

Animation

1. représentation spatiale des molécules
2. module sous Word pour tracer des formules développées semi-développées et des représentations de Cram.

Table des matières

I) représentation spatiale des molécules

- 1) formule brute, semi-développée et développée, modèle moléculaire
- 2) formule topologique
- 3) représentation de Cram

II) la stéréoisomérisation

- 1) définition de la stéréoisomérisation
- 2) les stéréoisomères de conformation
- 3) les stéréoisomères de configuration
- 4) stéréoisomères de configuration dans le cas d'un carbone asymétrique, notion de chiralité.
- 5) la diastéréoisomérisation, molécule à deux carbones asymétriques
- 6) la diastéréoisomérisation Z/E

III) organigramme sur la stéréoisomérisation

Programme officiel

Introduction: les odeurs de menthe et de muguet sont très différentes alors qu'elles peuvent être produites par des molécules ayant la même formule semi-développée! Quel est ce mystère?

I) représentation spatiale des molécules

1) formule brute, semi-développée et développée, modèle moléculaire

Il existe plusieurs façons de représenter une molécule:

- **la formule brute:** on écrit côte à côte les symboles des atomes qui la constituent, en précisant en indice, à droite du symbole le nombre d'atomes. Si ce nombre est égal à 1 on ne l'écrit pas.

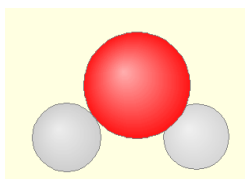
Exemples : la molécule d'eau de formule brute H₂O : 2 atomes d'hydrogène et 1 atome d'oxygène.

- **les modèles moléculaires:** Animation : modèles compacts et éclatés de centaines de molécules (minérale, organique, biochimique); un modèle moléculaire représente une molécule dans l'espace. On en distingue 2 types :

- **Le modèle compact :** chaque atome est représenté par une boule de couleur déterminée.

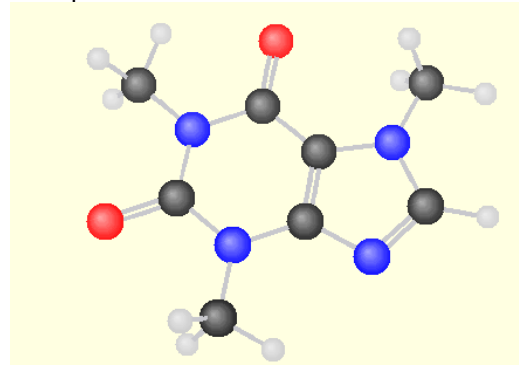
Exemple : modèle compact de l'eau de formule brute H₂O

L'atome d'oxygène est de couleur rouge, les atomes d'hydrogène sont de couleur blanche

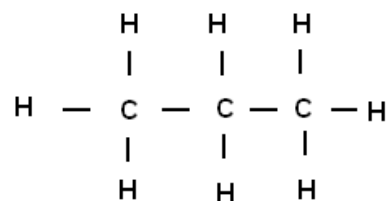


- **Le modèle éclaté :** les atomes sont représentés par des boules de couleur déterminée, les liaisons sont représentées par des barres

Exemple : modèle éclaté de la caféine



- formules développées et semi-développées : L'enchaînement des atomes dans la molécule peut être représenté par une formule développée ou semi-développée. Dans une formule développée, toutes les liaisons entre les différents atomes apparaissent. Dans une formule semi-développée, les liaisons concernant les atomes d'hydrogène ne sont pas représentées (pour gagner du temps et de la place!).
Exemples : le propane de formule brute C₃H₈ à pour formule développée :



Formules semi-développées : CH₃ - CH₂ - CH₃

2) formule topologique

Intérêt? La formule topologique permet de gagner du temps pour représenter une molécule.

La chaîne carbonée est représentée par une ligne brisée dont les sommets et les extrémités représentent les atomes de carbone. Une liaison simple est représentée par un trait, une double par 2 traits ... Les symboles des atomes sont représentés sauf ceux des atomes de carbone et les atomes d'hydrogène qui leur sont liés.

Exemple:

nom	formule semi-développée	formule topologique
3-chlorobut-1-ène	$ \begin{array}{c} \text{CH}_3 - \text{CH} - \text{CH} = \text{CH}_2 \\ \\ \text{Cl} \end{array} $	

3-éthyl-2-méthylpentan		
2-méthylhexan-3-one		
3-méthylbutan-1-ol		

3) représentation de Cram

En 1874 les chimistes J. H. Van't off et J.A. Lebel émettent l'hypothèse que l'atome de carbone est, dans de nombreuses molécules, au centre d'un tétraèdre. La représentation de **Cram** (1953) fait appel à la perspective pour visualiser les molécules dans l'espace.

