

**Directives (lire attentivement) :** (i) Écrire (lisiblement) toutes les réponses dans le cahier fourni. (ii) Afficher tous les calculs et les unités pour la totalité des points. (iii) Retour cette feuille d'examen avec votre nom et N° de dossier dans votre cahier. Pour c'examen de pratique, vous devriez consulter votre notes et site web de cours.

**Constants :**

$$k=1/4\pi\epsilon_0=9\times 10^9 \text{J}\cdot\text{m}\cdot\text{C}^{-2}$$

$$c=3\times 10^8 \text{m}\cdot\text{s}^{-1}$$

$$m_n=1,675\times 10^{-27} \text{kg}, m_p=1,672\times 10^{-27} \text{kg}$$

$$a_0=53\times 10^{-12} \text{m}$$

$$h=6,626\times 10^{-34} \text{J}\cdot\text{s}$$

**Équations :**

$$\vec{E}=kq/r^2, \text{ (champ électrique d'une } q\text{)}$$

$$\vec{E}=2k\mu/r^3, \text{ (champ électrique d'un } \mu\text{)}$$

$$V=kq/r \text{ (tension)}$$

$$F=ma$$

$$U_{qq}=kq_1q_2/d$$

$$U_{q\mu}=-kq_1\mu_2\cos\theta/d^2$$

$$U_{\mu\mu}=k\mu_1\mu_2(1-3\cos^2\theta)/d^3$$

$$U_{\mu\alpha}=-4k\mu^2\alpha^3/d^6$$

$$\mu=qd$$

$$\mu^*=\alpha\vec{E}$$

$$E=h\nu =hc/\lambda \text{ (énergie d'un photon)}$$

$$E=mc^2$$

$$K=1/2mv^2 \text{ (énergie cinétique)}$$

$$E_{\text{rot}}=hBJ(J+1)$$

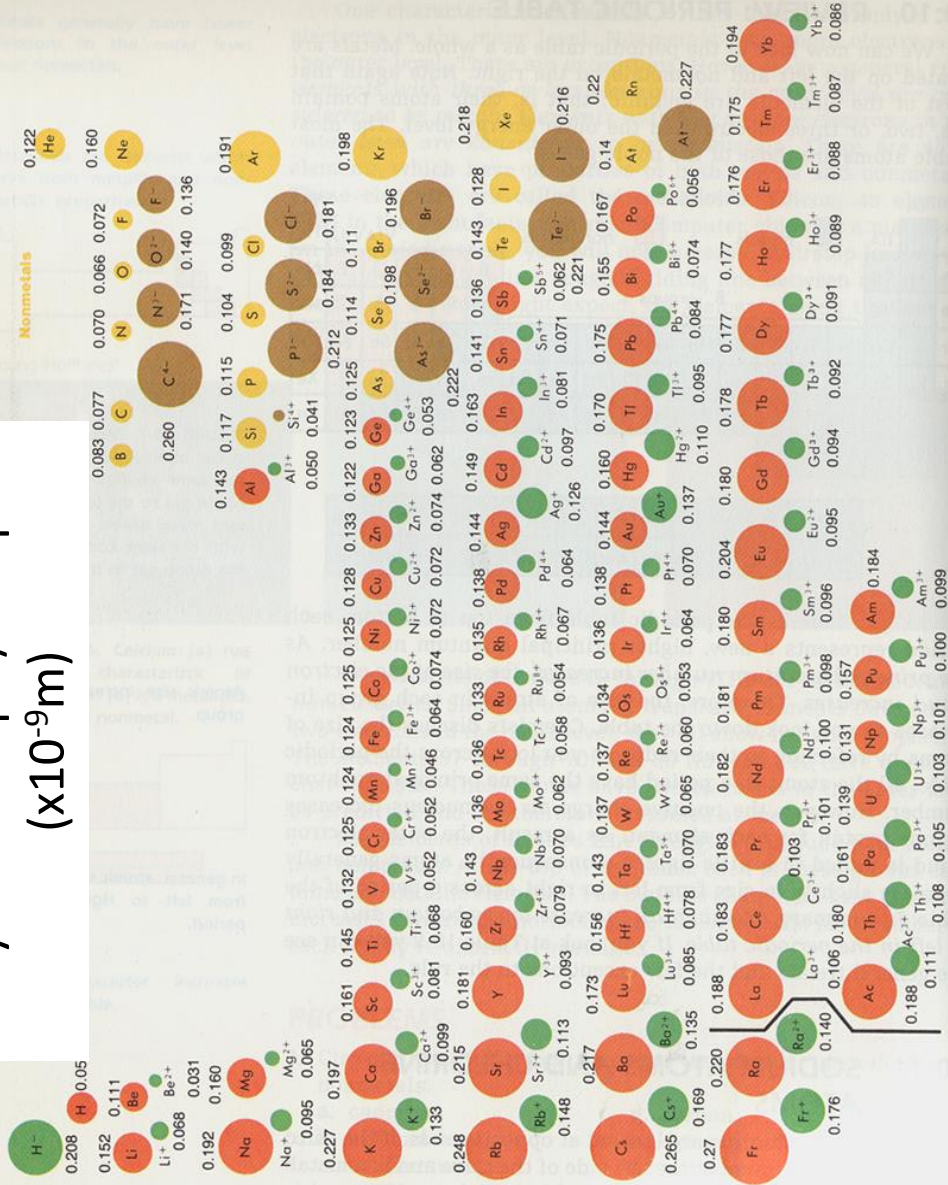
