



Activités de la séquence n° 1

De la structure spatiale des espèces chimiques à leurs propriétés physiques



Fiches de synthèse mobilisées :

Fiches n° :

- 1a : Structure des molécules et des ions (Activités 1 – 4) ;
- 1b : Cohésion de la matière (Activité 5) ;
- 1c : Formules chimiques et isomérie de constitution (Activités 6 – 8) ;
- 1d : Isomérie spatiale (Activités 9 – 12).



Sommaire des activités

ACTIVITÉ 1 :	Électrons de valence et propriétés chimiques	2
ACTIVITÉ 2 :	Lorsque les paires d'électrons vont de pair avec Lewis !	3
ACTIVITÉ 3 :	Quand les paires d'électrons se repoussent	4
ACTIVITÉ 4 :	Un pas vers la mésomérie	6
ACTIVITÉ 5 :	Polaire ou apolaire ?	7
ACTIVITÉ 6 :	L'odeur du pain	8
ACTIVITÉ 7 :	Un problème d'étiquetage	11
ACTIVITÉ 8 :	L'odeur, une question de chimie !	13
ACTIVITÉ 9 :	Représentation de Cram	15
ACTIVITÉ 10 :	Une histoire de rotation	16
ACTIVITÉ 11 :	Des molécules à première vue identiques... ..	17
ACTIVITÉ 12 :	Isomérie et médicaments (un pas vers la Terminale...)	18



ACTIVITÉ 1 : Électrons de valence et propriétés chimiques

DOCUMENT 1 : Établir une configuration électronique (Rappels)

Les électrons sont répartis dans des couches électroniques, elles-mêmes constituées de sous-couches.

- La première couche électronique, caractérisée par le nombre $n = 1$, est constituée d'1 unique sous-couche : 1s ;
 - La deuxième couche électronique, caractérisée par le nombre $n = 2$, est constituée de 2 sous-couches : 2s et 2p ;
 - La troisième couche électronique, caractérisée par le nombre $n = 3$, est constituée de 3 sous-couches : 3s, 3p et 3d.
- Les sous-couches de type s (1s, 2s, 3s) peuvent accueillir au maximum 2 électrons et les sous-couches de type p (2p, 3p) 6 électrons. Le nombre d'électrons dans une sous-couche électronique est indiqué en exposant.

La répartition des électrons dans les sous-couches électroniques est appelée configuration électronique. L'ordre de remplissage est le suivant : $1s \rightarrow 2s \rightarrow 2p \rightarrow 3s \rightarrow 3p$.

DOCUMENT 2 : Électrons de valence et pliage quantique

Dans un atome, les électrons se répartissent dans des zones privilégiées de l'espace que l'on nomme orbitales.



Différentes formes d'orbitales (source : [la physique autrement : pliages quantiques](#))

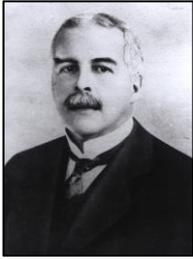
La chimie est gouvernée par des interactions entre orbitales des électrons de valence. Toute liaison covalente résulte d'une combinaison d'orbitales.

Pour les éléments des trois premières périodes de la classification périodique, les électrons de valence correspondent à l'ensemble des électrons de la dernière couche électronique occupée.

1.
 - a. Donner la configuration électronique des atomes suivants : Be ($Z = 4$), N ($Z = 7$) et F ($Z = 9$).
 - b. Indiquer le nombre d'électrons de valence de chacun d'eux.
2. Le magnésium Mg ($Z = 12$) est l'élément qui se trouve juste en-dessous du béryllium Be dans le tableau périodique. Le phosphore P ($Z = 15$) se trouve, quant à lui, juste en-dessous de l'azote N.
 - a. Donner la configuration électronique de ces éléments et indiquer le nombre d'électrons de valence de chacun d'eux.
 - b. Indiquer ce que l'on peut dire du nombre d'électrons de valence de deux éléments situés dans une même colonne du tableau périodique.
 - c. Justifier le fait que deux éléments d'une même colonne possèdent des propriétés chimiques similaires.
3. Soit l'atome de configuration électronique $1s^2 2s^2 2p^4$.
Indiquer où se trouve cet atome dans le tableau périodique. Justifier.



ACTIVITÉ 2 : Lorsque les paires d'électrons vont de pair avec Lewis !



Gilbert Newton Lewis (1875 – 1946) est un chimiste et physicien américain.

Il est connu pour sa théorie du partage d'électrons dans la liaison chimique et pour sa *théorie des acides et des bases*. Il a expliqué plusieurs aspects de la valence des éléments chimiques à l'aide des théories électroniques. En 1904, il proposa la règle de l'octet qui décrit la tendance des atomes des éléments représentatifs à s'entourer de huit électrons de valence. En 1916, il identifia la liaison covalente comme un partage d'électrons entre deux atomes, idée développée aussi par le physico-chimiste américain Irving Langmuir. [...]

Il a été récompensé pour ses travaux et nommé 41 fois pour le prix Nobel de chimie, dont 32 entre 1922 et 1935. Il ne l'a, cependant, jamais obtenu.

Source : https://fr.wikipedia.org/wiki/Gilbert_Lewis

Dans cette activité, on se propose d'étudier le modèle établi par Lewis pour décrire la répartition des électrons de valence de chacun des atomes d'une molécule.

