

Représentation spatiale des molécules

Préambule

Extrait du programme d'enseignement spécifique de physique-chimie de la série scientifique en classe terminale ([Bulletin officiel spécial n°8 du 13 octobre 2011](#))

Structure et transformation de la matière

Notions et contenus	Compétences exigibles
<p>Représentation spatiale des molécules</p> <p>Chiralité : définition, approche historique.</p> <p>Représentation de Cram.</p> <p>Carbone asymétrique.</p> <p>Chiralité des acides α-aminés.</p> <p>Énantiomérisation, mélange racémique, diastéréoisomérisation (<i>Z/E</i>, deux atomes de carbone asymétriques).</p> <p>Conformation : rotation autour d'une liaison simple ; conformation la plus stable.</p>	<p>Reconnaître des espèces chirales à partir de leur représentation.</p> <p>Utiliser la représentation de Cram.</p> <p>Identifier les atomes de carbone asymétrique d'une molécule donnée.</p> <p>À partir d'un modèle moléculaire ou d'une représentation reconnaître si des molécules sont identiques, énantiomères ou diastéréoisomères.</p> <p><i>Visualiser, à partir d'un modèle moléculaire ou d'un logiciel de simulation, les différentes conformations d'une molécule.</i></p>

Résumé

Utilisation d'un logiciel de modélisation de molécules pour approcher les notions de conformation, chiralité, énantiomérisation et diastéréoisomérisation.

Mots clefs :

Chiralité, énantiomérisation, diastéréoisomérisation, carbone asymétrique, représentation de Cram, représentation en 3D, mélange racémique

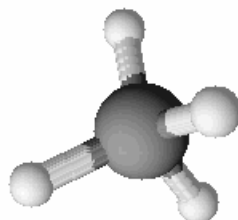
Utilisation d'un logiciel de modélisation – Énantiomérie

La problématique et le travail demandé

Quelle est la condition pour qu'une molécule possède un énantiomère ?

A l'aide du logiciel de modélisation des molécules « **ChemSketch** », valider ou non les différentes hypothèses émises.

Aides et questions en cours de séance



1. Partir de la représentation du méthane, cette molécule est-elle chirale ?
2. Chercher les éventuels plans ou centres de symétrie et conclure quant à la chiralité de la molécule.
3. Modifier cette molécule afin qu'elle devienne chirale.
4. On peut donner des exemples de molécules aux élèves qui n'auront aucune idée :
5. butan-2-ol ; méthylpropane ; diméthylpropane ; acide méthylpropanoïque ; acide 2-aminopropanoïque ou alanine.

En cas de besoin, il est possible de guider plus ou moins les élèves avec les questions suivantes :

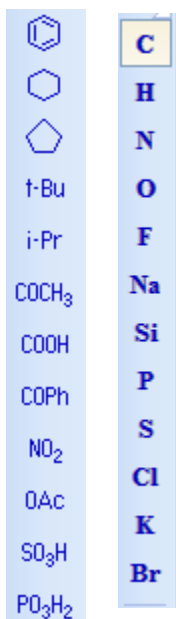
- Représenter en formule semi-développée les molécules.
- La molécule possède-t-elle un plan ou un centre de symétrie ?
- D'où provient la chiralité de ces molécules ?
- Représenter son image.

Pour cela, on schématisera un miroir plan et on représentera de part et d'autre de ce miroir, la molécule « objet » et la molécule « image ».

Il est également possible dans le logiciel d'obtenir directement l'image de la molécule par symétrie plane. Pour cela, dans l'onglet « **TOOLS** » choisir l'option « **Mirror** ».

6. Justifier alors la relation de chiralité existante entre les deux molécules, dites énantiomères l'une de l'autre.
7. Proposer enfin la représentation de deux molécules, l'une chirale et l'autre achirale en justifiant leur caractère (chiral ou achiral).

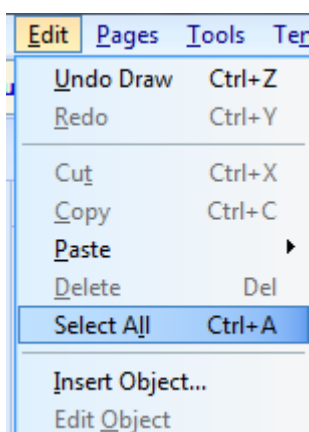
Le logiciel « ChemSketch »



En cliquant sur l'icône, on choisit l'atome ou groupe d'atomes à représenter.



Permet d'effacer un atome et de le remplacer ensuite par un autre atome choisi parmi la liste ci-contre.




Pour sélectionner une molécule afin de la représenter en trois dimensions, il faut cliquer dans le menu « Edit » puis « Select All ».

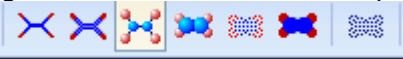
Ensuite il est possible de visionner la molécule dans l'espace de la manière suivante :



Permet de visualiser la molécule sélectionnée en représentation dans l'espace.