$$B=\hbar/4\pi I, I=\sum m_i r_i^2$$

$$\int \Psi_A^2 d\tau=1$$

$$S_{12} = \int \Psi_1 \Psi_2 d\tau \text{ (intégral de chevauchement)}$$

$$= \left( 1 + \frac{R_{12}}{a_0} + \frac{1}{3} \frac{R_{12}^2}{a_0^2} \right) e^{-R_{12}/a_0}$$

# Rayon atomique/ionique (x10<sup>-9</sup>m)



## 1. Diatomic molecules



$$I = \mu R^2 \quad \mu = \frac{m_A m_B}{m}$$

## 2. Triatomic linear rotors



$$I = m_A R^2 + m_C R'^2 - \frac{(m_A R - m_C R')^2}{m}$$



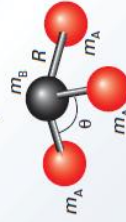
$$I = 2m_A R^2$$

## 3. Symmetric rotors



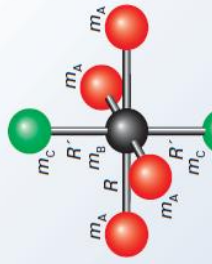
$$I_{\parallel} = 2m_A (1 - \cos \theta) R^2$$

$$I_{\perp} = m_A (1 - \cos \theta) R^2 + \frac{m_B}{m} (m_B + m_B) R^2 + 6m_A R \left[ \frac{1}{3} (1 + 2 \cos \theta) \right]^{1/2} R'$$



$$I_{\parallel} = 2m_A (1 - \cos \theta) R^2$$

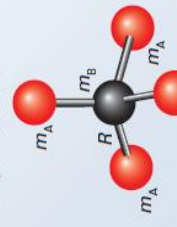
$$I_{\perp} = m_A (1 - \cos \theta) R^2 + \frac{m_A}{m} (m_B + m_C) (1 + 2 \cos \theta) R^2$$



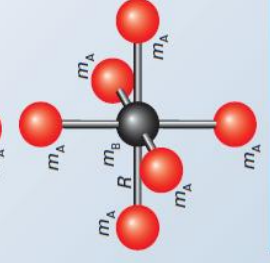
$$I_{\parallel} = 4m_A R^2$$

$$I_{\perp} = 2m_A R^2 + 2m_C R^2$$

## 4. Spherical rotors



$$I = \frac{8}{3} m_A R^2$$



$$I = 4m_A R^2$$

\* In each case, m is the total mass of the molecule.

