

LC3 – STRUCTURE SPATIALE DES MOLÉCULES

13 juin 2021

Julie Deleuze & Tristan Jocteur

Niveau : Tle ST2S (+STL pour la loi de Biot)

Bibliographie

Prérequis

- Formalisme de Lewis
- Liaison covalente et polarisée
- Polarisation des ondes électromagnétiques

Expériences

- ☞ Mesures de pH diverses
- ☞ Détermination du pKa de l'acide éthanoïque

Table des matières

1	Géométrie des molécules	2
1.1	Présentation de la théorie VSEPR	2
1.2	Etude de des carvones	3
2	Chiralité	3
2.1	Définitions	3
2.2	Carbone asymétrique	4
3	Propriétés des énantiomères	5
3.1	Des propriétés physiques similaires	5
3.2	Mais une propriété optique différente	6
4	Conclusion	6

Notions et contenus	Capacités exigibles
Schéma de Lewis d'une molécule ou d'un ion. Théorie VSEPR.	- Interpréter ou établir le schéma de Lewis de molécules ou d'ions contenant des doublets liants, doublets non-liants, doubles liaisons, triples liaisons. - Utiliser la théorie VSEPR pour déterminer la géométrie d'espèces de formules chimiques AX_nE_m, avec $n+m \leq 4$, l'atome central étant donné. - Écrire des formes mésomères des ions nitrate et carbonate pour interpréter leur géométrie. Capacité numérique : utiliser un logiciel de représentation moléculaire pour visualiser une molécule.

Notions et contenus	Capacités exigibles
Représentations spatiales. Chiralité. Diastéréoisométrie, énantiométrie. Règles de Cahn, Ingold et Prelog (CIP). Configuration absolue R et S. Isomérisme Z et E.	- Représenter une molécule en perspective de Cram avec plusieurs atomes de carbone asymétriques. - Définir une molécule chirale. - Représenter des énantiomères ou des diastéréoisomères. - Déterminer la configuration absolue d'un atome de carbone asymétrique. - Identifier des couples d'énantiomères et des diastéréoisomères. - Extraire et exploiter des informations sur les propriétés biologiques de stéréoisomères. Capacités expérimentale et numérique : - Repérer une molécule chirale. - Identifier les relations d'énantiomérisme et de diastéréoisomérisme entre différents stéréoisomères sur des modèles moléculaires ou en utilisant un logiciel de représentation moléculaire.

Programmes

Introduction

Notre fil rouge est le suivant : en représentation topologique la S-carvone et la R-carvone sont identiques ! Pourtant quand on les sent, c'est pas du tout pareil... Comment c'est possible ? Parler très vite faire du principe d'un récepteur olfactif (ou du moins sa schématisation lego, on s'en fout de la bio) -> elles doivent sûrement varier selon leur structure spatiale ! **La leçon est assez légère, on peut prendre son temps !**

⚡ Par exemple, si l'une est en forme de triangle et l'autre en forme de banane bah le récepteur va pas être compatible

1 Géométrie des molécules

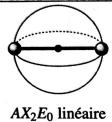
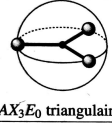
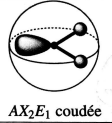
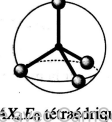
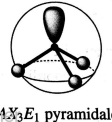
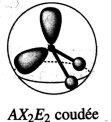
Les formules de Lewis des composés permettent de prévoir certains propriétés physicochimiques des molécules et des ions, comme par exemple le nombre de liaisons que peut former un atome ou la longueur de ces liaisons. Cependant, elles ne permettent pas de prévoir pourquoi BeH_2 (dihydrobéryllium) est une molécule apolaire, alors que la molécule d'eau est une molécule polaire. L'information manquante se trouve dans la géométrie des molécules, qui s'établit grâce à la théorie VSEPR. Vérifions si les différentes propriétés de la S/R-carvone peuvent s'expliquer par leur géométrie.

