

## CH-110 Chimie Générale Avancée I

## Atomistique

## Examen Blanc

Vendredi, 24 novembre 2025, 11h15 – 12h00

*Ceci sont les conditions de l'examen final de janvier. Elles sont indiquées ici afin que vous puissiez vous y référer et vous préparer correctement pour l'examen réel*

- Tous les documents nécessaires vous sont fournis.
- Les sacs doivent être fermés et déposés sous votre table avec vos affaires personnelles.
- Les ordinateurs, les traducteurs électroniques, les calculatrices programmables et les smartphones sont interdits.
- Les candidats doivent déposer un **document d'identité** comportant une photographie en évidence sur la table. Ils devront signer une feuille de présence en rendant leur examen.
- Prière de ne pas rédiger vos réponses au crayon à papier.
- Merci de donner vos réponses sur les feuilles prévues à cet effet dans ce document. Il est autorisé de mettre une partie de la réponse sur la question elle-même. Des feuilles de brouillons seront mises à disposition. Si les feuilles de brouillon sont rendues avec l'examen, leur contenu sera considéré comme réponse à part entière.
- Prière de rendre ce document séparément de l'examen du Prof. Waser.
- Durée de l'examen : 3.5 h (pour les deux parties), sauf exceptions validées par le SAC.
- Les dessins/explications illisibles seront considérées comme fausses. Si vous vous rendez compte qu'une partie de votre réponse est incorrecte, vous devez impérativement la tracer et écrire "FAUX" à côté. Cette partie ne sera alors pas considérée.
- **N'oubliez pas les unités** lorsqu'une réponse numérique est requise.
- La partie atomistique compte pour **2/3 de la partie atomistique** et **8/27 de la note finale de chimie générale avancée I**. 35 points sont possibles à la partie atomistique de l'examen.
- A la fin de l'examen: Merci de contrôler avoir mis votre nom en première page, rester à votre place, donner les deux parties séparément à l'assistant et signer pour confirmer.

Matériel autorisé

- Calculatrice non programmable.
- Un tableau périodique sera fourni.
- Un formulaire qui vous sera fourni.

---

NOM : .....

Prénom : .....

N° Place : .....

---

**Attention:** Cet examen blanc prend plus de 45 minutes. Il représente environ les deux tiers de la durée de l'examen final d'atomistique, et devrait donc pouvoir être terminé en 1 h à 1 h 30.

## Exercice 1

**Français:** Vous travaillez dans un laboratoire qui étudie les propriétés de nanomatériaux semiconducteurs. Dans le cadre de votre recherche, vous devez synthétiser des nanocristaux de CdSe par la réaction de CdO avec Se dans des solutions à haute température.

- (a) Écrivez les configurations électroniques à l'état fondamental de Cd et Se. Vous pouvez utiliser la notation abrégée des gaz nobles pour indiquer les électrons de la couche interne.
- (b) Quel élément a
  - 1) La plus haute énergie d'ionisation ?
  - 2) La plus grande affinité électronique ?
  - 3) Le plus grand rayon atomique ?
 Expliquez brièvement votre raisonnement.
- (c) Le CdSe peut être considéré comme un composé ionique binaire. D'après les affinités électroniques des deux éléments, lequel est le plus susceptible de former un anion dans ce composé ? Et lequel est le plus susceptible de former un cation ? Prédisez la charge des ions que chaque élément est susceptible de former et expliquez pourquoi. Écrivez les configurations électroniques à l'état fondamental de ces ions.
- (d) Un échantillon du matériau que vous avez préparé émet une lumière à 546 nm lorsqu'il est excité par un rayonnement UV. Un électron dans un nanocristal peut être considéré comme un électron piégé dans une boîte unidimensionnelle, et la lumière émise est due à une transition électronique du niveau d'énergie  $n = 2$  au niveau d'énergie  $n = 1$ . Quel est le diamètre des nanocristaux dans l'échantillon ? La masse effective d'un électron  $m_e^*$  dans le CdSe est d'environ  $8.20 \times 10^{-32}$  kg.
- (e) Quelle est la longueur d'onde de la radiation nécessaire pour exciter un électron dans ces nanocristaux du niveau d'énergie  $n = 1$  au niveau d'énergie  $n = 3$  ?

