

Remarques :

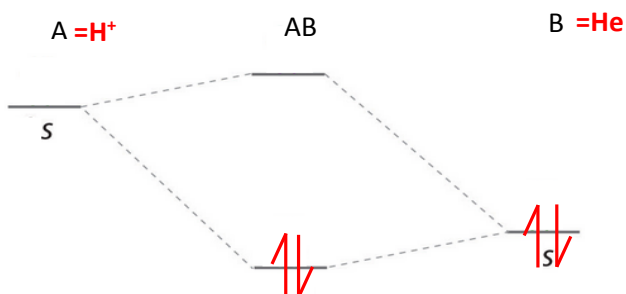
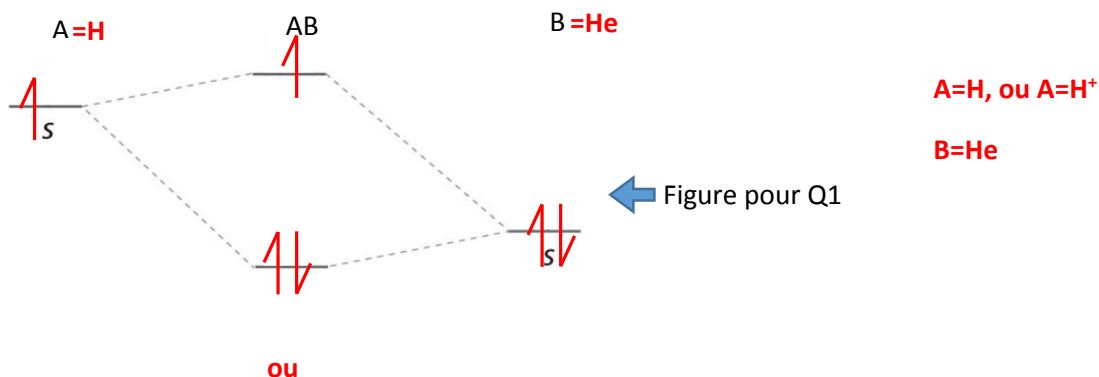
1. La date limite est le 30 nov. 2015, 10h30.
2. Reportez-vous à la section de vos notes de cours où nous avons discuté de la matière en lien avec ce devoir.
3. Il y a une pénalité de 50% pour une remise de devoir faite après la date limite. Un devoir soumis plus de 24h après la date limite recevra une note de 0.

Questions :

1.

Les orbitales moléculaires pour une molécule sont données ci-dessous. Pour cette molécule, choisir les bonnes réponses :

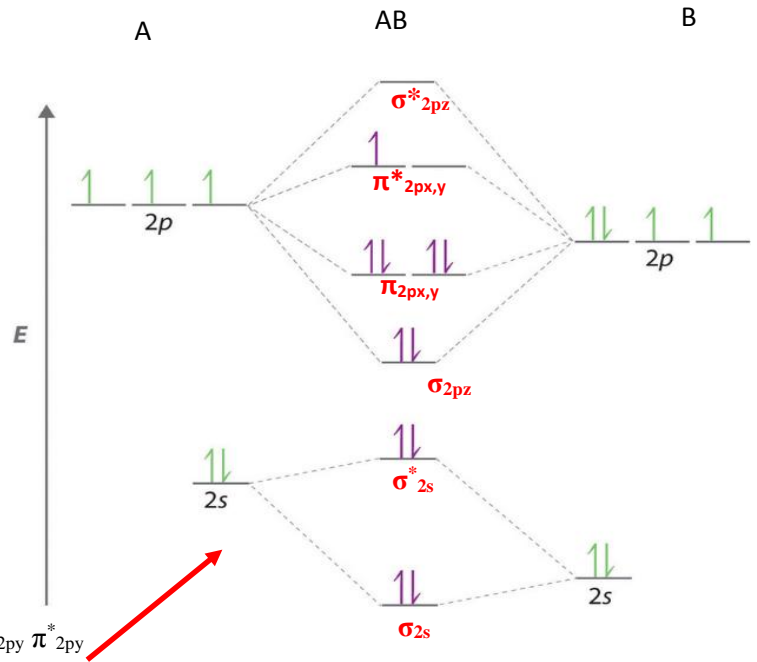
- i. La molécule est symétrique grâce à la liaison entre 2 orbitales atomiques de « s ». (V/F)
- ii. La liaison a la géométrie σ grâce à la liaison entre 2 orbitales atomiques de « s ». (V/F)
- iii. La plus haute orbitale moléculaire est une orbitale liante. (V/F)
- iv. Pour l'orbitale moléculaire, $\Psi_{\text{liante}} = c_1\Psi_A + c_2\Psi_B$, $c_1 < c_2$. (V/F)
- v. Utilisant les atomes H et/ou He, seulement, rempilez les électrons dans les orbitales atomiques et moléculaires (indiquez quels atomes vous avez choisis pour A et B).



