

TP N°4

Etude de la structure électronique des molécules H_2O , NH_3 , H_2S et PH_3

But : A partir de calculs de chimie quantique dans le modèle des OM-CLOA, étudier la structure électronique de petites molécules.

Mise en œuvre : ces calculs se feront avec le logiciel Gaussian 09.

- Construire les molécules H_2O ; NH_3 ; H_2S et PH_3 .
- Optimiser la géométrie de molécules en utilisant la méthode HF et la base STO-3G.

Calculer en particulier : (i) les orbitales moléculaires HOMO et LUMO (pour H_2O calculer toutes les OM occupées) (ii) le moment dipolaire et (iii) les charges de Mulliken.

Pour chacun des systèmes moléculaires étudiés, on précisera :

- la géométrie d'équilibre, en notant les distances et les angles calculés.

Tableau 1.

	E_{HOMO} (eV)	E_{LUMO} (eV)	d_{X-H} (Å)	a_{H-X-H} (°)	PI_{exp} (eV)
H_2O					12.60
NH_3					10.85
H_2S					10.48
PH_3					9.90

Questions:

- Dessiner schématiquement les OM occupées de la molécule H_2O .
- Comparer les énergies des orbitales HOMO avec les valeurs expérimentales des potentiels d'ionisation (voir Tableau 1).
- Expliquer les résultats obtenus.