Règles de la représentation de Cram

Les liaisons dans le plan dans la feuille sont symbolisées par un trait.

Les liaisons en avant du plan sont symbolisées par un triangle noir.

Les liaisons en arrière du plan sont symbolisés par un triangle hachuré (ou parfois par un trait en pointillé).

Exemple:

nom	représentation de Cram
2,2-diméthylpropane	
diméthyléthanol	

Remarque: dans le cas d'une structure tétraédrique l'angle entre les liaisons est de 120° .

II) la stéréoisomérisie

Lorsque deux molécules ont même formule brute mais une formule plane différente elles **sont isomères de constitution**. Nous nous intéresserons au cas où 2 molécules

ont même formule plane mais une représentation spatiale différente.

1) définition de la stéréoisomérisie

Deux molécules sont stéréoisomères lorsqu'elles ont la même formule plane (développée, semi développée ou topologique) mais pas la même représentation spatiale. Elles ne sont pas superposables.

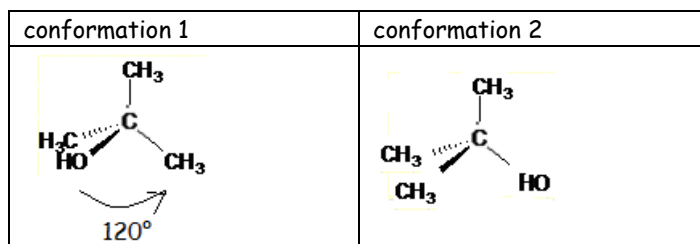
On distingue 2 types de stéréoisomères:

- les stéréoisomères de conformation
- les stéréoisomères de configuration

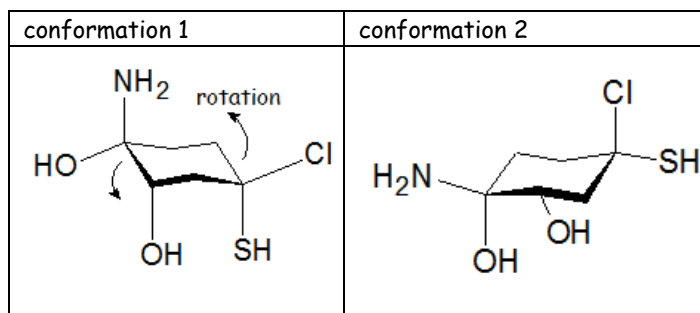
2) les stéréoisomères de conformation

Lorsqu'une molécule A peut avoir, par libre rotation autour d'une liaison simple plusieurs représentations spatiales, on dit qu'elle possède plusieurs stéréoisomères de conformation. On appelle conformations d'une molécule les différentes représentations spatiales qu'elle peut prendre par suite de rotations autour de ses simples liaisons.

Exemple 1: la molécule A possède 2 stéréoisomères de conformation. On passe de la conformation 1 à la conformation 2 par une rotation de 120° (par rapport à la liaison simple C-CH₃).



Exemple 2:



La molécule présente sur la figure 2 stéréoisomères de conformation. On passe de la conformation 1 à la conformation 2 par rotation.

Stabilité des conformations

Prenons l'exemple de l'éthane qui peut prendre 2 conformations, **les conformations décalées et les conformations éclipsées**:

Laquelle est la plus stable? La décalée! Pourquoi?

Toutes les conformations ne sont pas équivalentes du point de vue énergétique. Les liaisons carbone hydrogène C-H sont composées de deux électrons donc 2 charges négatives. Au sein de la molécule elles se repoussent. La conformation dans laquelle les simples liaisons sont les plus éloignées est la plus stable énergétiquement. Par conséquent la conformation décalée est la plus stable.

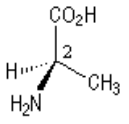
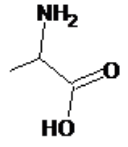
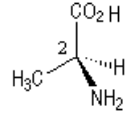
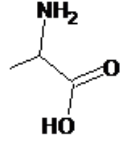
La conformation la plus stable est celle pour laquelle:

- les liaisons covalentes sont les plus éloignées
- les interactions stériques dues aux gros substituants sont les plus faibles

3) les stéréoisomères de configuration

Deux stéréoisomères de configuration sont 2 molécules différentes! Elles ne sont pas superposables. Elles ont même formule plane mais une représentation spatiale différente.