DOCUMENT 1 : Représentation de la structure électronique des atomes

Pour représenter la structure électronique d'un atome :

1. on écrit le symbole de l'atome correspondant ;
2. on fait apparaître autant d'électrons (modélisés par des points) autour de cet atome qu'il possède d'électrons de valence.

Exemple :

Pour représenter la structure électronique de l'atome d'hydrogène, on commence par représenter son symbole et on lui ajoute son unique électron de valence.

Pour l'atome d'oxygène, on représente également son symbole et on l'entoure de ses 6 électrons de valence.

Le nombre d'électrons de valence, s'il n'est pas donné, est obtenu à partir de la configuration électronique de l'atome étudié.

Atomes	H (Z = 1)	C (Z = 6)	N (Z = 7)	O (Z = 8)	F (Z = 9)
Configuration électronique	1s ¹			1s ² 2s ² 2p ⁴	
Nombre d'e ⁻ de valence	1			6	
Représentation de la structure électronique des atomes	H·			·Ö·	

DOCUMENT 2 : Représentation du schéma de Lewis d'une molécule

Pour obtenir le schéma de Lewis d'une molécule :

1. On représente la structure électronique de chacun des atomes de la molécule.
2. Une liaison chimique résulte de la mise en commun de deux électrons de valence de deux atomes distincts et est modélisée par un trait. On forme alors autant de liaisons chimiques qu'il ne le faut pour que l'hydrogène respecte la règle du duet et que, dans la mesure du possible, les autres atomes respectent la règle de l'octet.
3. Les électrons restants sur chaque atome sont ensuite regroupés par deux. Une paire d'électrons ne constituant pas une liaison chimique est également modélisée par un trait, mais cette fois porté par l'atome correspondant.

Exemple de la molécule d'eau :





1. Recopier et compléter le tableau du **document 2** pour les atomes de carbone, d'azote et de fluor.
2. Montrer que les règles du duet et de l'octet sont respectées dans le schéma de Lewis de la molécule d'eau établi dans le **document 3**.
3. Établir les schémas de Lewis des molécules de dihydrogène H₂, de méthane CH₄, d'ammoniac NH₃ et de fluorure d'hydrogène HF.
4. Deux électrons engagés dans une liaison constituent un doublet liant. Deux électrons appariés mais n'intervenant pas dans une liaison constituent un doublet non liant.
Indiquer le nombre de doublets liants et le nombre de doublets non liants dans chacune des molécules précédentes et dans la molécule d'eau.
5. Le dioxyde de carbone CO₂ et le formaldéhyde CH₂O possède tous les deux une ou plusieurs liaisons multiples. Une liaison multiple est une liaison formée par plusieurs doublets liants.
Proposer un schéma de Lewis pour ces deux molécules.

ACTIVITÉ 3 : Quand les paires d'électrons se repoussent

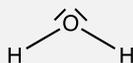
DOCUMENT 1 : Théorie VSEPR

La théorie VSEPR (*Valence Shell Electron Pair Repulsion*, en français « Répulsion des paires électroniques de la couche de valence ») nous permet, à partir du schéma de Lewis d'une molécule, de prédire sa géométrie. Cette théorie se fonde sur le fait que des doublets d'électrons, constitués de charges négatives et donc de même signe, se repoussent.

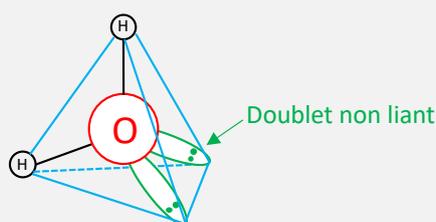
- Ainsi, autour d'un atome, les doublets liants et non liants s'écartent au maximum les uns des autres de façon à minimiser la répulsion entre eux.
- Pour qualifier la géométrie autour d'un atome, on ne regarde cependant que la disposition des atomes qui lui sont directement liés.

Exemple de la molécule d'eau :

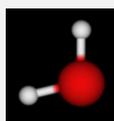
La molécule d'eau possède un atome d'oxygène lié à deux atomes d'hydrogène et porteur de deux doublets non liants :



Ces quatre doublets vont, selon la théorie VSEPR, s'écarter au maximum plaçant ainsi l'oxygène au centre d'un tétraèdre :



Les deux atomes d'hydrogène et l'atome d'oxygène forment alors un « coude », conférant ainsi à la molécule d'eau une géométrie dite **coudée**.



**DOCUMENT 2 : Notation AX_nE_m**

Dans la théorie VSEPR, les molécules simples sont notées sous la forme : AX_nE_m.

La lettre A correspond à l'atome central.

La lettre X correspond aux atomes liés à l'atome central. Leur nombre est donné par la lettre n.

La lettre E fait référence aux doublets non liants portés par l'atome central A. Leur nombre est donné par la lettre m.

Exemple de la molécule d'eau :

Dans la molécule d'eau, l'atome d'oxygène est lié à **2 atomes d'hydrogène** et est porteur de **2 doublets non liants**. La molécule d'eau est alors notée : AX₂E₂.

1. À l'aide du matériel à disposition, construire le modèle moléculaire des molécules suivantes :

- le dioxyde de carbone CO₂ ;
- le borane BH₃ ;
- le nitroxy NHO ;
- le méthane CH₄ ;
- l'ammoniac NH₃.