**English:** You are working in a laboratory investigating the properties of semiconductor nanomaterials. In your research, you must synthesize CdSe nanocrystals by the reaction of CdO with Se in high-temperature solutions.

- (a) Write the ground-state electron configurations of Cd and Se. You may use noble-gas shorthand notation to abbreviate the inner-shell electrons.
- (b) Which element has
  - 1) The higher ionization energy?
  - 2) The greater electron affinity?
  - 3) The larger atomic radius?
 Briefly explain your reasoning.
- (c) CdSe can be considered a binary ionic compound. Based on the electron affinities of the two elements, which one is more likely to form an anion in this compound? And which is more to form a cation? Predict the charge on the ions each element is likely to form and explain why. Write the ground-state electron configurations for these ions.
- (d) A sample of the material you prepared was found to emit light at 546 nm when it is excited with UV radiation. An electron in a nanocrystal can be treated as an electron trapped in a one-dimensional box, and the emitted light is due to an electronic transition from the  $n = 2$  to the  $n = 1$  energy level. What is the diameter of the nanocrystals in the sample? The effective mass of an electron  $m_e^*$  in CdSe is  $\sim 8.20 \times 10^{-32}$  kg.
- (e) What is the wavelength of radiation required to excite an electron in the nanocrystals from energy level  $n = 1$  to energy level  $n = 3$ ?

## Solution:

- (a) Cd: [Kr] 4d<sup>10</sup> 5s<sup>2</sup>  
Se: [Ar] 3d<sup>10</sup> 4s<sup>2</sup> 4p<sup>4</sup>
- (b) The element with:
- 1) Highest ionization energy: **Se** (trend indicates increase of ionization energy as we move from left to right across a period and up a group)
  - 2) Greater electron affinity: **Se** (trend indicates increase of electron affinity as we move from left to right across a period and up a group)
  - 3) Larger atomic radius: **Cd** (trend indicates increase of atomic radius as we move from right to left across a period and down a group)
- (c) Given that Se has a greater electron affinity than Cd, it will “pull” electrons from Cd, thus forming an anion. Inversely, Cd will form a cation. In order to have exclusively full valence shells, and thus achieve a stable configuration, Se will want to “pull” 2 electrons and Cd will want to give up 2 electrons. Therefore, we have **Se<sup>2-</sup>** and **Cd<sup>2+</sup>**. The electron configurations of the ions will then be  
Cd<sup>2+</sup>: [Kr] 4d<sup>10</sup> (**reminder: a d-block atom first loses its s-electrons when forming a cation**)  
Se<sup>2-</sup>: [Ar] 3d<sup>10</sup> 4s<sup>2</sup> 4p<sup>6</sup> = [Kr]
- (d) For a one-dimensional box, the energy levels are

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8m_e * L^2}$$

Given that the energy level is proportional to n, level n = 2 will have a higher energy than level n = 1. Therefore, when transitioning from energy level n = 2 to energy level n = 1, the difference in energy given by

$$\Delta E = E_2 - E_1 = \frac{(n_2^2 - n_1^2)h^2}{8m_e * L^2} = \frac{(4 - 1)h^2}{8m_e * L^2} = \frac{3h^2}{8m_e * L^2}$$

will be emitted in the form of light, more specifically a photon whose energy can be written using Planck’s equation:

$$E_{\text{photon}} = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

As such, we can write

$$\frac{3h^2}{8m_e * L^2} = \frac{hc}{\lambda}$$

Solving for L, we have

$$L = \sqrt{\frac{3h\lambda}{8m_e * c}}$$

Replacing by the numerical values ( $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ m}^2 \text{ kg s}^{-1}$ ,  $\lambda = 546 \text{ nm} = 5.46 \times 10^{-7} \text{ m}$ ,  $m_e^* = 8.20 \times 10^{-32} \text{ kg}$ ,  $c = 3 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$ ) we can thus find the diameter  $L$  of the nanocrystals, which is  $2.35 \times 10^{-9} \text{ m} = \mathbf{2.35 \text{ nm}}$ .