Exemple:

représentation de Cram	formule topologique
<p>molécule A</p> 	
<p>molécule B</p> 	

Les 2 molécules ne sont pas superposables même par rotation: elles ne sont pas stéréoisomères de conformation. Elles possèdent une formule plane identique mais une représentation spatiale différente. Elles ne peuvent pas être la même molécule!

4) stéréoisomères de configuration dans le cas d'un carbone asymétrique, notion de chiralité.


Un atome de carbone asymétrique, noté C*, est un atome de carbone tétraédrique lié à 4 atomes ou groupes d'atomes différents.

Une molécule possédant un atome de carbone asymétrique peu exister sous 2 configurations différentes, image l'une de l'autre dans un miroir.

Les 2 stéréoisomères de configuration correspondant sont appelés des énantiomères. L'énantiomérisation est la relation entre 2 stéréoisomères de configuration images l'un de l'autre par un miroir.

2 énantiomères possèdent des propriétés chimiques et physiques communes mais des propriétés biochimiques différentes.

Exemple:

2 énantiomères	formule semi-développée
	<p>CH₃-CHOH-CH₃</p>

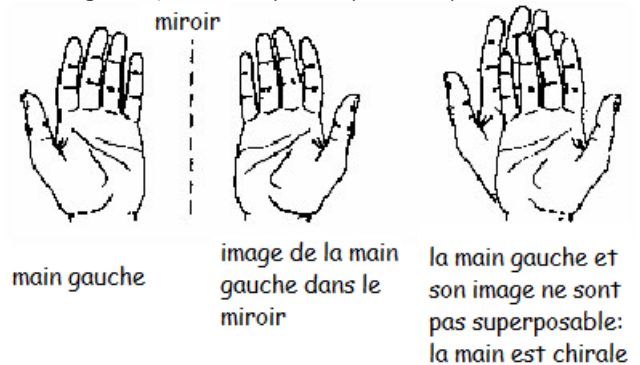
Les 2 molécules sont énantiomères car :

- images l'une de l'autre dans un miroir

- non superposables même par rotation

Un objet est chiral s'il n'est pas superposable à son image dans un miroir et qu'il n'a pas de plan de symétrie.

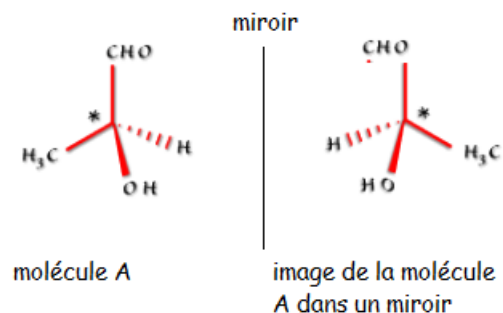
Exemple: La main est chirale, elle n'est pas superposable à son image et qu'elle n'a pas de plan de symétrie!



Une molécule ne possédant qu'un seul atome de carbone asymétrique est toujours chirale. Pour qu'une molécule soit chirale il est nécessaire qu'elle ne possède pas de plan de symétrie ce qui est impossible quand elle ne possède qu'un seul atome de carbone asymétrique.

Remarque: le concept de chiralité est macroscopique; il a été étendu aux molécules par Pasteur en 1948.

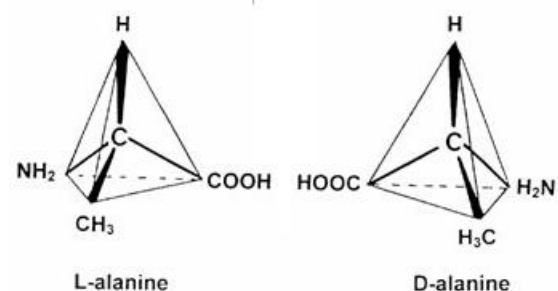
Exemple



La molécule A possède un seul atome de carbone asymétrique. Elle n'a pas de plan de symétrie. Elle n'est pas superposable à son image dans un miroir. Cette molécule est chirale.

Un mélange contenant les deux énantiomères en proportions égales est appelé un racémique.

Exemple: un mélange équimolaire de l'acide aminés L-alanine et de son énantiomère la D-alanine est appelé un racémique.