2. Qualifier la géométrie autour de l'atome central à l'aide de l'un des adjectifs suivants :

Géométrie	Pyramidale	Tétraédrique	Linéaire	Coudée	Trigonal
Représentation					

: centre des figures géométriques

3. À l'aide des schémas de Lewis du dioxyde de carbone et du nitroxy, expliquer comment la théorie VSEPR peut permettre de prévoir la géométrie de ces deux molécules. On indiquera, en particulier, l'angle mesuré entre les liaisons.



4. À l'aide des schémas de Lewis établis dans l'activité 2 et de ceux donnés dans la question 3, déterminer la notation AX_nE_m de chacune des molécules de la question 1.

5. Le sulfure d'hydrogène est un gaz de formule brute H₂S et à l'odeur très nauséabonde.

- Représenter le schéma de Lewis du sulfure d'hydrogène, puis déterminer sa géométrie à l'aide de la théorie VSEPR et sa notation AX_nE_m. Donnée : Z(S) = 16
- Comparer sa géométrie et sa notation AX_nE_m à celles de l'eau. Conclure.
- Recopier et compléter le tableau ci-dessous.

Notation AX _n E _m	Géométrie
AX ₂ E ₀	
AX ₃ E ₀	
AX ₂ E ₁	
AX ₄ E ₀	
AX ₃ E ₁	
AX ₂ E ₂	



Résumer sur une carte mentale les différentes étapes permettant de prévoir la géométrie d'une molécule à partir des numéros atomiques des atomes la constituant. Tout appui sur un ou plusieurs exemples sera valorisé.



ACTIVITÉ 4 : Un pas vers la mésomérie

Dans cette activité, on se propose de s'intéresser à la particularité des schémas de Lewis des ions carbonate et nitrate. L'ion carbonate, de formule brute CO_3^{2-} , joue un rôle majeur dans le rétrocontrôle du climat et des gaz à effet de serre via le cycle du carbone. L'ion nitrate, de formule brute NO_3^- , est quant à lui indispensable aux écosystèmes, en étant un nutriment de première importance pour la croissance des végétaux.

DOCUMENT 1 : Schéma de Lewis d'un ion

- Si l'un des atomes de l'édifice étudié porte un électron de plus par rapport à son nombre d'électrons de valence, alors il sera porteur d'une charge négative ;
- si au contraire il porte un électron de moins, alors il sera porteur d'une charge positive.

Exemple de l'ion hydroxyde :

L'ion hydroxyde a pour formule brute HO^- .

On commence par représenter la structure électronique de chacun des deux atomes :



On représente ensuite la liaison entre l'atome d'oxygène et l'atome d'hydrogène de façon à ce que ce dernier respecte la règle du duet.



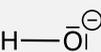
Ici, l'atome d'oxygène n'est entouré que de 7 électrons (6 électrons de valence directement portés par l'atome d'oxygène et 1 électron porté par l'atome d'hydrogène) et ne respecte pas la règle de l'octet :



On lui ajoute donc un électron supplémentaire, ce qui lui permet de respecter la règle de l'octet, et lui confère une charge négative comme indiquée dans la formule brute.



Le schéma de Lewis de l'ion hydroxyde est donc le suivant :



DOCUMENT 2 : Mésomérie

Certains édifices possèdent une structure favorable à la délocalisation des doublets d'électrons. Dans ce cas, plusieurs schémas de Lewis sont envisageables pour une même molécule. Ces différents schémas sont appelés formes mésomères. Les électrons passent continuellement d'une forme à l'autre.

1.
 - a. L'ion carbonate possède une géométrie trigonale autour de l'atome de carbone. Proposer un schéma de Lewis pour cet ion.
Données : $Z(\text{C}) = 6$ et $Z(\text{O}) = 8$
 - b. Représenter, sur le schéma de Lewis précédent, chaque atome d'oxygène par une couleur différente. Proposer alors deux nouvelles formes mésomères équivalentes pour l'ion carbonate.
2. Faire de même pour l'ion nitrate, de géométrie trigonale autour de l'atome d'azote également.
Donnée : $Z(\text{N}) = 7$



ACTIVITÉ 5 : Polaire ou apolaire ?

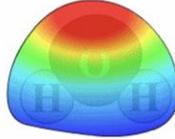
Lorsque l'on frotte une baguette de verre avec un chiffon de laine, ce dernier arrache les électrons de la baguette. Sa surface est alors chargée positivement.

Pour savoir si une molécule est polaire ou non, on peut approcher une baguette de verre chargée, d'un filet du liquide à étudier. Lorsque la molécule est polaire, le filet de liquide est dévié.

1.

- Réaliser l'expérience décrite ci-dessus avec un filet d'eau du robinet.
- Conclure quant au caractère polaire ou apolaire de la molécule d'eau.

Sur le schéma ci-dessous, des zones colorées modélisent la densité électronique de la molécule d'eau :



Source : <https://openclassrooms.com/forum/sujet/la-polarite-de-leau>

Plus la couleur tend vers le rouge et plus la densité électronique est élevée. Au contraire, plus elle tend vers le bleu et plus elle est faible.

2. Interpréter le résultat de l'expérience précédente à l'aide de la description de la densité électronique de la molécule d'eau donnée ci-dessus.