(e) Using the same reasoning as before, the difference in energy between energy level  $n = 3$  and  $n = 1$  is given by

$$\Delta E = E_3 - E_1 = \frac{(n_3^2 - n_1^2)h^2}{8m_e^*L^2} = \frac{(9 - 1)h^2}{8m_e^*L^2} = \frac{8h^2}{8m_e^*L^2} = \frac{h^2}{m_e^*L^2}$$

And thus

$$\frac{h^2}{m_e^*L^2} = \frac{hc}{\lambda}$$

Solving for  $\lambda$ , we have

$$\lambda = \frac{m_e^*cL^2}{h}$$

Replacing by the numerical values ( $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ m}^2 \text{ kg s}^{-1}$ ,  $m_e^* = 8.20 \times 10^{-32} \text{ kg}$ ,  $c = 3 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$ ,  $L = 2.35 \times 10^{-9} \text{ m}$ ), we can find the wavelength needed to excite this transition, which is  $2.05 \times 10^{-7} \text{ m} = \mathbf{205 \text{ nm}}$ , which corresponds to UV light.

## Exercise 2

**Français:** Le peroxyde d'hydrogène,  $\text{H}_2\text{O}_2$ , est un agent blanchissant non toxique utilisé en remplacement du chlore dans l'industrie et les blanchisseries domestiques. Le processus de blanchiment est une oxydation, et lorsque le peroxyde d'hydrogène agit comme agent blanchissant, le seul déchet qu'il génère est du  $\text{H}_2\text{O}$ .

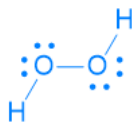
- Dessinez la structure de Lewis du peroxyde d'hydrogène et déterminez la charge formelle sur chaque atome.
- Donnez la forme VSEPR (nom et formule AXE) des atomes d'oxygène dans  $\text{H}_2\text{O}_2$ .
- Est-ce que l'angle de la liaison H-O-O est : (I) exactement  $120^\circ$  ; (II)  $> 109.5^\circ$  ; (III) exactement  $109.5^\circ$  ; (IV)  $< 109.5^\circ$  ?
- Dessinez le diagramme des orbitales moléculaires de 1)  $\text{O}_2$ ; 2)  $\text{O}_2^-$ ; 3)  $\text{O}_2^+$ ; 4)  $\text{O}_2^{2-}$ . Pour chaque espèce, indiquez l'ordre de liaison attendu et précisez lesquelles (s'il y en a) sont paramagnétiques.
- Les longueurs de liaison suivantes ont été rapportées : 1)  $\text{O}_2$ , 121 pm; 2)  $\text{O}_2^-$ , 134 pm; 3)  $\text{O}_2^+$ , 112 pm; 4)  $\text{O}_2^{2-}$ , 149 pm. Suggérez une raison pour expliquer ces différences en vous basant sur les configurations de la partie (c).

**English:** Hydrogen peroxide,  $\text{H}_2\text{O}_2$ , is a nontoxic bleaching agent being used as a replacement for chlorine in industry and home laundries. The bleaching process is an oxidation, and when hydrogen peroxide acts as a bleaching agent, the only waste it generates is  $\text{H}_2\text{O}$ .

- Draw the Lewis structure of hydrogen peroxide and determine the formal charge on each atom.
- Give the VSEPR shape (name and AXE formula) of the O atoms in  $\text{H}_2\text{O}_2$ .
- Is the H-O-O bond angle: (I) exactly  $120^\circ$ ; (II)  $> 109.5^\circ$ ; (III) exactly  $109.5^\circ$ ; (IV)  $< 109.5^\circ$ ?
- Draw the molecular orbital diagram of 1)  $\text{O}_2$ ; 2)  $\text{O}_2^-$ ; 3)  $\text{O}_2^+$ ; 4)  $\text{O}_2^{2-}$ . For each species, give the expected bond order and indicate which, if any, are paramagnetic.
- The following bond lengths have been reported: 1)  $\text{O}_2$ , 121 pm; 2)  $\text{O}_2^-$ , 134 pm; 3)  $\text{O}_2^+$ , 112 pm; 4)  $\text{O}_2^{2-}$ , 149 pm. Suggest a reason for the differences based of the configurations in part (c).

