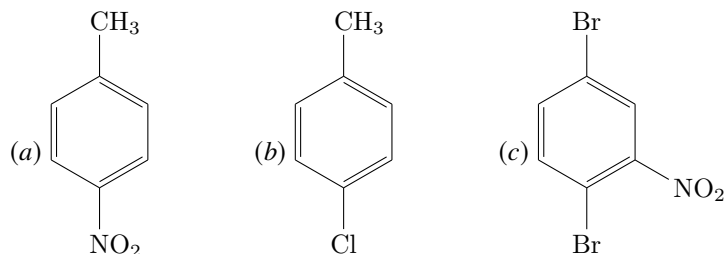


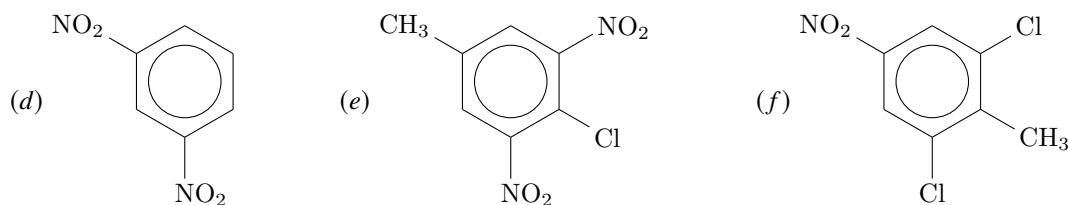
PHY2301P - Molécules et Cristaux - TD 2

Exercice 1 : Moments dipolaires électriques

Les moments dipolaires du (a) 4-nitrotoluène, du (b) 4-chlorotoluène et du (c) 1,4-dibromo-2-nitro-benzène valent respectivement 4,7 D ; 2,4 D et 4,3 D. On supposera que les liaisons C-H ne contribuent pas au moment dipolaire.



- Déterminer la valeur numérique du moment dipolaire de la liaison C – NO₂ dans le nitrobenzène (C₆H₅NO₂). Préciser son orientation en écrivant les formules mésomères de ce composé.
- En déduire la valeur du moment dipolaire des liaisons C – Cl et C – CH₃ dans CH₃ – C₆H₄ – Cl et C₆H₅ – CH₃.
- Calculer le moment dipolaire des molécules suivantes : (d) 1,3-dinitrobenzène, (e) 2-chloro-5-methyl-1,3-dinitrobenzène, et (f) 1,3-dichloro-2-methyl-5-nitrobenzène



Données : Dans le toluène (C₆H₅CH₃), le groupe CH₃ constitue le pôle + du dipôle, alors que dans le chlorobenzène (C₆H₅Cl) et le nitrobenzène (C₆H₅NO₂), le pôle – est sur le chlore Cl ou le groupement nitro NO₂.

Exercice 2 : Autour du sélénium

Du grec "selene", la lune, le sélénium Se a été découvert en 1817. Le sélénium est un oligoélément important chez l'être humain.

1. Donner la structure électronique du sélénium (Se, $Z = 34$) dans son état fondamental. Quels sont les électrons de valence de cet atome ? Donner le schéma de Lewis de l'atome de sélénium.
2. Citer 2 éléments possédant une couche de valence similaire. Donner la configuration électronique fondamentale de chacun de ces éléments.
3. Le sélénium est susceptible de former le chlorure de sélénium SeCl_2 . Donner le schéma de Lewis de cette molécule, ainsi que sa géométrie. Indiquer les valeurs des angles de liaison en les comparant à la valeur théorique.
4. Le sélénium peut s'oxyder en dioxyde SeO_2 et trioxyde de sélénium SeO_3 . Donner le schéma de Lewis de ces molécules et donner leur géométrie. Indiquer les valeurs des angles de liaison en les comparant à la valeur théorique. Peut-on avoir SeO_4 ? Justifier.
5. L'élément tellure (Te, $Z = 52$) est situé dans la même colonne que le sélénium. En déduire sa configuration électronique fondamentale. Comparer l'électronégativité du tellure $\chi(\text{Te})$ avec celle du sélénium $\chi(\text{Se})$.
6. Le sélénium est susceptible de former l'hexafluorure de sélénium SeF_6 . Donner le schéma de Lewis et la géométrie de cette molécule. Peut-on obtenir de même de l'hexafluorure de soufre ? De tellure ? D'oxygène ? Justifier.