# Rayon covalent des éléments ( $\times 10^{-12}\text{m}$ )

|                                     |         |        |         |        |        |             |             |             |        |        |        |        |        |        |        |        |                       |        |        |        |         |  |
|-------------------------------------|---------|--------|---------|--------|--------|-------------|-------------|-------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|-----------------------|--------|--------|--------|---------|--|
| H                                   |         |        |         |        |        |             |             |             |        |        |        |        |        |        |        |        | He                    |        |        |        |         |  |
| 1                                   |         |        |         |        |        |             |             |             |        |        |        |        |        |        |        |        | 2                     |        |        |        |         |  |
| 31(5)                               |         |        |         |        |        |             |             |             |        |        |        |        |        |        |        |        | 28                    |        |        |        |         |  |
| Li                                  | Be      |        |         |        |        |             |             |             |        |        |        |        |        |        |        | B      | C                     | N      | O      | F      | Ne      |  |
| 3                                   | 4       |        |         |        |        |             |             |             |        |        |        |        |        |        |        | 5      | 6                     | 7      | 8      | 9      | 10      |  |
| 128(7)                              | 96(3)   |        |         |        |        |             |             |             |        |        |        |        |        |        |        | 84(3)  | sp <sup>3</sup> 76(1) | 71(1)  | 66(2)  | 57(3)  | 58      |  |
|                                     |         |        |         |        |        |             |             |             |        |        |        |        |        |        |        |        | sp <sup>2</sup> 73(2) |        |        |        |         |  |
|                                     |         |        |         |        |        |             |             |             |        |        |        |        |        |        |        |        | sp 69(1)              |        |        |        |         |  |
| Na                                  | Mg      |        |         |        |        |             |             |             |        |        |        |        |        |        |        | Al     | Si                    | P      | S      | Cl     | Ar      |  |
| 11                                  | 12      |        |         |        |        |             |             |             |        |        |        |        |        |        |        | 13     | 14                    | 15     | 16     | 17     | 18      |  |
| 166(9)                              | 141(7)  |        |         |        |        |             |             |             |        |        |        |        |        |        |        | 121(4) | 111(2)                | 107(3) | 105(3) | 102(4) | 106(10) |  |
| K                                   | Ca      | Sc     | Ti      | V      | Cr     | Mn          | Fe          | Co          | Ni     | Cu     | Zn     | Ga     | Ge     | As     | Se     | Br     | Kr                    |        |        |        |         |  |
| 19                                  | 20      | 21     | 22      | 23     | 24     | 25          | 26          | 27          | 28     | 29     | 30     | 31     | 32     | 33     | 34     | 35     | 36                    |        |        |        |         |  |
| 203(12)                             | 176(10) | 170(7) | 160(8)  | 153(8) | 139(5) | I.s. 139(5) | I.s. 132(3) | I.s. 126(3) | 124(4) | 132(4) | 122(4) | 122(3) | 120(4) | 119(4) | 120(4) | 120(3) | 116(4)                |        |        |        |         |  |
| h.s. 161(8) h.s. 152(6) h.s. 150(7) |         |        |         |        |        |             |             |             |        |        |        |        |        |        |        |        |                       |        |        |        |         |  |
| Rb                                  | Sr      | Y      | Zr      | Nb     | Mo     | Tc          | Ru          | Rh          | Pd     | Ag     | Cd     | In     | Sn     | Sb     | Te     | I      | Xe                    |        |        |        |         |  |
| 37                                  | 38      | 39     | 40      | 41     | 42     | 43          | 44          | 45          | 46     | 47     | 48     | 49     | 50     | 51     | 52     | 53     | 54                    |        |        |        |         |  |
| 220(9)                              | 195(10) | 190(7) | 175(7)  | 164(6) | 154(5) | 147(7)      | 146(7)      | 142(7)      | 139(6) | 145(5) | 144(9) | 142(5) | 139(4) | 139(5) | 138(4) | 139(3) | 140(9)                |        |        |        |         |  |
| Cs                                  | Ba      | La     | Lu      | Hf     | Ta     | W           | Re          | Os          | Ir     | Pt     | Au     | Hg     | Tl     | Pb     | Bi     | Po     | At                    | Rn     |        |        |         |  |
| 55                                  | 56      |        | 71      | 72     | 73     | 74          | 75          | 76          | 77     | 78     | 79     | 80     | 81     | 82     | 83     | 84     | 85                    | 86     |        |        |         |  |
| 244(11)                             | 215(11) | 187(8) | 175(10) | 170(8) | 162(7) | 151(7)      | 144(4)      | 141(6)      | 136(5) | 136(6) | 132(5) | 145(7) | 146(5) | 148(4) | 140(4) | 150    | 150                   |        |        |        |         |  |
| Fr                                  | Ra      | Ac     |         |        |        |             |             |             |        |        |        |        |        |        |        |        |                       |        |        |        |         |  |
| 87                                  | 88      |        |         |        |        |             |             |             |        |        |        |        |        |        |        |        |                       |        |        |        |         |  |
| 260                                 | 221(2)  |        |         |        |        |             |             |             |        |        |        |        |        |        |        |        |                       |        |        |        |         |  |