**Solution:**

(a)

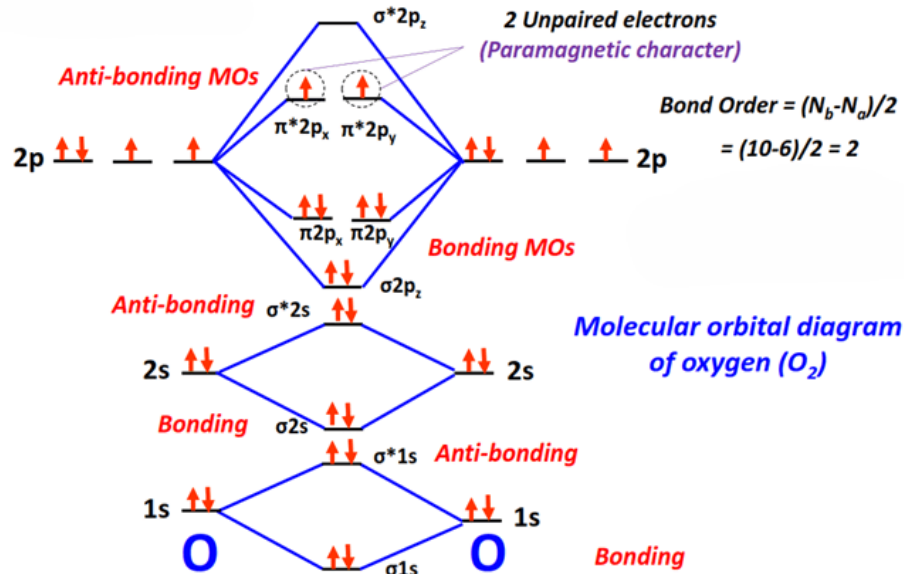


The formal charge corresponds to the hypothetical charge an atom would have if the electrons in a chemical bond were equally shared between the two atoms involved in the bond. It can be obtained by summing the electrons in an atom coming from its lone pairs and half the electrons from the chemical bonds it makes, and subtracting that value from the valence electrons of the free atom. By applying this reasoning, one can easily see that all atoms in  $\text{H}_2\text{O}_2$  have a **formal charge of 0**.

- Each O atom has a **bent** shape, given in the AXE form as  **$\text{AX}_2\text{E}_2$** .
- The correct answer is **(IV)  $< 109.5^\circ$** . Oxygen has two bonding electron pairs and two lone pairs. Therefore, the electron geometry around O is tetrahedral, which should give an angle of exactly  $109.5^\circ$  between the atoms. However, the two lone pairs of the oxygen will repel each other more strongly than the bonding pairs (**repulsion**

lone pair – lone pair > repulsion lone pair – bonding pair > repulsion bonding pair – bonding pair as seen in class). This will then push the H-O and O-O bonds closer together, making the H-O-O bond angle smaller than 109.5°.

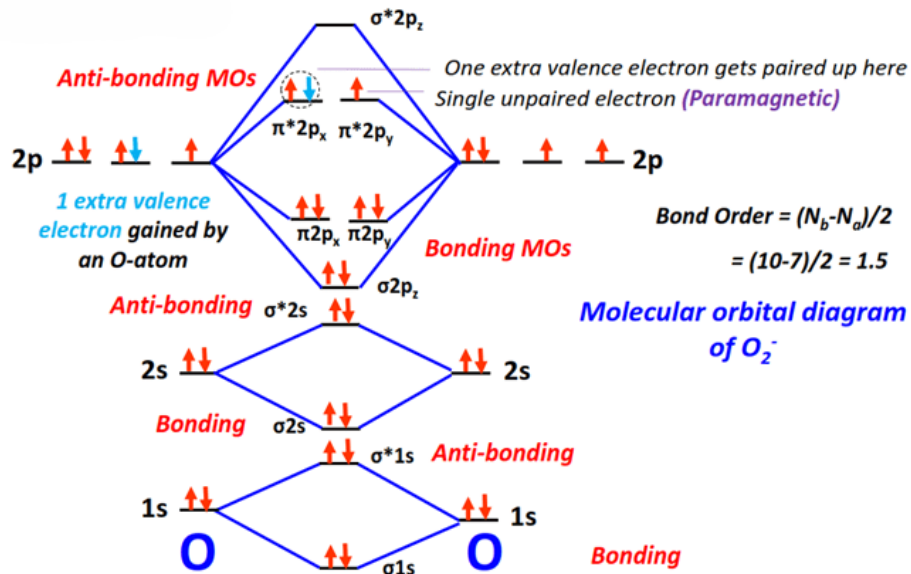
(d) Molecular orbital diagram of O<sub>2</sub>:



$$\text{Bond order} = \frac{\# \text{bonding electrons} - \# \text{antibonding electrons}}{2} = \frac{10 - 6}{2} = 2$$

Since O<sub>2</sub> has unpaired electrons, it is **paramagnetic**.

