

Série de TD N°7

**Exercice 1.**

1. On considère les molécules suivantes :  $\text{BF}_3$  ;  $\text{CO}_2$  ;  $\text{CH}_4$  ;  $\text{C}_2\text{H}_4$  et  $\text{C}_2\text{H}_2$ . Préciser les états d'hybridation des atomes de carbone et de bore.
2. Donner le diagramme énergétique des orbitales moléculaire de  $\text{CH}_4$  ;  $\text{C}_2\text{H}_4$  et  $\text{C}_2\text{H}_2$ .

**Exercice 2.**

Donner la structure électronique du béryllium Be ( $Z=4$ ) dans son état fondamental et dans son premier état excité.

1. Représenter l'aspect spatial des orbitales atomiques de couche de valence.
2. On connaît la structure de la molécule de  $\text{BeH}_2$  : les deux liaisons Be-H ont la même énergie. Comment justifier cette observation ?
3. Quel est le type des liaisons formées ?
4. Quelle est la géométrie de la molécule ?

**Exercice3.**

L'ion ammonium  $\text{NH}_4^+$  a une structure tétraédrique avec des angles de liaisons de  $109^\circ 28'$  environ.

1. Quel est l'état d'hybridation de l'azote dans ce cation ?
2. Construire le diagramme énergétique de  $\text{NH}_4^+$  sachant que les énergies moyennes 1s de l'hydrogène, 2s et 2p de l'azote sont respectivement  $-13,6\text{eV}$ ,  $-25,5\text{eV}$  et  $-13,1\text{eV}$ .
3. Donner la disposition spatiale des liaisons dans  $\text{NH}_4^+$  (schéma de recouvrement des orbitales).

**Exercice 4.**

La molécule de butadiène  $\text{CH}_2 = \text{CH}-\text{CH} = \text{CH}_2$  est plane.

1. Préciser les états d'hybridation des atomes de carbone.
2. Proposer deux formes géométriques du butadiène en respectant les valeurs des angles entre les liaisons.

**Exercice 5.**

On considère la molécule organique suivante :  $\text{CH}_3-\text{CO}-\text{CH} = \text{CH}-\text{CN}$

1. Donner la forme développée de cette molécule en précisant les valeurs des angles de liaisons.
2. Préciser les états d'hybridation des atomes de carbone.
3. Préciser les atomes qui se trouvent dans le même plan.

**Exercice 6.**

On considère les molécules :  $\text{C}_2\text{H}_2$  ;  $\text{N}_2\text{H}_2$  ;  $\text{H}_2\text{O}_2$

Donner l'état d'hybridation des atomes C, N, O dans ces trois molécules ainsi que le nombre, la nature des liaisons et le nombre de doublets libres dans chacune d'elles.

## TD Series N°7

### Exercise 1.

1. Consider the following molecules:  $\text{BF}_3$ ;  $\text{CO}_2$ ;  $\text{CH}_4$ ;  $\text{C}_2\text{H}_4$  and  $\text{C}_2\text{H}_2$ . Specify the hybridization states of the carbon and boron atoms.
2. Give the energy diagram of the molecular orbitals of  $\text{CH}_4$ ;  $\text{C}_2\text{H}_4$  and  $\text{C}_2\text{H}_2$ .

### Exercise 2.

Give the electronic structure of beryllium Be ( $Z=4$ ) in its ground state and in its first excited state.

1. Show the spatial aspect of valence-layer atomic orbitals.
2. The structure of the  $\text{BeH}_2$  molecule is known: the two Be-H bonds have the same energy. How can you justify this observation?
3. What type of bonds are formed?
4. What is the geometry of the molecule?

### Exercise 3.

The ammonium ion  $\text{NH}_4^+$  has a tetrahedral structure with bond angles of around  $109^\circ 28'$ .

1. What is the hybridization state of the nitrogen in this cation?
2. Construct the energy diagram of  $\text{NH}_4^+$ , knowing that the mean energies 1s of hydrogen, 2s and 2p of nitrogen are -13.6eV, -25.5eV and -13.1eV respectively.
3. Give the spatial arrangement of the bonds in  $\text{NH}_4^+$  (orbital overlap diagram).

### Exercise 4.

The butadiene molecule  $\text{CH}_2 = \text{CH}-\text{CH} = \text{CH}_2$  is planar.

1. Specify the hybridization states of the carbon atoms.
2. Propose two geometric shapes for butadiene, respecting the values of the angles between the bonds.

### Exercise 5.

Consider the following organic molecule:  $\text{CH}_3-\text{CO}-\text{CH} = \text{CH}-\text{CN}$

1. Give the structural form of this molecule, specifying the values of the bond angles.
2. Specify the hybridization states of the carbon atoms.
3. Specify which atoms are in the same plane.

### Exercise 6.

Consider the following molecules:  $\text{C}_2\text{H}_2$ ;  $\text{N}_2\text{H}_2$ ;  $\text{H}_2\text{O}_2$  Give the hybridization states of the C, N and O atoms in these three molecules, as well as the number and nature of the bonds and the number of free doublets in each.