

Denis Morency

De: no-reply@www.usherbrooke.ca
Envoyé: 10 avril 2015 11:03
À: Sciences-CentreImpression@USherbrooke.ca
Objet: COMMANDE EXAMENS
Pièces jointes: CPH 504-avril 2015.docx

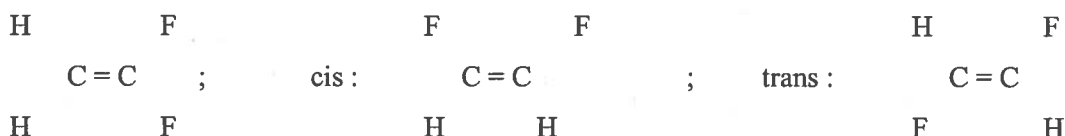
TYPE-EXAMEN	FINAL
SIGLE-COURS	CPH504
TITRE-COURS	Spectroscopie
PROFESSEUR	Andre D. Bandrauk
DATE-HEURE	20 avril, 9 h 00
AUTORISE-PAR	
NOMBRE-PAGES	2
NOMBRE-COPIE-PROF	282
IMPRESSION-QUESTIONNAIRE	Recto broché
NOMBRE-FEUILLES-BLANCHES	2
NOMBRE-PAPIER-GRAPHIQUE	
NOMBRE-CAHIERS	282
CONSENTEMENT-AGES	1
REMARQUES	Michael Jensen ira chercher les copies le matin de l'examen.
E-MAIL	
FIRST-NAME	
LAST-NAME	
NICK-NAME	
SPAMSHIELD	true

Professeur : Andre D. Bandrauk
Local : D3-2038

Date : Lundi 20 avril 2013
Heure : 9 h à 12 h

Question 1 – 25 pts

$C_2H_2F_2$ existe sous trois formes



- Identifiez le groupe de symétrie de chaque molécule.
- Identifiez les opérations (éléments) de symétrie de chaque groupe.
- Quelle molécule possède un moment dipolaire ?
- Quelles vibrations dans chaque molécule seraient actives en IR et pourquoi?
- Quelles vibrations seraient actives en Raman et pourquoi?

Question 2 – 25 pts

Molécule FH_2

- En vous servant des recouvrements \oplus ou \ominus des orbitales atomiques 2s, 2px, 2py, 2pz de F et 1s de H, dessinez les orbitales moléculaires de cette molécule pour les géométries
 - Linéaire
 - nonlinéaire
- Démontrez qualitativement l'évolution de l'énergie de chaque orbitale en passant de linéaire à nonlinéaire en vous servant des recouvrements.
- Quelle géométrie est la plus stable en énergie d'après l'ordre des orbitales.

Question 3 – 25 pts

Confirmez et prouvez par des arguments basés sur les principes de la mécanique quantique les observations suivantes :

- L'atome C est souvent hybridisé mais pas H dans les molécules.
- La liaison du dimère de Tungsten W_2 est sextuple.
- H_2O en forme ortho est magnétique mais pas en forme para.
- Les deux liaisons extrêmes du butadiène sont plus courtes que la liaison centrale.
- Le terme spectroscopique de l'état fondamental du Neodymium $Nd(Z=60)$ est 5I_4 .
(Informations supplémentaires à la fin)

Question 4 – 25 pts

Benzène

- Dessinez les orbitales moléculaires π du benzène et attribuez leur symétrie en g ou u et établissez l'ordre d'énergie en comparant avec l'électron dans une boîte.
- Expliquez pourquoi le cation benzène⁺ n'est pas planaire et suggérez les nouvelles géométries.
- Quelle serait le spin total du double cation benzène⁺⁺, justifiez la réponse.
- Est-ce que d'après les symétries g et u, une absorption électronique est permise entre la HOMO et la LUMO? Justifiez votre réponse.

Informations

H (1s), C (1s² 2s² 2p²), W (5d⁴ 6s²), Nd (4f⁴ 5s² 5p⁶ 6s²)

H

Butadiène : H₂C = C – C = CH₂, H(I = ½), F (1s² 2s² 2p⁵)

H

Benzène : C₆H₆