Exercice 3 : L'hydrazine N_2H_4

L'hydrazine N_2H_4 est un composé liquide incolore. L'hydrazine a été utilisée comme le premier carburant pour fusées ; elle est aujourd'hui utilisée dans de petits propulseurs de satellites ou de sondes spatiales.

On donne dans le tableau suivant quelques données physico-chimiques relatives à plusieurs espèces chimiques.

Espèce chimique	hydrazine N_2H_4	eau H_2O	éthanol C_2H_5OH	éthane C_2H_6
Température de fusion ($^{\circ}C$)	2	0	-117	-183
Température d'ébullition ($^{\circ}C$)	114	100	79	-89
Moment dipolaire (D)	1,75	1,85	1,66	0

1. Écrire la configuration électronique de l'atome d'azote.
2. Établir le schéma de Lewis de l'hydrazine sachant qu'il y a une liaison $N - N$.
3. En utilisant la méthode VSEPR, donner un ordre de grandeur pour les angles \widehat{HNH} .
4. On peut proposer deux isomères de conformation, illustrés dans la Figure 1. Lequel est en accord avec l'existence d'un moment dipolaire ? Justifier.

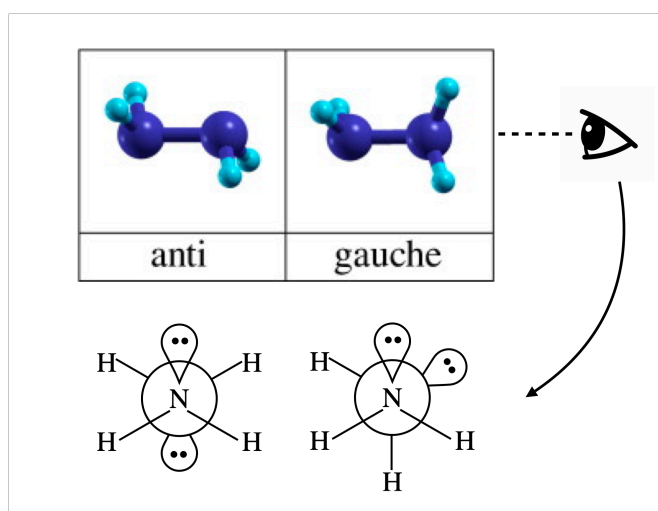


FIGURE 1 – Représentation tridimensionnelle de deux isomères de conformation de N_2H_4

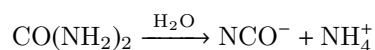
5. Comment expliquer la valeur élevée des températures de fusion et d'ébullition de l'hydrazine ?
6. L'hydrazine liquide est-elle très miscible ou peu miscible avec l'eau ? Justifier.

Exercice 4 : L'urée $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$

L'urée est un composé organique de formule $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$. L'urée est très soluble dans l'eau pour une solubilité de $545 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$ à 25°C .

1. Proposer une structure de Lewis de l'urée avec C étant l'atome central.
2. Proposer une autre formule mésomère de l'urée. Déterminer laquelle est la plus satisfaisante.
3. Prévoir la géométrie autour du carbone. Préciser la valeur approximative de l'angle $\widehat{\text{NCN}}$.
4. La molécule est-elle polaire ? Si oui, représenter le moment dipolaire sur la molécule.
5. Expliquer la bonne solubilité de l'urée dans l'eau.

L'urée se dissout dans l'eau chaude selon le mécanisme global :



6. Donner deux formules mésomères de l'ion cyanate NCO^- , les atomes étant liés dans cet ordre. Ces formules devront satisfaire la règle de l'octet. Déterminer laquelle est la plus probable.