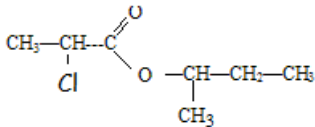


5) la diastéréoisomérisie, molécule à deux carbones asymétriques

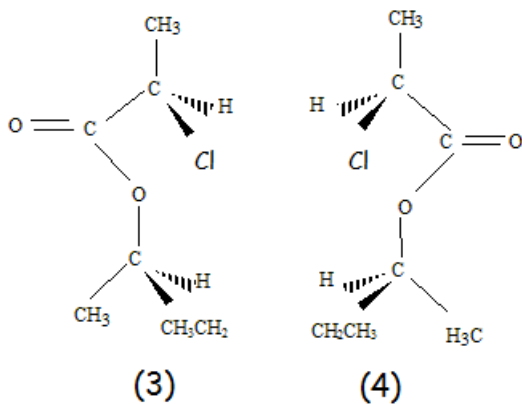
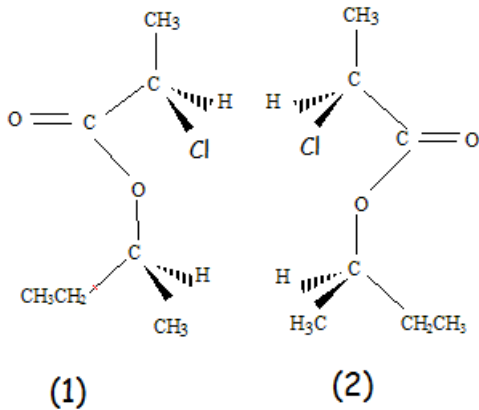
Les diastéréoisomères sont des isomères de configuration qui ne sont pas des énantiomères. Ils ont même formule développée mais une représentation spatiale différente. 2 diastéréoisomères ne sont pas images l'un de l'autre dans un miroir.

2 diastéréoisomères ont des propriétés physiques et chimiques différentes.

Exemple: considérons l'espèce chimique suivante possédant 2 carbones asymétriques:



Elles possèdent 4 configurations possibles:



1 et 2 ainsi que 3 et 4 sont énantiomères car image l'un de l'autre dans un miroir.

1 et 3 ainsi que 2 et 4 sont diastéréoisomères car ils ne sont pas images l'un de l'autre dans un miroir.

6) la diastéréoisomérisie Z/E

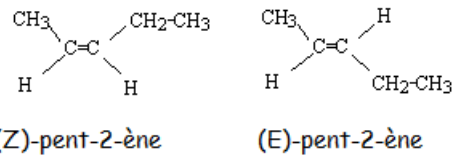
Il n'y a pas de rotation possible autour d'une double liaison.

Soit un composé de formule AHC=CHB avec A et B différent de H. Il existe 2 stéréoisomères de configuration appelés Z et E qui ne sont pas image l'un de l'autre dans un miroir. Il s'agit donc de deux diastéréoisomères.

- Dans le diastéréoisomère Z (zusammen qui veut dire ensemble en allemand) les deux atomes d'hydrogène se trouvent 'ensemble' du même côté de la double liaison.

