

Remarques :

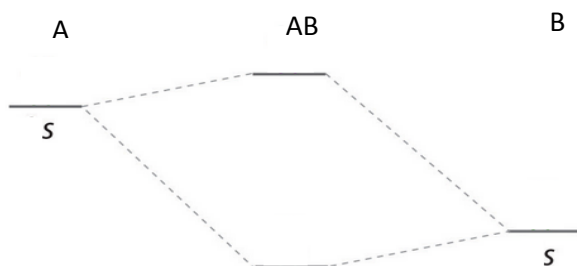
1. La date limite est le 30 nov. 2015, 10h30.
2. Reportez-vous à la section de vos notes de cours où nous avons discuté de la matière en lien avec ce devoir.
3. Il y a une pénalité de 50% pour une remise de devoir faite après la date limite. Un devoir soumis plus de 24h après la date limite recevra une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

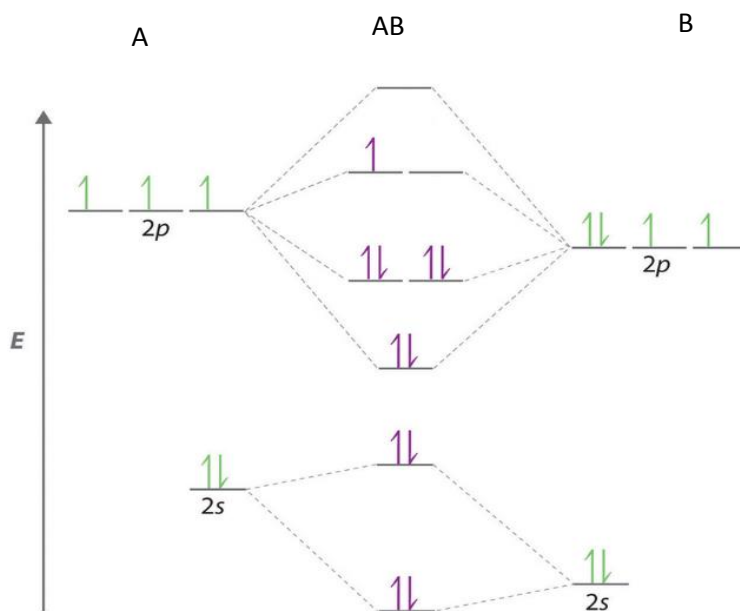


← Figure pour Q1

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 :

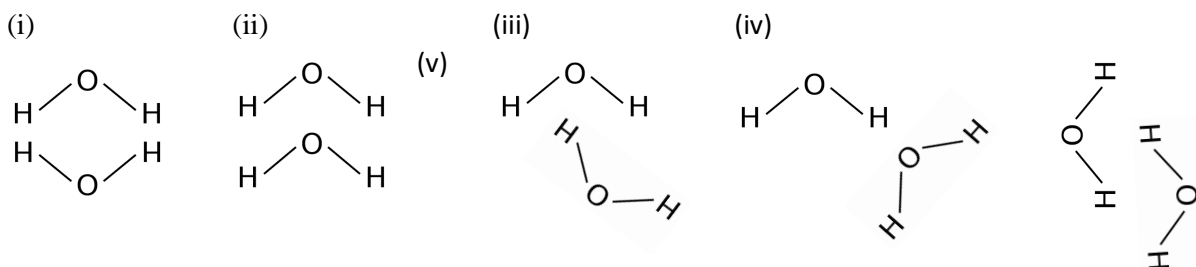
- i. Quels sont les éléments représentés par A et B? _____
- ii. Quelle est l'ordre de la liaison, n?
- iii. La molécule est paramagnétique (V/F)
- iv. La molécule est un radical (V/F)
- v. La densité électronique de la plus haute orbitale (avec le seul électron) est plus proche à quel atome?
- vi. Bien 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

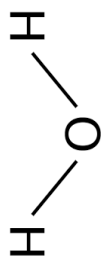
3.

Choisissez l'orientation avec l'énergie minimal_____:



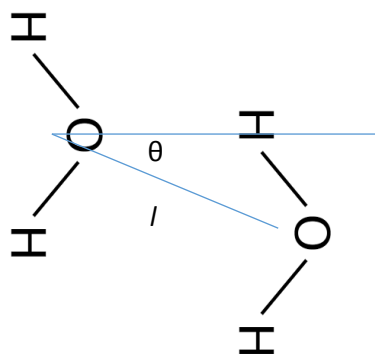
4.

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



← Figure pour Q4

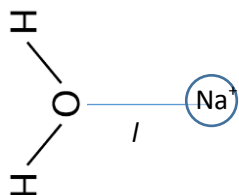
- ii. Si le moment dipolaire de l'eau est $\mu_{\text{H}_2\text{O}} = 1.8\text{D}$, quelle est l'énergie potentielle pour cette configuration des molécules, où $l=150 \times 10^{-12}\text{m}$ et $\theta=30^\circ$:



← Figure pour Q4

5.

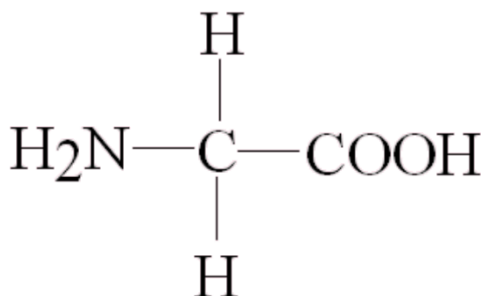
- i. Calculer l'énergie potentielle pour une seule molécule de NaCl.
- ii. Pour l'orientation illustrée ci-dessous, calculez l'énergie potentielle entre une molécule d'eau et l'ion de Na⁺ si $l = 300 \times 10^{-12} \text{ m}$



← Figure pour Q5

6.

L'acide aminé glycine est dessiné ci-dessous.



← Figure pour Q6

- i. La molécule dans la figure pertinente est dans une forme « neutre » (V/F)
- ii. 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.
- iii. S'il y a un dipôle, incluez une flèche pour en indiquer la direction.