1.1 Présentation de la théorie VSEPR

La méthode VSEPR permet de déterminer la géométrie d'une molécule contruite autour d'un atome central A, porteur de paires non liantes E, et directement lié à des atomes ou des groupes d'atomes X, qu'on notera AX_mE_n . Le modèle proposé présente un double aspect, géométrique et physique :

- géométriquement, les électrons des couches de valence sont répartis sur une sphère centrée sur l'atome A ;
- Dans un cadre géométrique, le modèle ne considère que l'interaction répulsive entre les électrons.

Les objets liés à l'atome sont considérés comme ponctuels et s'organisent autour de l'atome de manière à minimiser la répulsion entre eux. Ils se placent sur les sommets d'un polyèdre déterminé par la somme $p = m + n$

$p = m + n$	E_0	E_1	E_2
2	 AX_2E_0 linéaire		
3	 AX_3E_0 triangulaire	 AX_2E_1 coudée	
4	 AX_4E_0 tétraédrique	 AX_3E_1 pyramidale à base triangulaire	 AX_2E_2 coudée

Avec BeH_2 , $m = 2, n = 0$ donc la molécule est linéaire. Pour H_2O en revanche, $m = 2, n = 2$ donc la molécule est coudée.

Dessiner molécules : l'une est symétrique donc pas de moment dipolaire, l'autre possède un moment dipolaire à cause de sa géométrie coudée.

1.2 Etude de des carvones

Revenons à la carvone : que cela soit la R ou la S-carvone $n = 0, m = 4$ autour de l'atome de carbone fonctionnel et de même on peut vérifier que la géométrie est la même autour de chaque atome de la molécule. Il faut donc chercher l'explication de leurs différentes propriétés autre part.

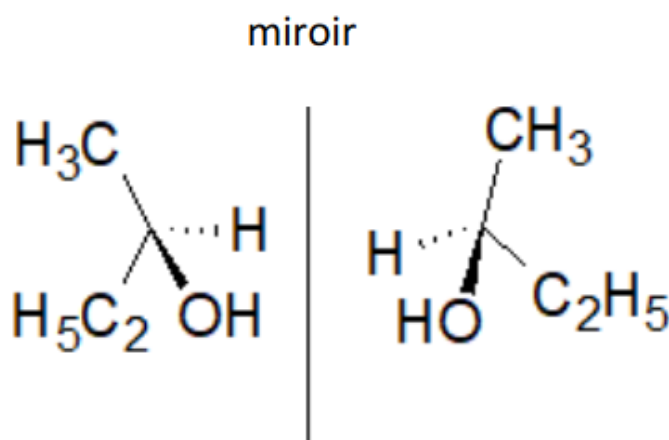
↓ Il y a une subtilité structurelle dans cette molécule pck elle est chirale !

2 Chiralité

<https://spcl.ac-montpellier.fr/moodle/course/view.php?id=62§ion=1> mais bon c'est surtout de tête. vite fait <https://www.faidherbe.org/site/cours/dupuis/enantio.htm>

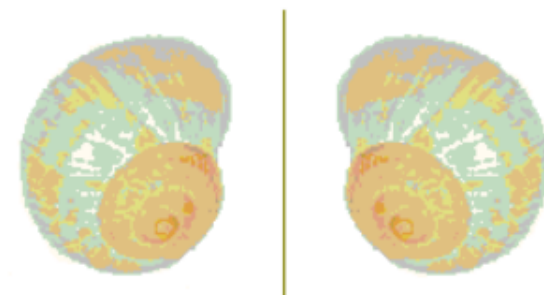
2.1 Définitions

Une molécule est dite chirale si elle n'est pas superposables à son image par un miroir plan. C'est le cas notamment de la molécule de butan-2-ol :



En effet, quelle que soit la rotation appliquée, il est impossible de superposer l'image obtenue avec la molécule initiale ici (**utiliser des modèles moléculaires pour illustrer ça ça sera bcp plus clair**). On dit alors que la molécule d'origine et la molécule image, qui sont des molécules distinctivement différentes, sont des énantiomères ou liés par une relation d'énantioméris. Deux énantiomères possèdent la même formule brute, ce sont donc par définition des isomères. Néanmoins ils possèdent aussi la même formule développée, ce ne sont donc pas des isomères de constitution mais ce qu'on appelle des stéréoisomères.

