
MOLÉCULES POLYATOMIQUES (2) ORBITALES MOLECULAIRES DE H₂O

- 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) Quelle est la structure géométrique de la molécule prévue par le modèle VSEPR ? Donner une valeur approximative de l'angle HOH.
- 3) Quels sont les différents éléments de symétrie de la molécule ?
- 4) Quelles sont les OA de valence susceptibles de former des OM de symétrie σ ? de symétrie π ?

5) *Optimisation de la géométrie moléculaire*

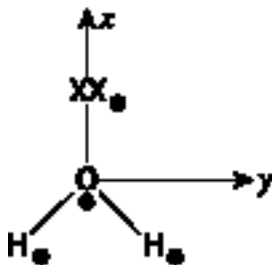
Construire la molécule à l'aide de l'interface graphique d'AMPAC et du « BUILDER » (Cliquer sur l'oxygène puis dans la fenêtre principale pour créer la molécule). Enregistrer le fichier (FILE>SAVE) en lui donnant le nom `h2o.dat` puis, dans le menu CALCULATE>AMPAC, sélectionner un calcul de type RHF avec optimisation de géométrie (JOBTYP = OPTIMIZATION) et la paramétrisation AM1. Lancer le calcul (SUBMIT).

Relever dans le fichier résultat (.out) :

- L'énergie totale
- La géométrie optimisée (longueurs et angle de liaison)
- Les 3 composantes et la norme du moment dipolaire

6) *Rotation du repère cartésien*

Pour une meilleure lisibilité du diagramme orbitalaire, il est préférable de définir le repère cartésien de façon à orienter l'axe x le long de l'axe de symétrie de la molécule. Pour cela, il est nécessaire d'ajouter un atome fictif dans la liste des atomes, comme schématisé ci-dessous :



A partir des valeurs des longueurs et de l'angle de liaison relevées dans la question 4, créer (avec l'application `nedit`) un nouveau fichier de données correspondant à la géométrie optimisée (les coordonnées atomiques pourront être entrées au choix sous forme de coordonnées cartésiennes ou de matrice Z), et l'enregistrer (`h2o-opt.dat`).

7) *Détermination des OM dans le nouveau repère*

Ouvrir le fichier `h2o-opt.dat` dans l'interface graphique (FILE>OPEN) et lancer un calcul RHF/AM1 sans optimisation de géométrie (JOBTYPE = ENERGY). Pour afficher les OM dans le fichier résultat (.out) et les visualiser (.vis), il est nécessaire d'ajouter le mot-clé « VECTORS » dans le champ « ADDITIONAL KEYWORDS ».

Relever dans le fichier résultat (.out) :

- L'énergie totale
- L'énergie des OM et les coefficients LCAO
- Les charges atomiques
- Les 3 composantes et la norme du moment dipolaire

Vérifier que l'énergie totale est identique à celle obtenue dans la question 4, et que le moment dipolaire est bien orienté suivant l'axe x (la norme doit rester invariante).

8) Schématiser qualitativement les 6 OM à partir des contributions des différentes OA.

9) Calculer la population électronique et la charge partielle des différents atomes. Comparer aux valeurs relevées dans le fichier résultat.