L'électronégativité

Linus Carl Pauling (1901 – 1994) est un chimiste et physicien américain. Il fut l'un des premiers chimistes quantiques et reçut le Prix Nobel en 1954 pour ses travaux décrivant la nature de la liaison chimique.

En 1932, Pauling introduit la notion d'électronégativité.

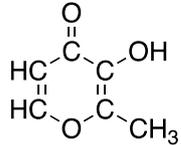
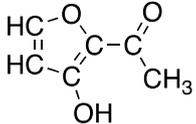
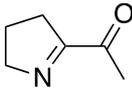
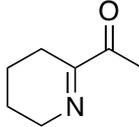
L'électronégativité d'un atome, notée χ , est une grandeur physique sans dimension qui traduit la capacité de cet atome à attirer à lui le doublet d'électrons d'une liaison dans laquelle il est engagé. Plus un atome est électronégatif et plus il attire à lui les électrons.

En utilisant plusieurs propriétés des molécules, Pauling établit une échelle d'électronégativité (*connue maintenant sous le nom d'échelle d'électronégativité de Pauling*) et associa une valeur d'électronégativité à la plupart des éléments chimiques.

- Indiquer qui de l'oxygène ou de l'hydrogène est l'atome le plus électronégatif.
- Dans une liaison entre deux atomes dont la différence d'électronégativité est significative, on attribue une charge partielle négative δ^- à l'atome le plus électronégatif et une charge partielle positive δ^+ à l'atome le moins électronégatif.
 - Positionner ces charges partielles sur une représentation de la molécule d'eau tenant compte de la géométrie autour de l'atome d'oxygène.
Donnée : $Z(O) = 8$
 - Faire de même avec le dioxyde de carbone.
Données :
 - $Z(C) = 6$
 - $\chi(C) < \chi(O)$
- À l'aide des réponses à la question 3, proposer une explication quant au fait que la molécule d'eau constitue une molécule polaire alors que le dioxyde de carbone est une molécule apolaire.



• Tableau 3

Nom	Maltol	Isomaltol	2-acétyl-1-pyrroline	2-acétyltétrahydropyridine
Formule brute				
Formule semi-développée				
Représentation topologique				
Description	Le maltol et l'isomaltol proviennent tous deux du D-fructose. Ils contribuent à l'odeur du pain, mais aussi de sa croûte.		La 2-acétyl-1-pyrroline et la 2-acétyltétrahydropyridine sont principalement responsables de l'odeur de la croûte, sans pour autant être les seuls composés à y contribuer.	

1. Représenter la structure électronique des atomes d'hydrogène, de carbone et d'oxygène. Dans combien de liaisons sont-ils généralement engagés ? Justifier. Cela est-il en accord avec les modèles moléculaires du 3-méthylbutanal et du diacétyl ?
Données : Z(H) = 1 ; Z(C) = 6 et Z(O) = 8.
2.
 - a. À l'aide du document fourni en annexe, compléter dans l'ordre les deux premiers tableaux.
 - b. Compléter le troisième tableau qui ne présente que des molécules cycliques.
3. Peut-on envisager l'existence de molécules différentes associées à une même formule brute ?
On s'appuiera ici sur l'exemple de la formule brute C₅H₁₀O.
4. Indiquer la représentation qui vous semble la plus appropriée en chimie organique. Justifier.



Annexe

Différentes formules pour une molécule

- La formule brute

Elle nous renseigne sur la nature et le nombre des atomes qui constituent la molécule. Le nombre de chacun d'eux est porté en indice à droite du symbole de l'élément.

Exemple :

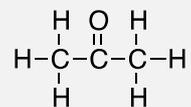
La propanone a pour formule brute C_3H_6O , ce qui signifie qu'elle comporte 3 atomes de carbone, 6 atomes d'hydrogène et 1 atome d'oxygène.

- La formule développée

Dans la formule développée, toutes les liaisons (simples ou multiples) entre les différents atomes sont représentées.

Exemple :

Formule développée de la propanone :

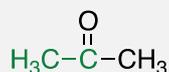


- La formule semi-développée

Dans la formule semi-développée, les liaisons mettant en jeu un atome d'hydrogène ne sont pas représentées pour plus de lisibilité. Toutes les autres liaisons sont représentées.

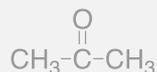
Exemple :

Formule semi-développée de la propanone :



Remarque : L'écriture $\text{H}_3\text{C}-\text{C}$ permet de mieux visualiser la liaison carbone – carbone entre le premier atome de carbone et le second.

La formule suivante reste néanmoins correcte :



- La représentation topologique

Pour obtenir la représentation topologique depuis la formule semi-développée :

- on retire le symbole des atomes de carbone et on ôte les atomes d'hydrogène portés par les atomes de carbone ;
- on représente les liaisons C–C par des lignes brisées ;
- on respecte la multiplicité des liaisons.