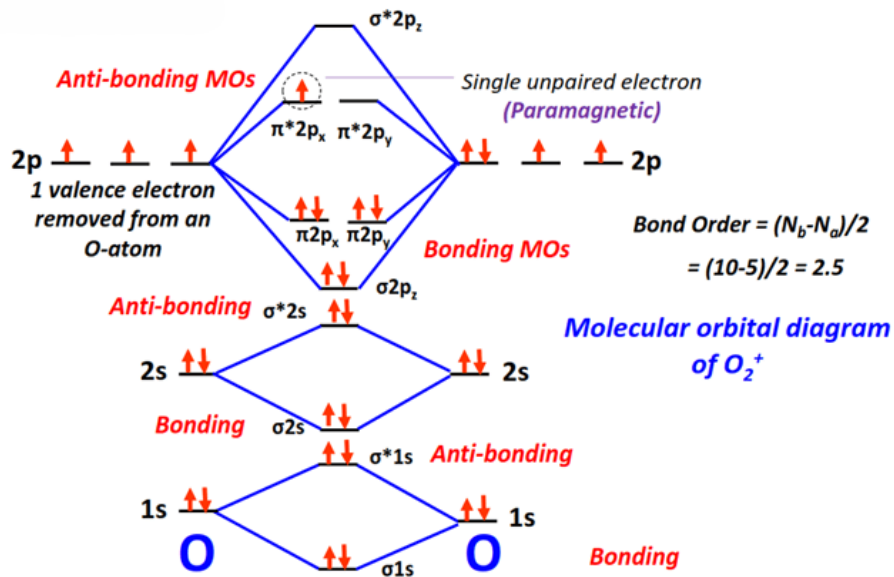
Molecular orbital of O<sub>2</sub><sup>-</sup>:



$$\text{Bond order} = \frac{10 - 7}{2} = 1.5$$

Since O<sub>2</sub><sup>-</sup> has an unpaired electron, it is **paramagnetic**.

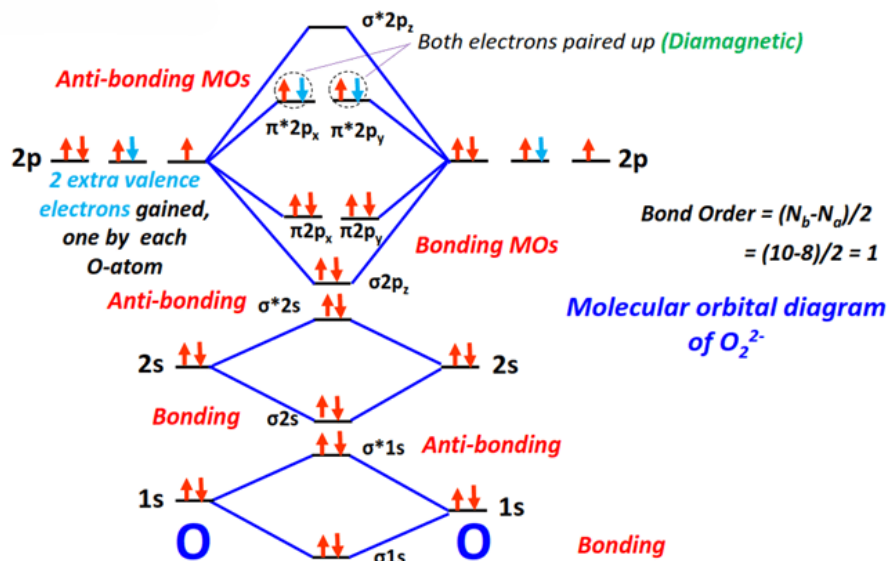
Molecular orbital of  $O_2^+$ :



$$\text{Bond order} = \frac{10-5}{2} = 2.5$$

Since  $O_2^+$  has an unpaired electron, it is **paramagnetic**.

Molecular orbital of  $O_2^{2-}$ :



$$\text{Bond order} = \frac{10-8}{2} = 1$$

Since there are no unpaired electrons in  $O_2^{2-}$ , it is **diamagnetic**.

