

Structure spatiale des molécules organiques

INTRODUCTION

Les molécules peuvent avoir diverses ressemblances et/ou différences. Notamment des molécules peuvent avoir une même formule brute mais des structures ou enchaînements d'atomes différents. On appelle ces molécules des isomères. Certaines de ces différences ne peuvent être explicitées que dans un modèle en trois dimensions. Par exemple, dans les années 1930, les scientifiques notent un écart entre les calculs théoriques et les résultats expérimentaux lors de l'étude de la molécule d'éthane. Ils envisagent alors que la rotation autour des liaisons simples est possible, mais qu'elle n'est pas « libre » : les différentes dispositions obtenues correspondent à des niveaux d'énergie différents, et il existe une « barrière d'énergie » à franchir pour passer d'une conformation à une autre.

Ce TP comporte 3 Appels

Matériels et produits disponibles

- Boîte de modèles moléculaires
- Logiciel ChemSketch

Q1. Construire les modèles moléculaires de l'éthane de formule $\text{CH}_3\text{—CH}_3$ et du butane de formule $\text{CH}_3\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_3$.

Q2. Faire tourner chaque groupe d'atomes autour de la liaison simple C—C en rouge (voir question précédente) et **schématiser** à l'aide d'une représentation de votre choix deux conformations différentes de la molécule d'éthane. **Faire** de même pour le butane. *Ce phénomène se produit naturellement, en effet les molécules ne sont pas « rigides ». Sous l'effet de l'agitation thermique, les atomes des liaisons chimiques vibrent (comme des masses accrochées à un ressort). L'énergie récupérée permet aux groupes d'atomes de tourner autour des liaisons simples.*

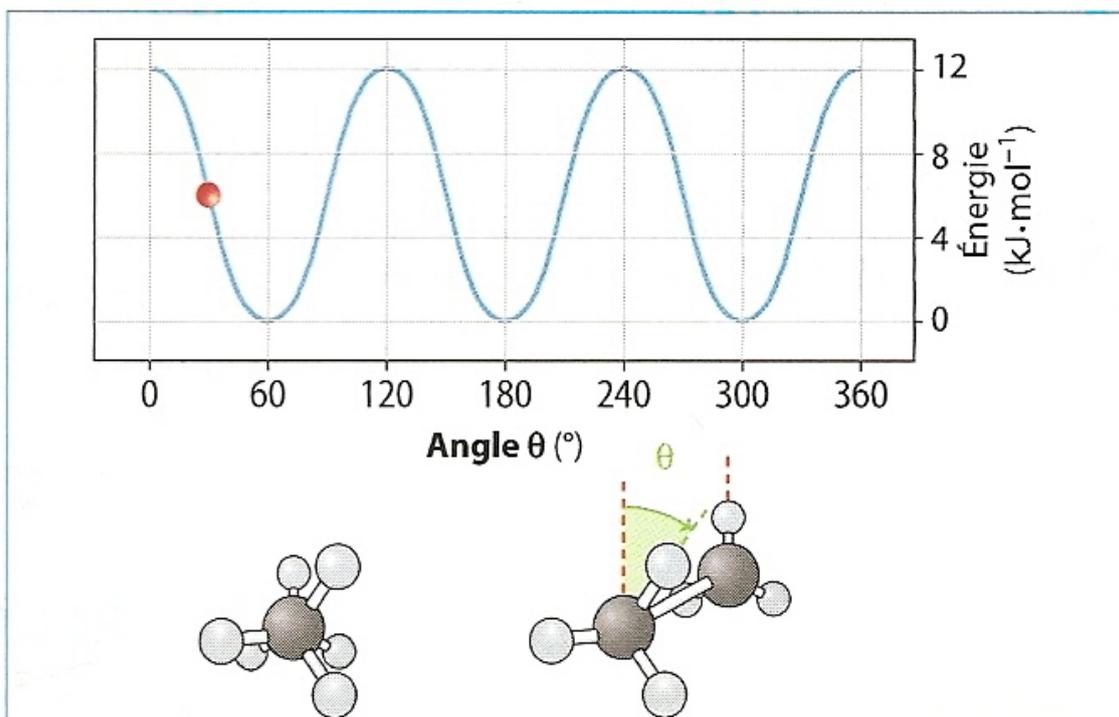
Q3. Déterminer le nombre de conformations de ce type différentes. Sont-elles toutes équivalentes ? **Déterminer** lesquelles sont les plus stables et les moins stables et formuler une hypothèse permettant d'expliquer la stabilité d'une conformation par rapport à une autre.

ALLER À LA PAGE SUIVANTE

Structure spatiale des molécules organiques

Q4. Représenter deux conformations de l'éthane qui correspondent avec les minima et maxima de l'énergie de la molécule.

Document 1.



Énergie de l'éthane pour différentes conformations. Les conformations sont repérées par l'angle θ , dit angle de torsion.