Exemple :

Formule semi-développée de la propanone :



Formule semi-développée

Représentation topologique



ACTIVITÉ 7 : Un problème d'étiquetage

Deux techniciens chimistes, Ethan et Alan-Inn, procèdent au rangement de la réserve de produits chimiques du lycée. Ils remarquent huit flacons dont les étiquettes sont partiellement abimées. Sur chacune d'elle persiste uniquement la formule topologique de la molécule... Cependant, dans les protocoles qui leur sont fournis, seuls les noms des produits à utiliser sont donnés, mais pas leurs formules. C'est le cas dans le protocole de synthèse de l'arôme de banane donné ci-dessous :

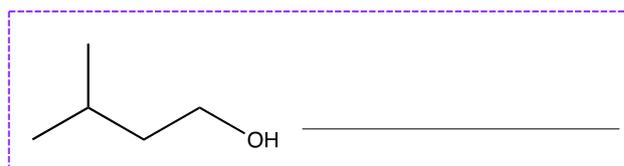
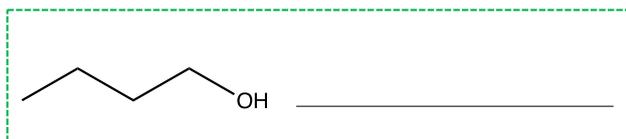
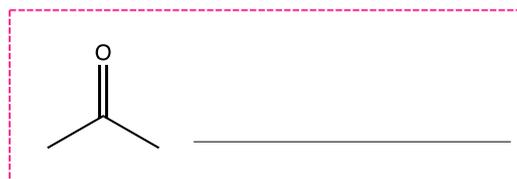
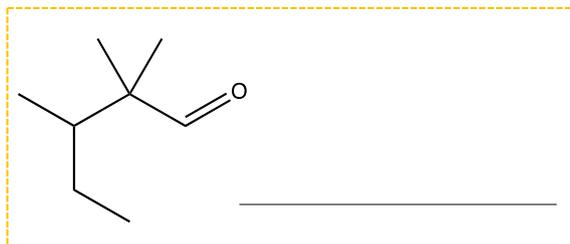
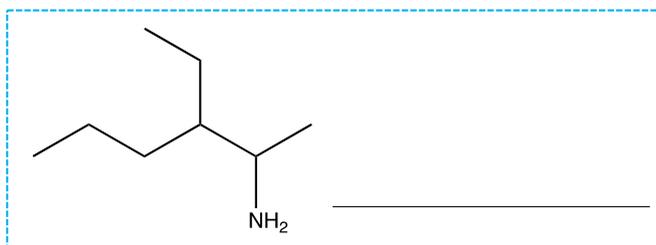
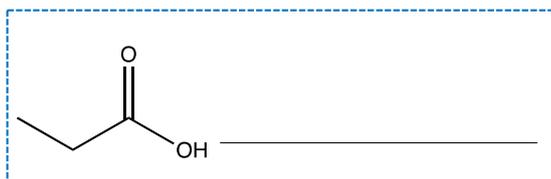
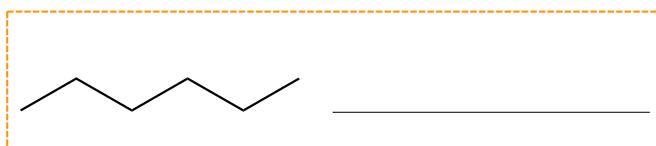
L'acétate de 3-méthylbutyle est un ester dont la saveur et l'odeur sont ceux de la banane.

On réalise sa synthèse au laboratoire en mettant en œuvre le protocole expérimental suivant :

- introduire 20 mL de 3-méthylbutan-1-ol, 15 mL d'acide éthanoïque, quelques grains de pierre ponce et 1 mL d'acide sulfurique concentré dans le ballon ;
- chauffer à reflux en maintenant une ébullition douce pendant 30 minutes ;
- laisser refroidir, puis transférer le contenu du ballon dans une ampoule à décanter. Éliminer la phase aqueuse ;
- sécher la phase organique ;
- purifier l'ester par chromatographie sur colonne.

Il est donc essentiel pour eux de parvenir à retrouver le nom de chaque molécule représentée sur les flacons.

1. Recopier les formules topologiques des molécules figurant sur les étiquettes ci-dessous, puis à l'aide du document fourni en annexe :
 - a. Entourer le groupe caractéristique de chacune d'elles et le nommer ;
 - b. Indiquer la famille chimique à laquelle chaque molécule appartient.



2. À l'aide de la carte mentale à disposition (*Carte mentale : nomenclature*), compléter chaque étiquette en nommant la molécule représentée.
3. Donner la formule semi-développée des réactifs à utiliser pour réaliser la synthèse de l'arôme de banane.



4. Quelles autres données aurait-on pu faire figurer sur chacune de ces étiquettes, en vue d'une utilisation expérimentale ?

Annexe

Les groupes caractéristiques

Un groupe caractéristique est un groupe d'atomes qui confère des propriétés spécifiques aux molécules qui le possèdent. On dit que ces molécules forment une famille chimique.

GRUPE CARACTERISTIQUE	FAMILLE	FORMULE DE LA FAMILLE
Groupe hydroxyle —OH	ALCOOL	R—OH
Groupe carbonyle $\begin{array}{c} \text{—C—} \\ \\ \text{O} \end{array}$	ALDÉHYDE	$\begin{array}{c} \text{R—C—H} \\ \\ \text{O} \end{array}$
	CÉTONE	$\begin{array}{c} \text{R}_1\text{—C—R}_2 \\ \\ \text{O} \end{array}$
Groupe carboxyle $\begin{array}{c} \text{—C—OH} \\ \\ \text{O} \end{array}$	ACIDE CARBOXYLIQUE	$\begin{array}{c} \text{R—C—OH} \\ \\ \text{O} \end{array}$
Groupe amino —NH ₂	AMINE	R—NH ₂

*R, R₁ et R₂ sont des groupes alkyles.