2.

Les orbitales moléculaires et le mode de remplissage pour une molécule inconnue, sont donnés à la Figure 2. Pour cette molécule, choisir/mettre les bonnes réponses :

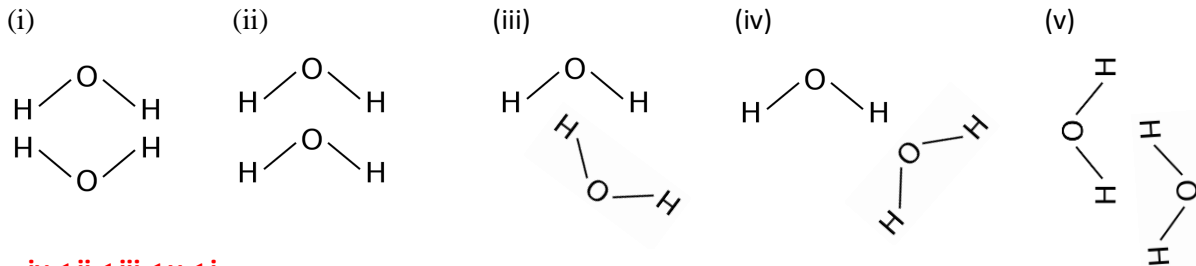
- i. Quels sont les éléments représentés par A et B? **A=N, B=O**
- ii. Quelle est l'ordre de la liaison, n? **n=2,5**
- iii. La molécule est paramagnétique (V/F) **(V)**
- iv. La molécule est un radical (V/F) **(V)**
- v. La densité électronique de la plus haute orbitale (avec le seul électron) est plus proche à quel atome? **N (ou A)**
- vi. Bien placer les noms des orbitales moléculaires à côté de chaque orbitale moléculaire. π^*_{2px} σ_{2s} , π_{2px} σ^*_{2s} , σ^*_{2pz} , σ_{2pz} , π_{2py} π^*_{2py}



↑ Figure pour Q2

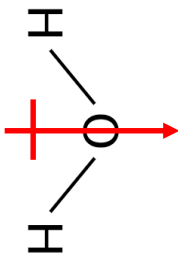
3.

Choisissez l'orientation avec l'énergie minimal **iv** :



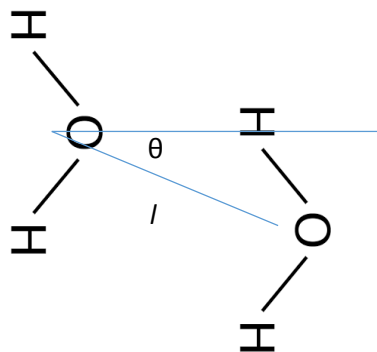
4.

- i. Pour l'image de l'eau ci-dessous, ajouter une flèche pour indiquer la direction du dipôle moléculaire.



