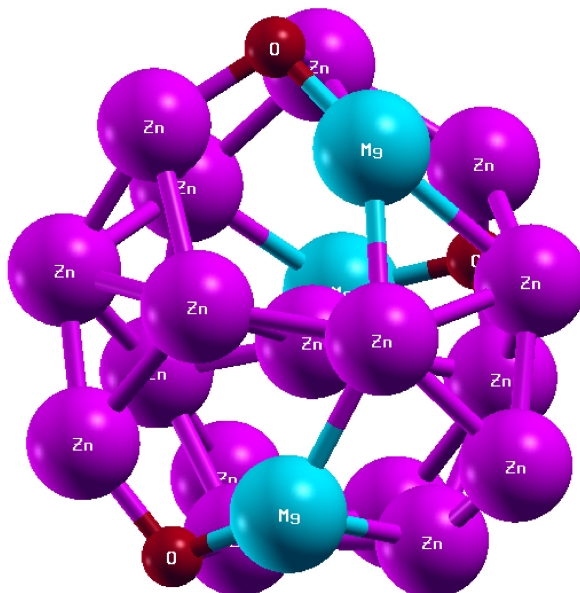


TP: Administration d'un dossier et construction de figure

Le fichier TOPO.zip est la version compressée du répertoire ./TOPO. Ce répertoire contient des fichiers avec des extensions .pdf, .tex, .log, .bib, .png et quelques autres extensions encore. Vous trouverez également des sous-répertoires, comme par exemple le répertoire ./TOPO ou le répertoire ./REDRAW. Il contient également les fichiers Fx0.xyz ou Fx15.xyz où se trouvent les structures des clusters et les fonctions de Fukui électrophyles des atomes du centre et de la surface.



La figure ci-dessus représente un cluster $\text{Zn}_{17}\text{Mg}_3+3\text{O}$ à savoir un cluster où 3 atomes d'oxygène se collent à la surface on parle d'adsorption. En rose sont représentés les atomes de Zn en bleu clair les atomes de magnésium et en rouge ceux d'oxygène. Cette structure est déduite d'un calcul de structure électronique.

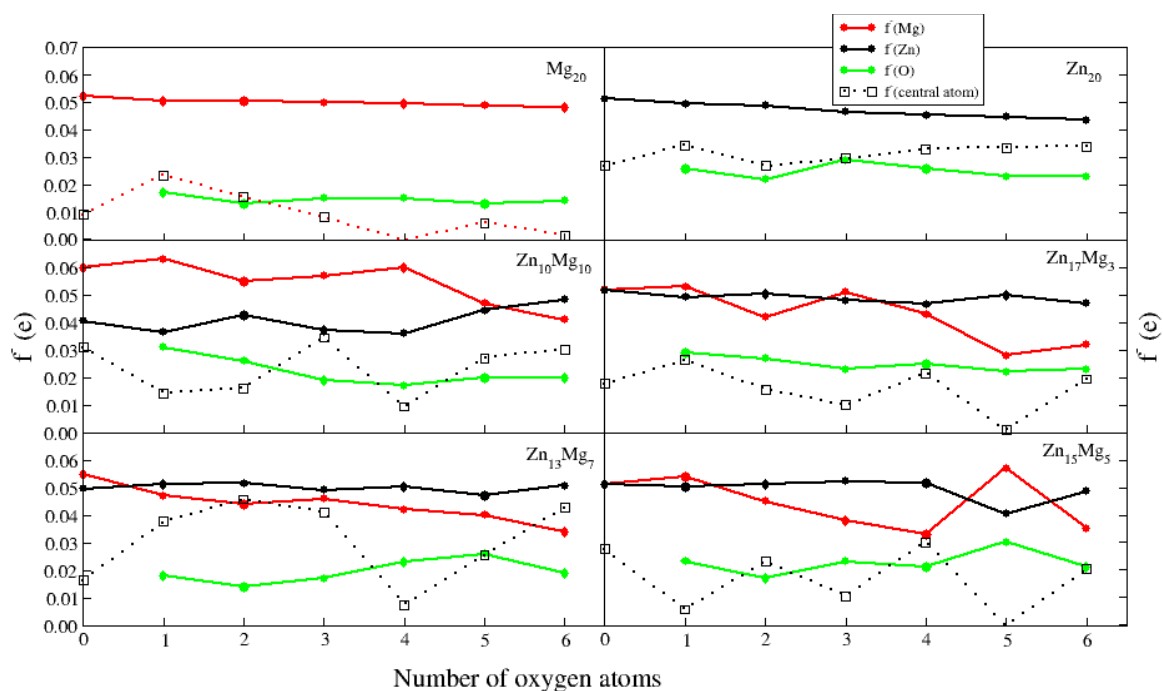
Partie I. Administration du répertoire

Créer un script python qui fait les opérations suivantes:

1. suppression de certains fichiers comme les .aux, les .dvi, les .bib et les .png
2. renommer les fichiers commençant par modif_AL_25enero-2021, modif_AL_21enero-2021 et modif_AL_22enero-2021 en remplaçant enero (espagnol) par janv (français)
3. créer des répertoires dont un répertoire LATEX où seront déplacés les .pdf et les .tex ainsi qu'un répertoire contenant les programmes ou scripts (.f90 .py) et leurs exécutables.
4. produire une liste de tous les répertoires et fichiers.