**Directives (lire attentivement)** : (i) Écrire (lisiblement) toutes les réponses dans le cahier fourni. (ii) Afficher tous les calculs et les unités pour la totalité des points. (iii) Retour cette feuille d'examen avec votre nom et N° de dossier dans votre cahier. Pour c'examen de pratique, vous devriez consulter votre notes et site web de cours.

**1. Pour la molécule  $\text{H}_2\text{C}=\text{C}=\text{CH}_2$  :**

- (a) L'hybridation pour les atomes de carbone (C) terminaux est \_\_\_\_\_?  
 (b) L'hybridation pour l'atome de carbone (C) central est \_\_\_\_\_?

**2. Pour les molécules : (i)  $\text{CH}_4$ , (ii)  $\text{CH}_2\text{D}_2$ ,  $\text{CH}_2\text{Li}_2$  et (iii)  $\text{CD}_4$ , où (D est  $^2\text{H}$ ) :**

Dessinez les molécules et déterminez la direction d'un dipôle pour chacune, s'il existe. Assumez que la longueur de la liaison C-H est la même que C-D.

**3. Pour les molécules : (i)  $\text{CCl}_4$ ; (ii)  $\text{CH}_4$  (iii);  $\text{SeF}_4$ ; (iv)  $\text{SiCl}_4$  :**

- (a) Dessinez la structure de Lewis  
 (b) Quelle(s) molécule(s) dans l'énoncé 3(a) a(ont) un moment dipolaire  $\mu > 0$ ?

**4. Pour la molécule  $\text{HNNH}$  :**

- (a) Dessiner la structure de Lewis.  
 (b) Calculer la charge formelle d' : (i) un atome d'azote et (ii) un atome d'hydrogène qui vous permettra de vérifier que vous avez la structure optimale.  
 (c) L'hybridation pour les atomes d'azote (N) est \_\_\_\_\_?  
 (d) Calculer la charge partielle pour : (i) un atome d'azote et (ii) un atome d'hydrogène.  
 (e) Les types de liaisons entre les deux atomes d'azote sont \_\_\_\_\_.  
 (i)  $\sigma, \pi$ ; (ii)  $\sigma, \pi, \pi$ ; (iii)  $\sigma, \sigma, \pi$ ; ou (iv)  $\sigma, \pi, \pi, \pi$ ?  
 (f) Si vous avez obtenu la bonne structure de Lewis, la molécule peut prendre deux formes géométriques. Dessinez-les.  
 (g) Ajouter des flèches des dipôles sur vos images en (f).  
 (h) V/F : dans au moins une des formes de l'énoncé 4(f), il en existe une avec un moment dipolaire  $\mu = 0$ .

**5. Pour avoir des liaisons délocalisées (par exemple dans un polymère conjugué) il faut que la molécule possède :**

- (i) au moins deux liaisons  $\pi$ , (ii) au moins deux structures résonantes (iii) au moins trois

**Directives (lire attentivement) :** (i) Écrire (lisiblement) toutes les réponses dans le cahier fourni. (ii) Afficher tous les calculs et les unités pour la totalité des points. (iii) Retour cette feuille d'examen avec votre nom et N° de dossier dans votre cahier. Pour c'examen de pratique, vous devriez consulter votre notes et site web de cours.