Cette notion s'étend au-delà du monde moléculaire, beaucoup d'objet que l'on aperçoit dans la vie de tous les jours sont chiraux, on peut citer notamment les coquilles d'escargot ou encore les mains ! Notamment, la main gauche est énantiomère de la main droite.



Si on prend l'exemple de la molécule d'eau et que l'on fait son image par un miroir plan, on voit que l'on peut superposer son image à la molécule d'origine en effectuant une rotation de 180 degrés (à faire au tableau). La molécule d'eau n'est donc pas chirale. La question est alors la suivante : comment prévoir si une molécule est chirale ou non sans avoir à faire le processus entier à chaque fois ?

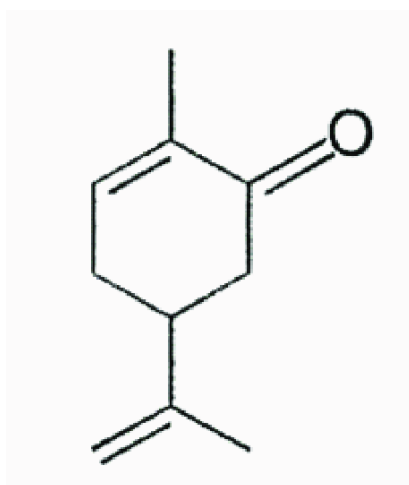
Bien souvent la chiralité dans la matière orga est induite par les atomes de carbone

2.2 Carbone asymétrique

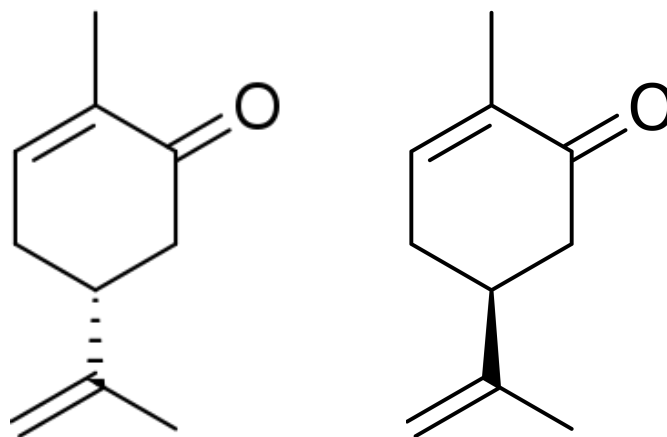
En effet, comme vous le savez déjà, dans les molécules organiques, les atomes de carbones se lient à 4 autres atomes ou groupes d'atomes. Si les 4 groupes d'atomes sont différents alors on dit que le carbone est asymétrique. Sauf cas particulier que l'on occultera à votre niveau, une molécule qui présente un carbone asymétrique est chirale.

Démonstration avec C* images l'un de l'autre avec modèle moléculaire.