Partie II: Construction d'une figure:

La figure suivante a été construite en reprenant les données figurant dans les fichiers .xyz à savoir Fx0.xyz, Fx10.xyz, Fx13.xyz, Fx15.xyz, Fx17.xyz et Fx20.xyz. Le logiciel qui a servi à faire la présentation s'appelle xmgrace. Il est très utilisé dans le monde linux et pour différentes distributions telles que RedHat, Suse, Debian, Mint, ... La figure introductive est issue des données du fichiers Fx17.xyz.



Matplotlib permet de faire des figures de la même qualité voire meilleure. C'est donc l'objectif de cette partie que de faire mieux que le résultat de xmgrace, présenté ci-dessus.

Les données correspondantes aux fichiers FxX.xyz (X=0, 10, 13, 15, 17, 20) sont associées à l'évolution des structures des clusters Mg_{20} (X=0), $Zn_{10}Mg_{10}$ (X=10), $Zn_{13}Mg_7$ (X=13), $Zn_{15}Mg_5$ (X=15), $Zn_{17}Mg_3$ (X=17) et enfin Zn_{20} (X=20) soumis à l'adsorption – capture en surface – d'atomes d'oxygène. Jusqu'à 6 atomes ont été positionnés sur la surface des différents clusters.

Si l'on regarde plus prêt la figure construite avec xmgrace on voit pour les traits noirs avec des symboles les fonctions de Fukui f - pour les atomes de Zn en surface du cluster, avec des traits rouges les fonctions f - pour les atomes de Mg et en vert les fonctions f - pour les atomes d'oxygène. Sur la figure est aussi indiquée la fonction de Fukui f - pour l'atome de coeur au centre du cluster (Trait pointillé rouge ou noir).

Si l'on veut pouvoir reproduire et améliorer cette figure il faut faire l'examen des fichiers FxXX.xyz contenus dans le répertoire TOPO. Voici ce que l'on obtient pour les 39 premières lignes du fichiers Fx17.xyz (en rouge des commentaires pour expliciter le format du fichier)

20 (nombre d'atomes dans le cluster)

```
Zn 1.0465 2.3723 2.1968 0.06220000007 (élément 3 coord. 1.0465 ... 2.1968 Fonction f- 0.0622)
Zn 1.584 -2.10310000013 2.1475 0.0638000000052
Zn -2.55819999994 -0.33129999988 2.2093 0.0630000000061
Zn -0.221699999845 3.8646 0.5501 0.0746000000022
Zn -3.2306999999 -2.13700000005 0.5261 0.078199999894
Zn 3.4697 -1.73989999987 0.4575 0.076799999865
Zn -1.51409999991 0.2094 -2.99869999995 0.061999999939
Zn 0.8622 1.2203 -3.01760000016 0.064100000016
Zn 0.5504 -1.34169999994 -3.039000000015 0.073999999984
Zn -1.51190000007 1.8432 1.4122 0.0355999998744
Zn 2.3822 0.3808 1.3565 0.028500000108
Zn -0.82649999993 -2.26139999983 1.3633 0.02790000000702
Zn -0.89399999984 2.1523 -1.29970000014 0.0243999999977
Zn -1.42630000012 -1.81919999986 -1.33149999984 0.02640000000645
Zn 2.2779 -0.295500000054 -1.35920000013 0.027799999916
Zn 0.0278 -0.0241000000676 2.6078 0.0381000000002
```

Zn -0.000900000014552 0.0 -0.0499000000944 0.0179* (atome central marqué par une étoile)
Mg -2.91339999993 0.4212 -0.53910000012 0.0510000000156
Mg 1.8074 2.3114 -0.57529999986 0.053200000036
Mg 1.0895 -2.72230000006 -0.61720000004 0.050699999997
21 (nombre d'atomes dans le cluster 21 = 17 at. Zn+ 3 at. Mg + 1 at. O)

Zn 1.5852 2.3793 2.0927 0.045500000054
Zn 0.5753 -2.0712000001 2.0644 0.039200000101
Zn -1.86860000007 -0.92889999987 2.0466 0.040699999929
Zn -0.382000000145 3.7941 0.612 0.082300000004
Zn -3.41639999994 -2.38100000002 0.4152 0.0889000000065
Zn 3.1108 -2.18809999986 1.5631 0.0797999999876
Zn -1.63230000008 0.0255 -2.87569999984 0.044999999993
Zn 0.636 1.2328 -3.12490000002 0.068500000023
Zn 0.4322 -1.48339999996 -3.0056000001 0.059100000082
Zn -1.40099999998 1.6506 1.3193 0.0199999999574
Zn 2.2875 0.1273 0.9857 0.033199999901
...

La figure à représenter contient 6 panneaux, dans chacun de ces panneaux les fonctions de Fukui f- sont placées en ordonnées et le nombre d'atomes d'oxygène variant entre 0 (cluster pur) et 6 est indiqué en abscisse.

La partie I vous servira plus tard si vous devez nettoyer ou organiser des répertoires. Il est recommandé d'utiliser les méthodes du module os. Quant à la partie 2, elle permet de se familiariser avec Matplotlib. Sur l'espace dédié moodle, quelques propositions faites par vos prédécesseurs sur un problème analogue sont données à titre indicatif.

Barème indicatif:

Note>18	Part I + II (Tkinter pour I ou autre plus)	CR détaillé
18 ≥ Note ≥ 16	Part I + II	CR détaillé
16 > Note ≥ 14	Part I + II	CR acceptable
14 > Note ≥ 10	Part I ou II	CR détaillé
10 > Note	Part I ou II	CR trop succinct.