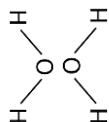
liaisons  $\sigma$ , (iv) au moins quatre atomes, ou (v) un  $\text{pH} < \text{pK}_a$  d'un groupe acide carboxylique?

**6. Pour la molécule CO :**

- (a) Dessiner la structure de Lewis.
- (b) Combien des liaisons de  $\pi$  existent entre C et O?
- (c) Quelles sont les orbitales atomiques de chaque atome qui contribuent à une (des) liaison(s)  $\pi$ :
  - (i).  $p_x$ ; (ii)  $p_y$ , (iii)  $p_z$ ; (iv)  $p_x, p_y$ ; (v)  $p_y, p_z$ ; (vi)  $p_x, p_y, p_z$ ?; ou (vii) aucune?
- (d) Ajouter une flèche qui indique la direction du moment dipolaire.

**7. Pour  $\text{H}_2\text{O}$  on a un moment dipolaire  $\mu_{\text{mesuré}} = 1,8 \text{ D}$ .**

- (a) Calculer la valeur de l'énergie potentielle absolue (en unités de J) entre deux molécules d'eau si la distance de séparation est  $100 \times 10^{-12} \text{ m}$  et l'orientation est la suivante : /4



- (b) Est-ce que l'énergie potentielle est négative (attractive) ou positive (répulsive)? /1

**8. Pour la molécule KCl :**

- (a) Est-ce que la liaison de KCl est covalente ou ionique? Pourquoi? /1
- (b) Quelle est la charge sur chaque atome (en unités de C)? /2
- (c) Déterminer la distance entre les deux atomes (en unités de m). /2
- (d) Calculer la valeur du moment dipolaire (en unités de D) et dessiner une flèche pour indiquer sa direction. /2
- (e) Calculer le pourcentage ionique ou covalent (dépendamment du type de la liaison) si la valeur du moment dipolaire mesuré est  $\mu_{\text{mesuré}} = 10,5 \text{ D}$ . /2

**Directives (lire attentivement) :** (i) Écrire (lisiblement) toutes les réponses dans le cahier fourni. (ii) Afficher tous les calculs et les unités pour la totalité des points. (iii) Retour cette feuille d'examen avec votre nom et N° de dossier dans votre cahier. Pour c'examen de pratique, vous devriez consulter votre notes et site web de cours.

**9. En considérant qu'une orbitale moléculaire liante est la combinaison linéaire des deux orbitales atomiques  $\Psi_{\text{liant}} = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$  :**

Pour H<sub>2</sub>, calculez la valeur de c (Utilisez le concept de l'intégrale de chevauchement avec la bonne valeur de R<sub>12</sub> pour une molécule covalente).

**10. Moment dipolaire :**

En considérant les molécules : (i) CCl<sub>4</sub>, (ii) PCl<sub>5</sub>, (iii) SeF<sub>4</sub>, (iv) SiCl<sub>4</sub>

(c) Dessinez la structure de Lewis pour toutes les molécules.

(d) Quelle(s) molécule(s) dans l'énoncé 5(a) a(ont) un moment dipolaire ( $\mu$ )?

**11. Pour la molécule HCN :**

(a) Déterminez la meilleure structure de Lewis parmi les différentes possibilités et de montrer la preuve.

(b) Calculez la charge partielle pour chaque atome dans la structure que vous avez trouvé la meilleure dans l'énoncé 11(a).

(c) Estimer la longueur de chaque liaison (en unités de m) par les rayons covalent ou ionique.

(d) Calculez le moment d'inertie (I) en unités de kg·m<sup>2</sup>

(e) En unités de fréquence (s<sup>-1</sup>), calculer la séparation des deux bandes d'absorption qui correspond à des transitions rotationnelles.

(f) Si l'énergie entre les niveaux rotationnels 0 et 1 est 6,65 x 10<sup>-4</sup> eV, quelle sera la longueur de la liaison réelle (en unités de m)?