………

1. Mesurer les paramètres géométriques de BH3 en utilisant *Model Build*.

………………………………………………………………………………………………………………………………

………………………………………………………………………………………………………………………………

1. Quelles sont les étapes à suivre pour lancer un calcul EHT ?

………………….……………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………

……………….………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………

1. Comment sauvegarder les résultats de notre calcul dans un fichier ? Quel est l’extension de ce fichier ?

………………….……………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………