

LE PYRROLE

Données :

Formule empirique de calcul des rayons de covalence :

$$R (A^\circ) = 0,215 n^2/Z^* + 0,148 n + 0,225 \quad (\text{pour H on prendra } R = 0,346 A^\circ)$$

Formule empirique de calcul des longueurs de liaisons :

$$d_{A-B} (A^\circ) = 1,11 (R_A + R_B) - 0,203$$

$$\text{double} = 0,86 * \text{simple} \quad \text{et} \quad \text{triple} = 0,78 * \text{simple}$$

Energies de dissociation des liaisons :

<i>CC simple</i>	<i>CC double</i>	<i>CH</i>	<i>CN simple</i>	<i>NH</i>	<i>NN triple</i>
348	615	413	292	391	945

Enthalpie standard de formation à 298 K :

$$\text{CO}_2(\text{g}) : \Delta_f H_{298}^0 = -393 \text{ kJ.mol}^{-1}$$

$$\text{H}_2\text{O}(\text{l}) : \Delta_f H_{298}^0 = -286 \text{ kJ.mol}^{-1}$$

Enthalpie standard de vaporisation à 298 K :

$$\text{C}(\text{s, graphite}) : \Delta_{\text{vap}} H_{298}^0 = 718 \text{ kJ.mol}^{-1}$$

$$\text{pyrrole} : \Delta_{\text{vap}} H_{298}^0 = 45 \text{ kJ.mol}^{-1}$$

$$\text{Enthalpie standard de combustion du pyrrole liquide} : \Delta_{\text{comb}} H_{298}^0 = -2351 \text{ kJ.mol}^{-1}$$

ENNONCE :

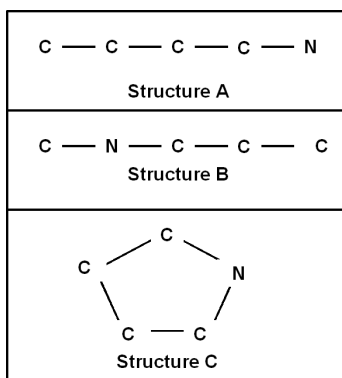
Le pyrrole est un composé organique liquide à température ambiante, contenant en pourcentage massique :

71,6 % de carbone

7,46% d'hydrogène

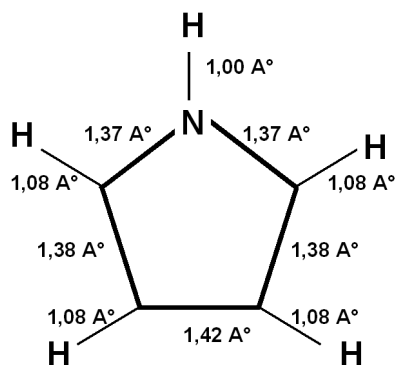
1) Quelle est sa formule brute ?

On propose les enchaînements suivants :*



- 2) Completez les schémas de Lewis correspondant à ces trois structures.
- 3) Donnez l'état d'hybridation de chaque atome.
- 4) Prévoir les longueurs de liaison pour chaque structure A,B et C.

La molécule de pyrrole correspond en fait à la structure C et présente les longueurs de liaisons expérimentales données dans le schéma suivant.



- 5) Comparez les longueurs expérimentales aux longueurs prévues par le calcul.
- 6) Expliquez les différences observées.
- 7) Proposez une structure pour l'hybride de résonance.
- 8) Donner l'état d'hybridation de chaque atome pour l'hybride de résonance.
- 9) Evaluer l'énergie de résonance du pyrrole.