- (e) A higher bond order means that more electrons are involved in the bonding between two atoms, leading to a higher bond strength. As the strength of the bond increases, the atoms are pulled more closely to one another, therefore shortening the length of the bond. As such, the **bond length trend** that we obtain in this case is  $O_2^+ < O_2 < O_2^- < O_2^{2-}$ , which correlates well with the reported bond lengths.

## Exercise 3

**Français:** Le carbone a une valence de 4 dans presque tous ses composés et peut former des chaînes et des cycles d'atomes de carbone.

- Dessinez les trois structures possibles du  $C_3H_4$  (l'une des structures possibles est cyclique).
- Estimez les angles de liaison dans chacune des structures non cycliques. Évaluez les longueurs de liaison entre les atomes de carbone dans chaque structure (y a-t-il une liaison C-C plus longue que les autres liaisons C-C ?).
- Identifiez l'hybridation de chaque atome de carbone dans chaque structure.

*Remarque :* Assurez-vous qu'aucune des trois structures que vous avez dessinées n'est une structure de résonance d'une autre.

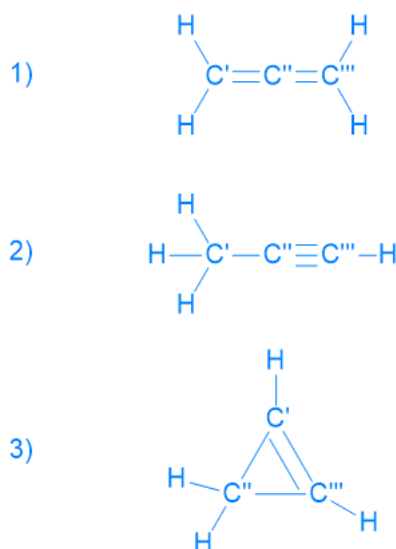
**English:** Carbon has a valency of 4 in nearly all its compounds and can form chains and rings of C atoms.

- Draw the three possible structures of  $C_3H_4$  (one of the possible structures is cyclic).
- Estimate bond angles in each of the non-cyclic structures. Evaluate bond lengths between C atoms in each structure (is there a C-C bond that is longer than the other C-C bonds?).
- Identify the hybridization of each carbon atom in each structure.

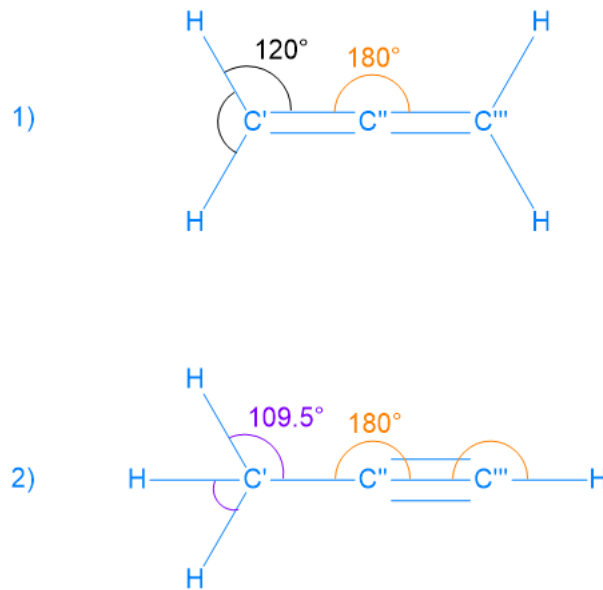
*Note:* Ensure that none of the three structures you drew are resonance structures of each other.

### Solution:

- The three structures are:



(b) The bond angles are as follows:



In terms of bonds lengths, the following relation is applicable: **single bond > double bond > triple bond**. Therefore, for structure 1), the C-C bonds should have the same length (two double bonds). For structure 2), the bond between C'' and C''' is shorter than the one between C' and C''. For structure 3), the bond between C' and C'' is shorter than the bonds between C'' + C'' and C'''.

- (c) Structure 1): C' → sp<sup>2</sup>, C'' → sp, C''' → sp<sup>2</sup>  
 Structure 2): C' → sp<sup>3</sup>, C'' → sp, C''' → sp  
 Structure 3): C' → sp<sup>2</sup>, C'' → sp<sup>3</sup>, C''' → sp<sup>2</sup>