Une fois, en représentation spatiale, les icônes  permettent de déplacer la molécule et d'effectuer des rotations. Les élèves vont donc pouvoir percevoir la notion de conformation. Ceci permettra d'introduire le chapitre suivant sur la conformation et la stabilité des différents conformères.

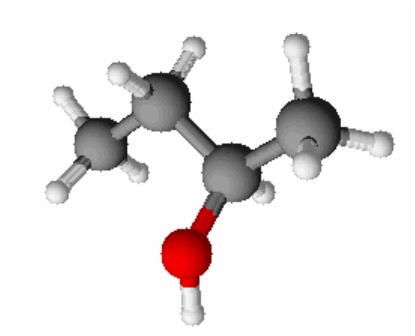
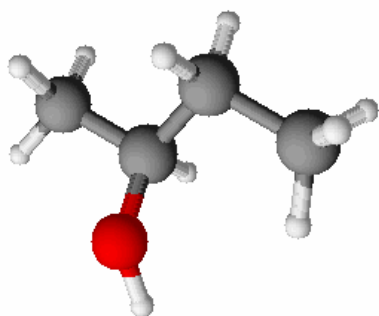
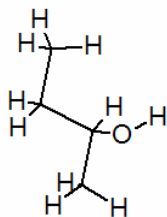
Les molécules représentées ci-dessous présentent des conformations différentes.

On peut également choisir le mode de représentation des atomes et des liaisons à l'aide des icônes suivants : 

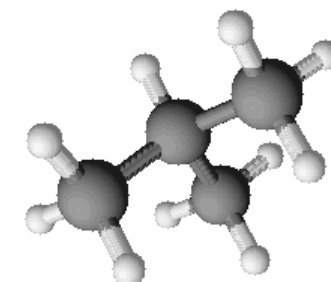
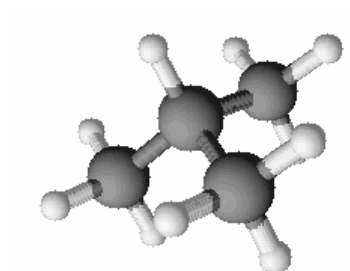
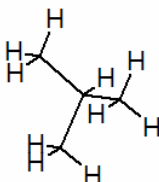
La représentation de l'image par symétrie plane de la molécule se fait à l'aide de l'icône .

Nous obtenons alors les représentations suivantes pour les molécules demandées précédemment :

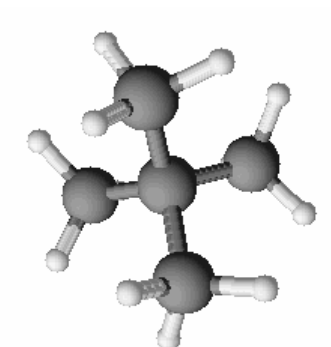
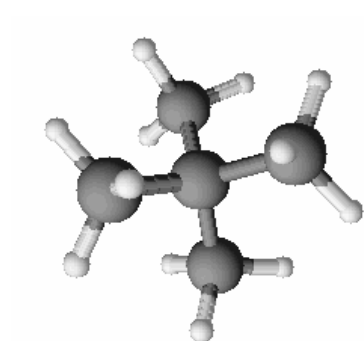
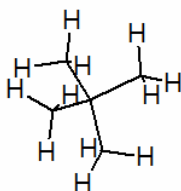
- Butan-2-ol :



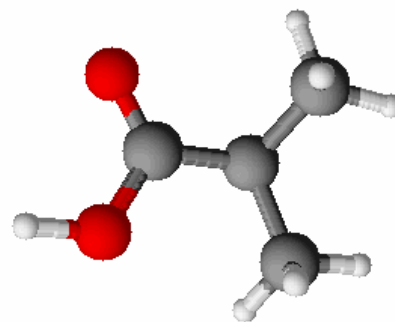
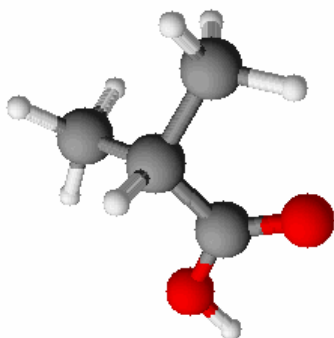
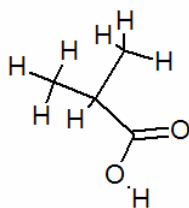
- Méthylpropane :



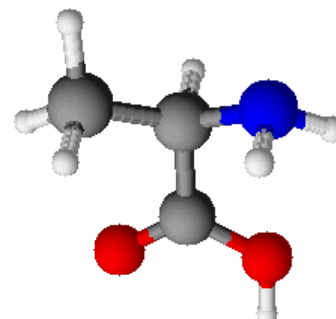
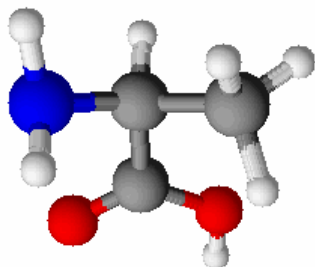
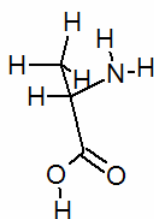
- Diméthylpropane :



- Acide méthylpropanoïque :



- Acide 2-aminopropanoïque ou alanine :



Diastéréoisomérisation

La problématique et le travail demandé.