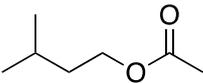
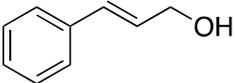
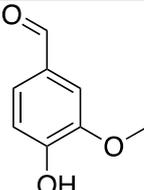
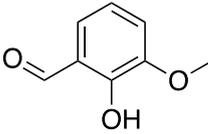
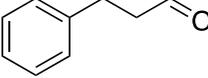


ACTIVITÉ 8 : L'odeur, une question de chimie !

Si jusqu'à ce jour, aucune théorie de l'odeur (théorie qui permettrait de relier la formule d'une molécule à une odeur donnée) ne s'est révélée suffisamment fiable, on a su faire tout de même quelques constatations quant aux propriétés structurales des molécules odorantes. L'architecture moléculaire, c'est-à-dire les propriétés d'isomérisation, est le facteur le plus important en ce qui concerne les qualités d'une odeur.

D'après Chimie des couleurs et des odeurs

1. Le tableau ci-dessous nous donne les formules de quelques molécules odorantes. Le compléter.

Nom de la molécule	Formule topologique	Formule semi-développée	Formule brute	Odeur
Éthanoate de 3-méthylbutyle		$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{H}_3\text{C}-\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{O}-\text{C}(=\text{O})-\text{CH}_3 \end{array}$		Banane
3-phénylprop-2-èn-1-ol				Fleurie de jacinthe
Acide heptanoïque				Désagréable, à relent gras
Vanilline				Vanille
Isovanilline				Aucune
3-phénylpropanal				Verdurée de concombre

2.

- Entourer les groupes caractéristiques de chaque molécule en attribuant une couleur différente à chacun d'eux.
- Repérer les groupes hydroxyle, carbonyle et carboxyle.

3. En s'aidant du document fourni en annexe :

- Indiquer les différents couples d'isomères de constitution.
- Préciser, dans chaque cas, s'il s'agit d'isomères de chaîne, de position ou de fonction.

4. À l'aide des modèles moléculaires, construire 6 isomères de constitution du butan-1-ol. Vous présenterez vos résultats dans un tableau en donnant pour chaque isomère :

- sa formule topologique ;
- son nom (si le groupe caractéristique écrit est connu) ;
- le type d'isomérisation de constitution entre la molécule écrite et le butan-1-ol.



Annexe

Isomérisation de constitution

Des isomères de constitution sont des composés qui ont la même formule brute, mais des formules développées (et donc semi-développées) différentes.

Une simple écriture « à plat » des structures développées permettra de les différencier. Ils ont des propriétés physiques, chimiques et biologiques différentes.

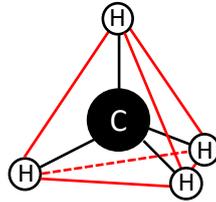
Il existe trois catégories particulières d'isomères de constitution :

- les isomères de chaîne : ils ne diffèrent que par leur chaîne carbonée .
- les isomères de position : ils possèdent la même chaîne carbonée et les mêmes groupes caractéristiques mais ces derniers ne sont pas situés à la même position.
- les isomères de fonction : ils ont des groupes caractéristiques différents.



ACTIVITÉ 9 : Représentation de Cram

Dans la molécule de méthane CH_4 , l'atome de carbone est lié à 4 atomes d'hydrogène. Lorsque l'on relie ces 4 atomes entre eux, on visualise un tétraèdre régulier au centre duquel se trouve le carbone.



Pour représenter la géométrie tétraédrique autour de l'atome de carbone dans un espace à 2 dimensions, on peut utiliser la représentation de Cram.

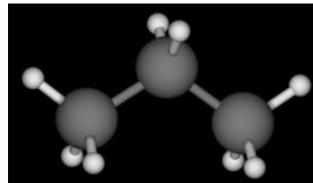
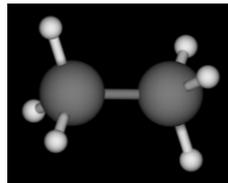
Conventions de la représentation de Cram

La représentation de Cram permet de représenter la position des atomes dans l'espace en utilisant les conventions suivantes :

- Les liaisons qui s'effectuent dans le plan de la feuille sont représentées par : —
- Les liaisons entre un atome situé dans le plan de la feuille et un atome situé en avant de ce plan sont représentées par : 
- Les liaisons entre un atome situé dans le plan de la feuille et un atome situé en arrière de ce plan sont représentées par : 

Autour d'un atome de carbone tétraédrique, l'angle entre deux liaisons situées dans le plan de la feuille est respecté et égal à environ 110° .

1. Donner la représentation de Cram du méthane en respectant la disposition des atomes d'hydrogène indiquée dans le document 1.
2. Donner une représentation de Cram de l'éthane et du propane dont les modèles moléculaires sont donnés ci-dessous. *On représentera toutes les liaisons carbone – hydrogène.*



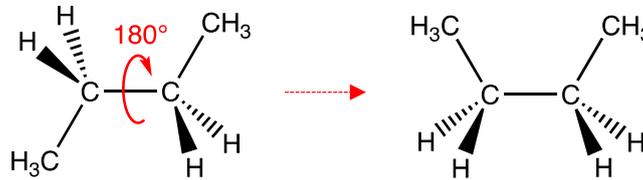


ACTIVITÉ 10 : Une histoire de rotation

Partie 1 – Analyse conformationnelle

La libre rotation autour des liaisons simples permet d'envisager une infinité de structures pour une molécule donnée. Ces différentes structures constituent des conformères de la molécule étudiée.