← Figure pour Q4

- ii. Si le moment dipolaire de l'eau est $\mu_{\text{H}_2\text{O}} = 1.8\text{D}$, quelle est l'énergie potentielle pour cette configuration des molécules, où $l = 150 \times 10^{-12}\text{m}$ et $\theta = 30^\circ$:



← Figure pour Q4

$$U = \frac{k M_1 M_2}{r^3} (1 - 3 \cos^2 \theta)$$

$$l = 150 \times 10^{-12} \text{ m}, \quad \theta = 30^\circ, \quad \mu = 1.8 \text{ D}$$

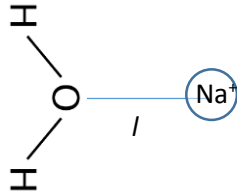
$$\begin{aligned} \mu_{\text{H}_2\text{O}} = 1.8 \text{ D} &= 1.8 \text{ D} / (3 \times 10^{29} \text{ D/cm}) \\ &= 6 \times 10^{-30} \text{ C}\cdot\text{m} \end{aligned}$$

$$U = \frac{9 \times 10^9 \text{ J m C}^{-2} \times (6 \times 10^{-30} \text{ C}\cdot\text{m})^2 (1 - 3 \cos^2(30))}{(150 \times 10^{-12} \text{ m})^3}$$

$$U = -1,2 \times 10^{-19} \text{ J}$$

5.

- i. Calculer l'énergie potentielle pour une seule molécule de NaCl.
- ii. Pour l'orientation illustrée ci-dessous, calculez l'énergie potentielle entre une molécule d'eau et l'ion de Na^+ si $l = 300 \times 10^{-12} \text{m}$



← Figure pour Q5

5: $\Delta\chi$ covalent ou ionique
($\chi_{\text{Na}} = 0.9$, $\chi_{\text{Cl}} = 3.0$)

$\Delta\chi = 2.1$ \therefore liaison ionique.

$r_{\text{Na}^+}^{\text{ionique}} = 0.095 \text{ nm}$
 $r_{\text{Cl}^-}^{\text{ionique}} = 0.181 \text{ nm}$ } utilisant le tableau périodique fourni.

$$r_{\text{tot}} = 0.276 \times 10^{-9} \text{ m}$$

$$U = \frac{k q_1 q_2}{r_{\text{tot}}} = \frac{9 \times 10^9 \text{ J} \cdot \text{m} \cdot \text{C}^{-2} \times (1.602 \times 10^{-19} \text{ C}) (1.602 \times 10^{-19} \text{ C})}{0.276 \times 10^{-9} \text{ m}}$$

$$= -0.37 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$\text{ii) } U = -k \frac{M_{\text{H}_2\text{O}} q_{\text{Na}^+}}{r^2}$$

$$M_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{1.8 \text{ D}}{3 \times 10^{29} \text{ DC}^{-1} \cdot \text{m}^{-1}}$$

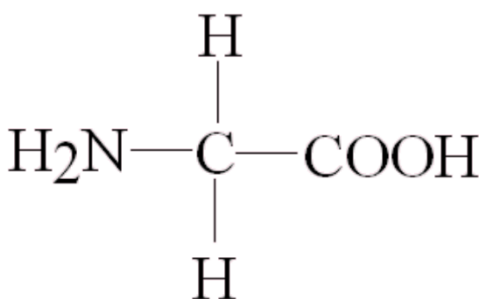
$$= 6 \times 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$$

$$= - \frac{(9 \times 10^9 \text{ J} \cdot \text{m} \cdot \text{C}^{-2}) (6 \times 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}) (1.602 \times 10^{-19} \text{ C})}{(300 \times 10^{-12} \text{ m})^2}$$

$$= -9.612 \times 10^{-20} \text{ J}$$

6.

L'acide aminé glycine est dessiné ci-dessous.



← Figure pour Q6

- La molécule dans la figure pertinente est dans une forme « neutre » (V/F)
- La redessiner comme une bonne structure de Lewis dans un environnement de pH=7. Assurez-vous que toutes les paires d'électrons libres et/ou tous les atomes sont inclus.
- S'il y a un dipôle, incluez une flèche pour en indiquer la direction.

