
DIAGRAMME DE CORRELATION DE MOLÉCULES DIATOMIQUES (2)
ANION OH⁻

- 1) Donner la configuration électronique des atomes O et H dans leur état fondamental, en schématisant l'occupation des orbitales à l'aide de cases quantiques. Indiquer le nombre d'OA de valence et d'électrons de valence de chaque atome.
- 2) Quelles sont les OA de valence susceptibles de former des OM de symétrie σ ? de symétrie π ? Justifier.
- 3) Schématiser qualitativement le diagramme d'interaction entre les OA de valence des deux atomes donnant lieu à la formation des orbitales moléculaires. Indiquer la symétrie (σ ou π) de chaque OM, et placer les électrons de valence sur les différents niveaux énergétiques.
- 4) Peut-on prévoir, en fonction du remplissage des OA sur le diagramme, le sens et l'importance du déplacement du nuage électronique entre les atomes? Justifier.
- 5) Lancer un calcul d'optimisation de géométrie à l'aide de logiciel AMPAC. On utilisera la paramétrisation MNDO.

Relever dans le fichier résultat :

- L'énergie totale
- La longueur optimisée de la liaison O-H
- La symétrie, l'énergie des OM et les coefficients LCAO
- La répartition des charges sur les atomes
- Le moment dipolaire de la molécule

Dans l'interface graphique, ouvrir le fichier ".vis" afin de visualiser les OM (menu RESULTS>SURFACES).

- 1) A partir des coefficients LCAO, schématiser qualitativement la forme de chaque OM en fonction des contributions des différentes OA, en comparant aux résultats donnés par l'interface graphique. Indiquer pour chaque OM la nature (liante, non liante, anti-liante) du couplage entre les différentes OA.
- 2) Calculer les populations électroniques portées par les orbitales atomiques de O et H.
- 3) En déduire la charge partielle portée par chaque atome.