On a représenté ci-dessous deux conformères du butane :



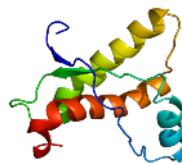
Pour passer de l'un à l'autre, on effectue une rotation de 180° autour de la liaison C-C centrale.

1. À l'aide des modèles moléculaires à disposition, représenter quatre autres conformères du butane en conservant trois liaisons dans le plan de la feuille.
On privilégiera un modèle compact pour les groupements méthyles aux extrémités.
2. Les nuages électroniques des liaisons se repoussent et certains conformères sont plus stables que d'autres. Identifier, parmi les quatre conformations du butane représentées et les deux conformations données dans le document 1, celle qui est la plus stable et celle qui est la moins stable.

Partie 2 – Conformation des molécules biologiques

Une protéine est une molécule biologique constituée d'un enchaînement d'acides aminés. Elle existe principalement dans une conformation qui lui donne sa structure tridimensionnelle. Ses propriétés sont liées à cette structure. La perte de la conformation de référence d'une protéine peut avoir des conséquences aussi graves que l'apparition de maladies neurodégénératives.

Chez les animaux, la « tremblante du mouton » est une maladie due à la présence de protéines anormales, les prions, dans le cerveau et la moelle. Ces protéines se forment par changement de la conformation de protéines normales. Sous l'action d'un agent infectieux, la protéine schématisée ici par des rubans se replie sur elle-même et forme des feuilletts plissés.



Cette structure empêche l'organisme d'éliminer la protéine anormale, et l'accumulation progressive des prions dans le cerveau provoque la destruction des neurones de l'animal.

3. Justifier, à partir du texte, que les prions présentent des structures déformables.
4. Quelle est l'origine des maladies à prions ?



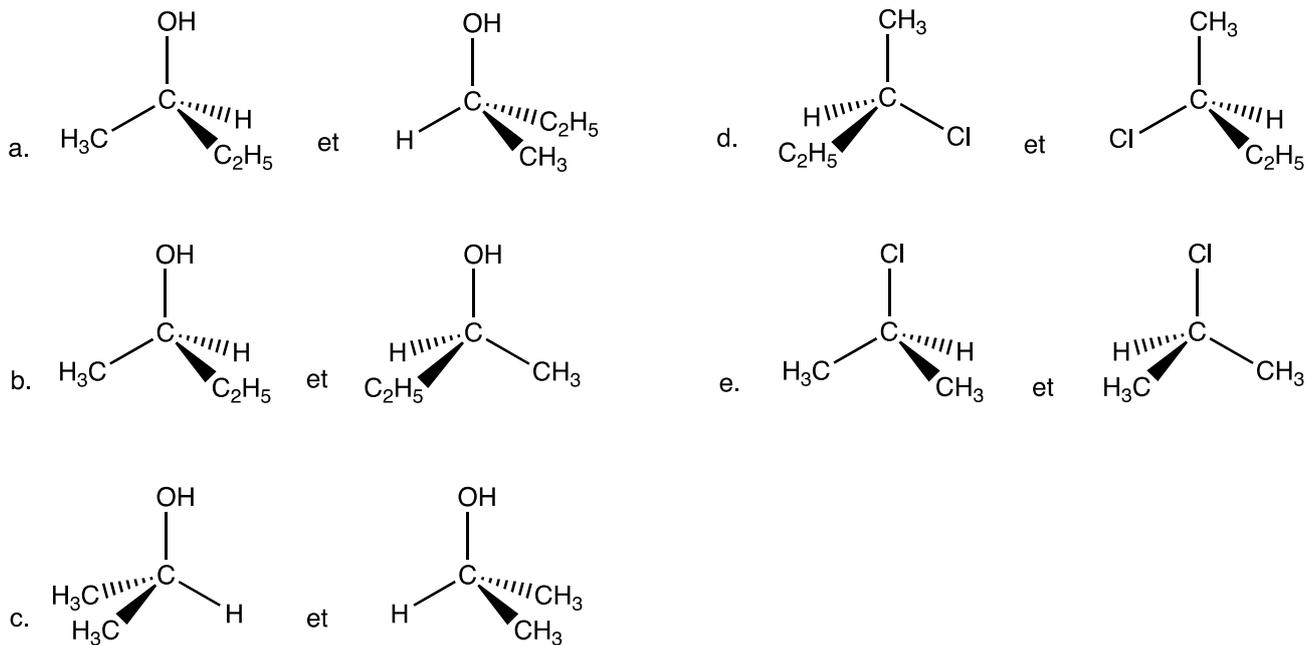
ACTIVITÉ 11 : Des molécules à première vue identiques...