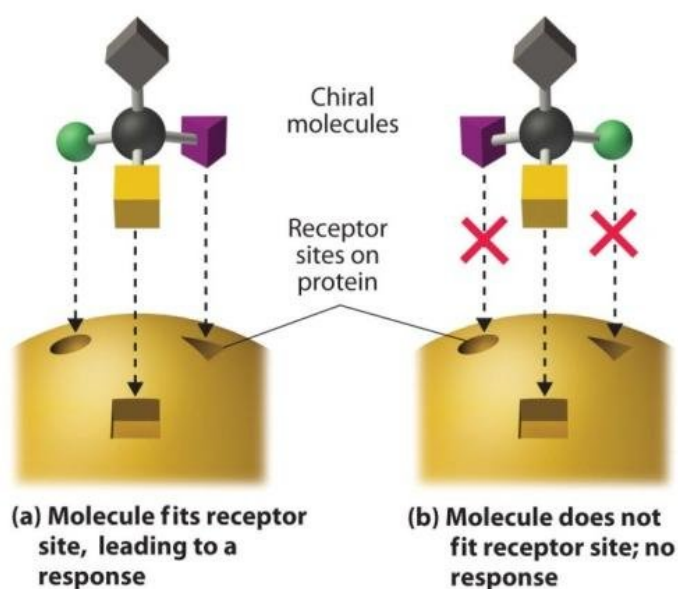
Si on reprend notre molécule de départ, la carvone, on voit qu'elle possède un carbone asymétrique. (on peut montrer qu'un des carbone ne l'est pas aussi)



Cela signifie que la carvone existe sous deux formes possibles énantiomères l'une de l'autre ! La carvone-S et la carvone-R :



Face à un récepteur olfactif spécifique, les molécules ne sont donc plus équivalentes puisqu'elles n'ont pas la même structure spatiale (diapo)



Ainsi, les deux molécules n'étant pas compatibles avec les récepteurs, cela explique qu'elles n'auront pas les mêmes odeurs ! Le mystère est résolu.

↓ *Ok ça change l'interaction avec un récepteur mais à part ça, y'a rien d'autre qui change ?*

3 Propriétés des énantiomères

3.1 Des propriétés physiques similaires

Deux énantiomères ayant une structure très proche, la plupart de leurs propriétés physiques sont similaires. Ainsi deux énantiomères ont des températures de fusion égales, ont des propriétés de solubilité similaires et présentent la même densité.

↓ *Mais alors comment les différencier ?*



3.2 Mais une propriété optique différente

https://spcl.ac-montpellier.fr/moodle/pluginfile.php/10301/mod_resource/content/0/ONDES_FS06_Polarisation.pdf pour un exemple de ce qui est effectivement fait niveau polarisation en STL.

Tous les phénomènes physiques cités précédemment sont des phénomènes symétriques mais face à des phénomènes dissymétriques, des énantiomères peuvent présenter des propriétés physiques différentes : c'est le cas de l'interaction avec une lumière polarisée. En effet, une solution de molécules chirales est capable de faire tourner la direction de polarisation d'une onde électromagnétique polarisée. On dit alors que ce sont des espèces optiquement actives. Pour quantifier cette rotation de la direction de la direction de polarisation, on utilise la loi de Biot :

$$\alpha = [\alpha]_T^\lambda l c \quad (1)$$

avec α la rotation en degré de la direction de polarisation, $[\alpha]_T^\lambda$ le pouvoir rotatoire spécifique de la molécule, l la longueur de solution parcourue par l'OEM et c sa concentration. Deux énantiomères possèdent des pouvoirs rotatoires spécifiques de signe opposé ! il est donc possible de les identifier ainsi ! On propose de vérifier la loi de Biot expérimentalement et de déterminer ainsi le pouvoir rotatoire spécifique de la carvone :



Loi de Biot et carvone

🔪 yolo

☹ pas hyper long, on prend que un point en live

C'est peut-être meilleur bail avec le polarimètre de Laurent... On a le temps pour expliquer son fonctionnement en vrai. On prélève 5 mL de carvone pure et on la met dans une fiole de 50 mL que l'on complète par de l'éthanol. Ça correspond à une concentration de 95,8 g/L

4 Conclusion

Ouverture en disant qu'on peut avoir plusieurs C* et donc on a des diastéréoisomères aussi qui eux ont des propriétés physiques différentes. (dédoublément par formation de sels diastéréoisomères ?)