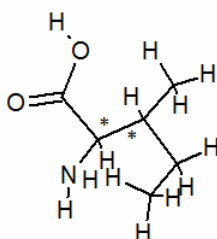
Une molécule comportant 2 atomes de carbone asymétriques est-elle nécessairement chirale ?

Aide et questions en cours de séance

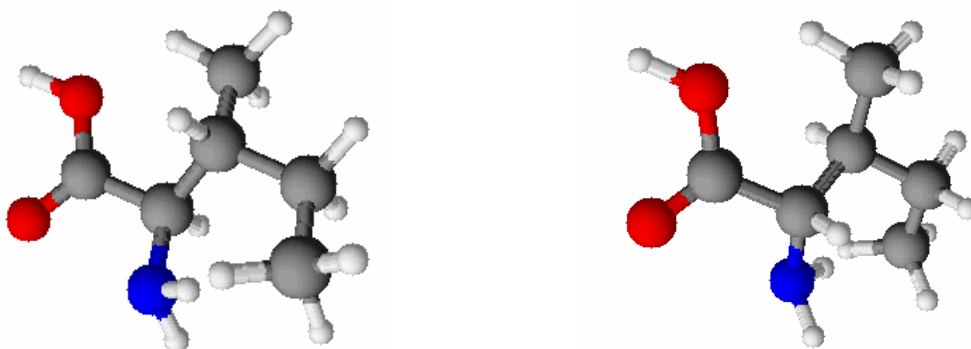
On peut laisser les élèves trouver des exemples de molécules comportant 2 atomes de carbone asymétriques, ou poser les questions suivantes pour les élèves en difficulté.

La notion à introduire est la diastéréoisomérisation, pour les élèves plus à l'aise, il est possible d'introduire le composé méso.

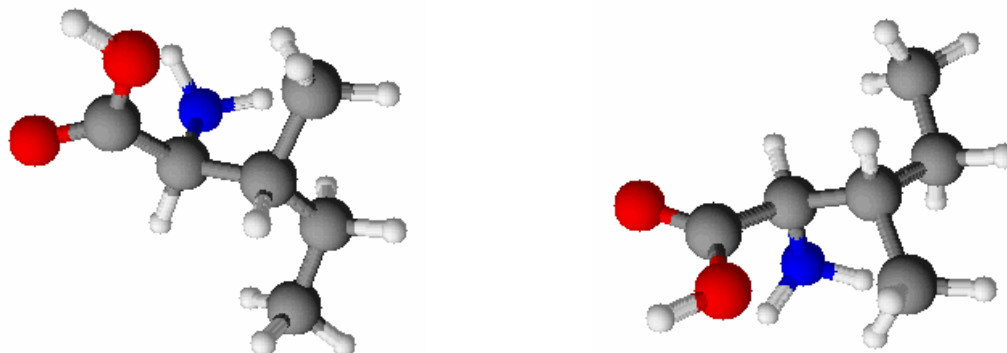
1. Pour la molécule d'acide 3-méthyl-2-aminopentanoïque, identifier les atomes de carbone asymétriques.



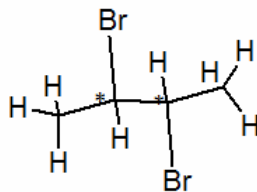
2. Représenter dans l'espace la molécule et son énantiomère.



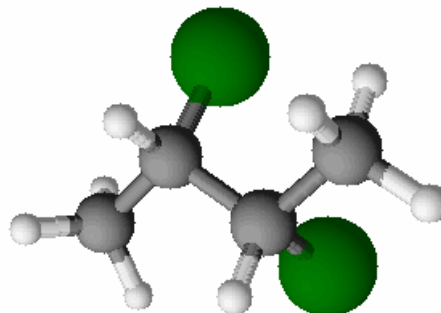
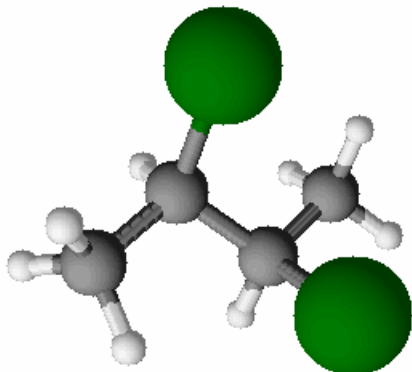
3. Existe-t-il un autre agencement dans l'espace conduisant à une molécule différente ? Cette molécule possède-t-elle un énantiomère ?



4. Pour la molécule 2,3-dibromobutane, identifier les atomes de carbone asymétriques.



5. Représenter dans l'espace la molécule et son énantiomère.



6. Existe-t-il un autre agencement dans l'espace conduisant à une molécule différente ? Cette molécule possède-t-elle un énantiomère ?

