
MOLÉCULES POLYATOMIQUES (3) ORBITALES MOLECULAIRES DE H_2CO

- 1) Donner la configuration électronique de tous les atomes de la molécule 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 ? Quels sont les différents éléments de symétrie de la molécule ?
- 3) Quelles sont les OA de valence susceptibles de former des OM de symétrie σ ? de symétrie π ?
- 4) Lancer un calcul d'optimisation de géométrie à l'aide de logiciel AMPAC. On utilisera la paramétrisation AM1. La molécule

Relever dans le fichier résultat (.out) :

- La géométrie optimisée (longueurs et angles de liaison).
- La symétrie, l'énergie des OM et les coefficients LCAO
- Les charges atomiques
- Le moment dipolaire de la molécule

Visualiser les OM à l'aide de l'interface graphique xagui (fichier « .vis »).

- 5) Identifier les OM de symétrie σ et π .
- 6) Schématiser qualitativement les OM à partir des contributions des différentes OA.
- 7) Calculer la population électronique et la charge partielle portées par les OA $2p_z$ de C et O.
- 8) En déduire la charge partielle portée par les OM σ de C et O.
- 9) Schématiser sur un diagramme la formation des OM π à partir du couplage des OA $2p_z$ de C et O. Donner une analyse qualitative du transfert de la charge π entre les deux atomes.
- 10) Calculer l'indice de la liaison π entre C et O.