La relation d'énantiométrie

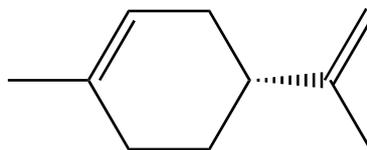
Si une molécule et son image dans un miroir plan ne sont pas superposables, alors elles forment un couple d'énantiomères. Ce sont des molécules différentes (le passage de l'une à l'autre nécessitant la rupture et l'échange de liaisons), mais très ressemblantes d'un point de vue structural. Elles possèdent, en effet, la même formule semi-développée.

Puisque deux énantiomères ont la même formule brute, l'énantiométrie constitue une classe d'isométrie particulière.

1. À l'aide des modèles moléculaires à disposition, déterminer, pour chacun des couples suivants, s'il s'agit de molécules identiques ou d'un couple d'énantiomères.



Le limonène est présent dans de nombreuses huiles essentielles à partir desquelles il peut être obtenu par distillation. Il tire son nom du citron qui, comme les autres agrumes, contient des quantités considérables de ce composé chimique, responsable en grande partie de leur parfum.



Structure du limonène

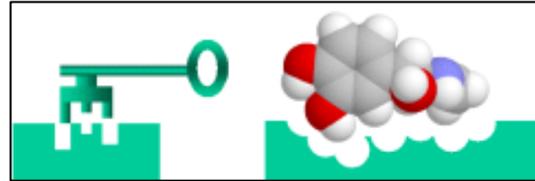
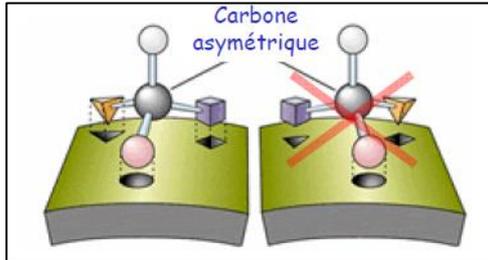
Source : <https://fr.wikipedia.org/wiki/Limonène>

2. Le limonène appartient-il à un couple d'énantiomères ? Justifier.



ACTIVITÉ 12 : Isomérisme et médicaments (un pas vers la Terminale...)

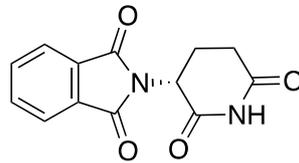
La synthèse d'un principe actif sous forme d'un unique énantiomère peut s'avérer compliquée et coûteuse. Ainsi, un principe actif est souvent obtenu sous forme d'un mélange d'énantiomères. Ces derniers possèdent toutefois des propriétés biologiques différentes. En effet, les mécanismes de reconnaissance entre molécules biologiques, dont le mécanisme médicament-protéine cible, se font selon un modèle « clé-serrure ». Un tel mécanisme assure la reconnaissance par la protéine cible d'un seul des deux énantiomères uniquement.



Sources : <http://ticem.sante.univ-nantes.fr/ressources/293.pdf>

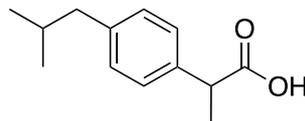
et : http://culturesciences.chimie.ens.fr/dossiers-reactivite-catalyse-autresdocs-Enzymes_Laage_6.html

1. Indiquer le problème qui peut se poser lors de l'ingestion d'un médicament sous forme d'un mélange de deux énantiomères.
2. Quelle spécificité des récepteurs biologiques explique qu'ils réagissent différemment avec deux énantiomères ?
3. La thalidomide est un médicament utilisé durant les années 1950 et 1960 comme sédatif et anti-nauséeux. Ce médicament, commercialisé sous forme d'un mélange de deux énantiomères, fut administré aux femmes enceintes comme anti-vomitif, mais provoqua chez les nouveau-nés de graves malformations. On connaît aujourd'hui la raison de ce drame : alors que l'un des deux énantiomères est bien un anti-vomitif, l'autre est tératogène.



L'énantiomère de la thalidomide agissant comme anti-nauséeux

- a. La thalidomide possède un unique atome de carbone asymétrique. Recopier la formule ci-dessus et identifier cet atome.
 - b. Représenter l'énantiomère tératogène de la thalidomide.
4. L'ibuprofène existe sous forme de deux énantiomères également. Toutefois, seul l'un des deux énantiomères est biologiquement actif et présente les effets thérapeutiques désirés.

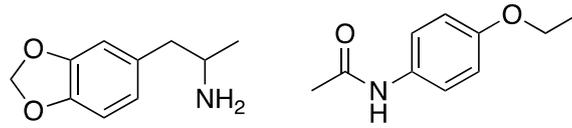


Représentation topologique de l'ibuprofène

- a. Identifier le ou les atome(s) de carbone asymétrique(s) de l'ibuprofène.
- b. Représenter ses deux énantiomères.
- c. À votre avis, pourquoi l'ibuprofène est-il toujours commercialisé sous forme d'un mélange racémique si seul l'un des deux énantiomères présente les effets thérapeutiques désirés ? Quelles peuvent être les limites de la séparation de deux énantiomères ?



5. On représente ci-dessous la molécule de MDA, un psychotrope aux propriétés stimulantes, et la phénacétine, un analgésique retiré du marché en 1983 car néphrotoxique et probablement cancérigène.



La MDA et la phénacétine

- Justifier que la MDA et la phénacétine sont liées par une relation d'isomérisie.
- Constituent-ils un couple d'énantiomères ? Justifier.