APPEL N°1

Compétences évaluées : Réa A/R App

ALLER À LA PAGE SUIVANTE

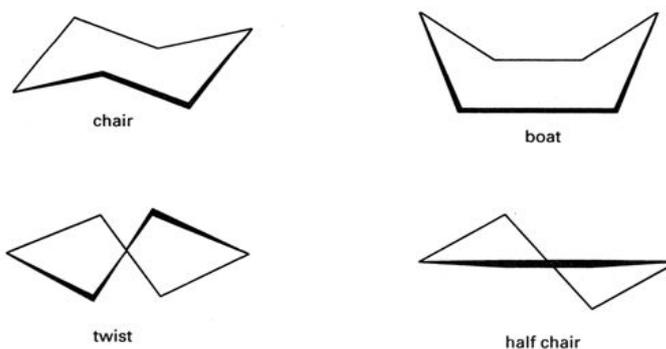
Structure spatiale des molécules organiques

Q5. Représenter la molécule d'éthane à l'aide du logiciel ChemSketch, la visualiser en 3D dans le « 3D viewer » (voir fiche sur le site). Quelle conformation de l'éthane le logiciel propose-t-il ? Comment se positionnent les atomes d'hydrogène d'un même atome de carbone l'un par rapport à l'autre ?

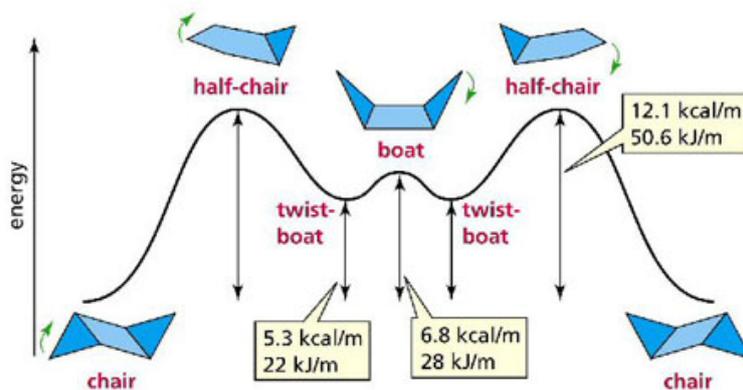
Q6. Représenter le modèle de la molécule de cyclohexane C_6H_{12} à l'aide du logiciel ChemSketch. Retrouve-t-on la même position des hydrogènes sur un même carbone ?

Q7. Rechercher la configuration chaise du cyclohexane en choisissant correctement l'angle de vue. Est-ce la conformation la plus stable ?

Document 2.



Les conformations du cyclohexane



Énergie du cyclohexane en fonction des conformations

APPEL N°2

Compétences évaluées : Réa Réa A/R

ALLER À LA PAGE SUIVANTE

Structure spatiale des molécules organiques

Q8. Construire le modèle moléculaire des alcènes suivants :

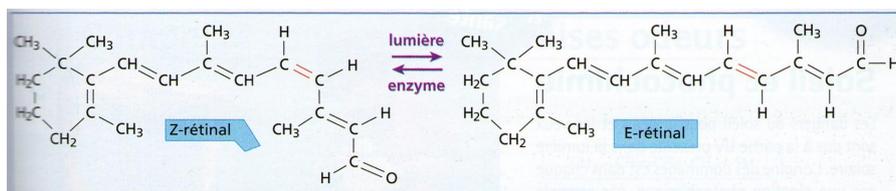


Q9. Déterminer le nombre de géométries possibles pour chaque molécule. Doit-on enlever des parties de la molécule pour passer de l'une à l'autre des géométries ?

Q10. Réfléchissez à comment pourrait être nommés les isomères du butène $\text{CH}_3-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_3$ pour les différencier ?

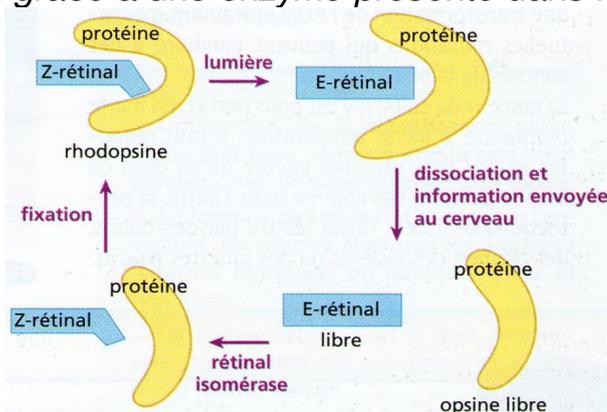
Document 3.

L'isomère Z du rétinol peut s'associer à une protéine, l'opsine, pour former la rhodopsine. Lorsqu'un photon est absorbé par la rhodopsine, le Z-rétinal se transforme en E-rétinal.



Équation de l'isomérisation photochimique du rétinol.

Cette isomérisation, qui se produit en $2 \cdot 10^{-13}$ s, provoque d'importantes modifications géométriques au niveau de la protéine opsine qui se détache alors du rétinol. Ce phénomène permet au cerveau de détecter la présence de lumière sur la rétine. Afin que les cônes et bâtonnets puissent à nouveau recevoir de la lumière, la rhodopsine est régénérée. Le E-rétinal se retransforme alors spontanément (sans photon) en Z-rétinal. Cette isomérisation a lieu grâce à une enzyme présente dans l'œil, la rétinol isomérase.



Différentes transformations se produisant dans les cellules photoréceptrices de l'œil recevant de la lumière.

Q11. Représenter le modèle de ces molécules à l'aide du logiciel ChemSketch.