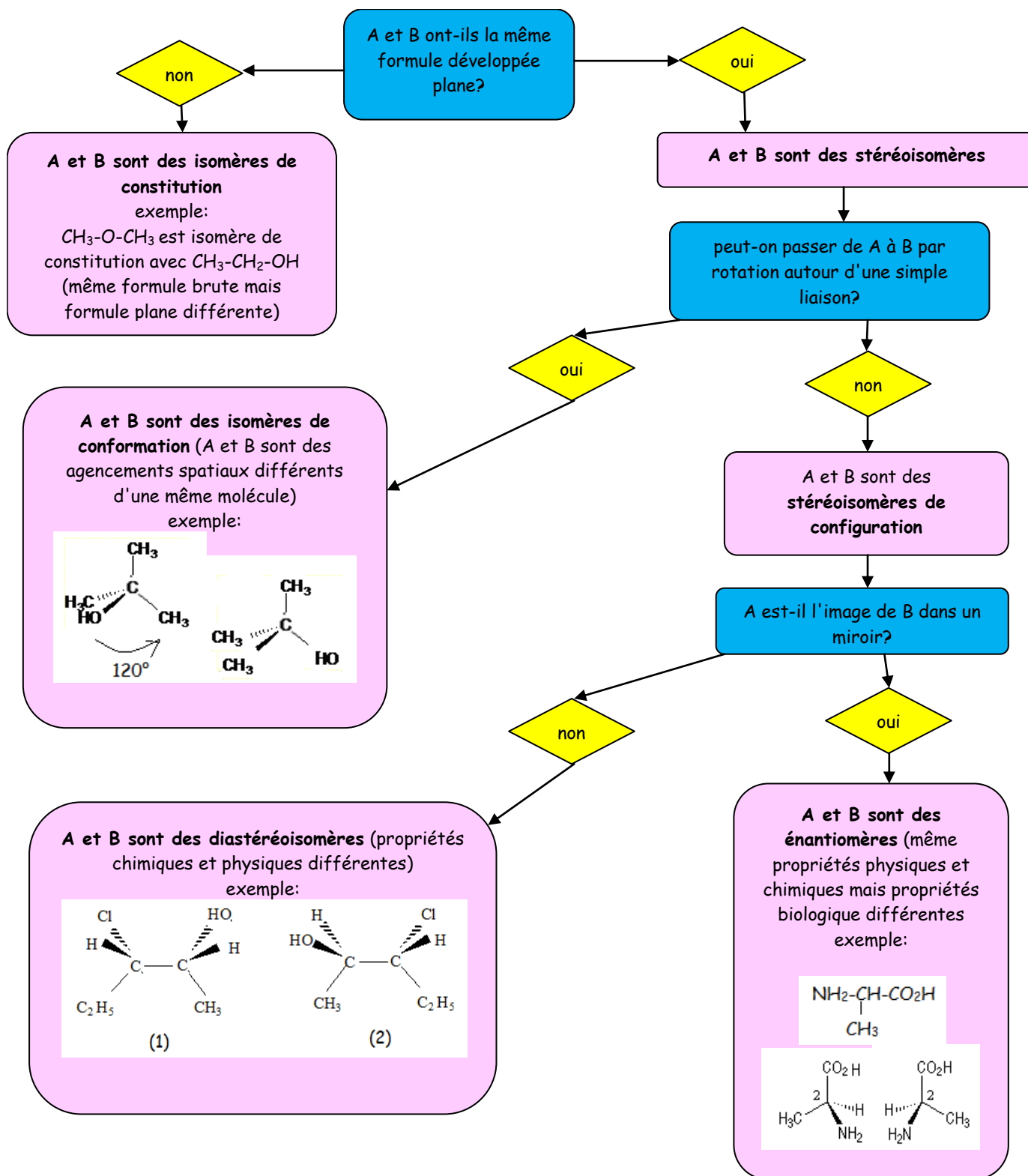
- Dans le diastéréoisomère E (entgegen qui veut dire opposé en allemand) les deux atomes d'hydrogène se trouvent de part et d'autre de la double liaison.

Exemple:



Dans le (E)-pent-2-ène les atomes d'hydrogène sont de part et d'autre de la double liaison. Pour le (Z)-pent-2-ène, les atomes d'hydrogène sont du même côté de la double liaison. Ces deux composés sont des diastéréoisomères car ils ont même formule semi-développée mais une représentation spatiale différente et ils ne sont pas images l'un de l'autre dans un miroir.

III) organigramme sur la stéréoisomérisation



Programme officiel

Comprendre

Lois et modèles

Comment exploite-t-on des phénomènes périodiques pour accéder à la mesure du temps ? En quoi le concept de temps joue-t-il un rôle essentiel dans la relativité ? Quels paramètres influencent l'évolution chimique ? Comment la structure des molécules permet-elle d'interpréter leurs propriétés ? Comment les réactions en chimie organique et

celles par échange de proton participent-elles de la transformation de la matière ? Comment s'effectuent les transferts d'énergie à différentes échelles ? Comment se manifeste la réalité quantique, notamment pour la lumière ?

Représentation spatiale des molécules

Notions et contenus	Compétences exigibles
Chiralité : définition, approche historique.	Reconnaître des espèces chirales à partir de leur représentation.

Représentation de Cram.	Utiliser la représentation de Cram.
Carbone asymétrique. Chiralité des acides α-aminés.	Identifier les atomes de carbone asymétrique d'une molécule donnée.
Énantiomérie, mélange racémique, diastéréoisomérisation (Z/E, deux atomes de carbone asymétriques).	À partir d'un modèle moléculaire ou d'une représentation, reconnaître si des molécules sont identiques, énantiomères ou diastéréoisomères. <i>Pratiquer une démarche expérimentale pour mettre en évidence des propriétés différentes de diastéréoisomères.</i>
Conformation : rotation autour d'une liaison simple ; conformation la plus stable.	<i>Visualiser, à partir d'un modèle moléculaire ou d'un logiciel de simulation, les différentes conformations d'une molécule.</i>

Formule topologique des molécules organiques.	Utiliser la représentation topologique des molécules organiques.
Propriétés biologiques et stéréoisomérisation.	Extraire et exploiter des informations sur : - les propriétés biologiques de stéréoisomères, - les conformations de molécules biologiques, pour mettre en évidence l'importance de la stéréoisomérisation dans la nature.