

CH 6 : COULEUR DES MOLECULES ET STRUCTURE (Activité cours)

Partie I Représentation de Lewis des molécules, Structure dans l'espace des molécules, Isomérisation Z, E

NOTIONS ET CONTENUS	COMPETENCES ATTENDUES
- Représentation de Lewis des molécules, représentation de ces molécules dans l'espace, isomérisation de constitution, isomérisation Z, E.	- Utiliser un logiciel adapté (Avogadro) pour visualiser des molécules. - Utiliser un modèle moléculaire. - Savoir reconnaître une isomérisation.

I. DE L'ATOME A LA MOLECULE (Rappel du cours de seconde)

1) Structure électronique :

Elle consiste en la répartition des électrons sur les différentes couches électroniques K, L, M, ... (Rappel : la couche K accepte au maximum 2e-, L 8e-, M 8e-, N 18e-)

Structure électronique de quelques atomes :

Atome	${}^7_3\text{Li}$	${}^{12}_6\text{C}$	${}^{16}_8\text{O}$	${}^{35}_{17}\text{Cl}$	${}^{14}_7\text{N}$
Structure électronique	$(\text{K})^2(\text{L})^1$	$(\text{K})^2(\text{L})^4$	$(\text{K})^2(\text{L})^6$	$(\text{K})^2(\text{L})^8(\text{M})^7$	$(\text{K})^2(\text{L})^5$

2) Couche électronique externe :

La couche externe est la dernière couche remplie. **Elle contient les électrons de valence.**

Exemple : ${}^{24}_{12}\text{Mg} (\text{K})^2(\text{L})^8(\text{M})^2$ couche externe M qui contient 2 électrons.

Souligner la couche externe pour chaque atome du paragraphe 1.

3) Gaz nobles et règle de l'octet :

Les gaz nobles respectent **la règle de l'octet**, sauf l'**hélium** qui respecte la **règle du duet**.

Les atomes tendent à adopter la structure électronique stable des gaz nobles, c'est-à-dire à posséder 2 électrons (sur la couche K règle du duet), ou 8 électrons (Règle de l'octet) sur leur couche externe.

Structure électronique de quelques gaz nobles :

Atome	${}^4_2\text{He}$	${}^{20}_{10}\text{Ne}$	${}^{40}_{18}\text{Ar}$
Structure électronique	$(\text{K})^2$	$(\text{K})^2(\text{L})^8$	$(\text{K})^2(\text{L})^8(\text{M})^8$

4) Formule ou représentation de Lewis d'un atome :

Elle schématise la couche électronique **EXTERNE** d'un atome.

Rappel : Jusque 4 les électrons sont célibataires puis ils forment des paires appelées doublet non liant.

La valence d'un atome est le nombre de liaison que peut faire l'atome avec d'autres atomes, elle correspond aux nombres d'électrons célibataires.

Remarque : Cette représentation n'a pas de réalité puisque les atomes n'existent pas en tant que atomes seuls. Soient ils deviennent des ions soit ils s'associent avec d'autres atomes.

Formules de Lewis de quelques atomes :

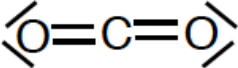
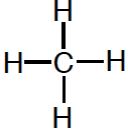
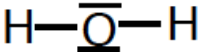
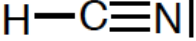
Atome	${}^1_1\text{H}$	${}^{12}_6\text{C}$	${}^{16}_8\text{O}$	${}^{35}_{17}\text{Cl}$	${}^{14}_7\text{N}$
Représentation Lewis	$\cdot\text{H}$	$\cdot\overset{\cdot}{\underset{\cdot}{\text{C}}}\cdot$	$\cdot\overset{\cdot}{\underset{\cdot}{\text{O}}}\cdot$	$\cdot\overset{\cdot}{\underset{\cdot}{\text{Cl}}}\cdot$	$\cdot\overset{\cdot}{\underset{\cdot}{\text{N}}}\cdot$
Valence de l'atome	Monovalent	Tétraivalent	Bivalent	Monovalent	trivalent

Un point indique un électron célibataire, un tiret indique un doublet non-liant.

5) Formation de molécules :

Les électrons célibataires de différents atomes s'associent entre eux pour former des **liaisons de covalences** entre atomes. **Une liaison covalente résulte de la mise en commun de deux électrons externes par et entre atomes, chaque atome apportant un électron.**

Exemple de représentation de Lewis de quelques molécules :


dioxyde de carbone CO ₂	méthane CH ₄	eau H ₂ O	cyanure d'hydrogène HCN
			

Q1. Donner les formules de Lewis des molécules de la **feuille réponse §1** :

II. GEOMETRIE DES MOLECULES

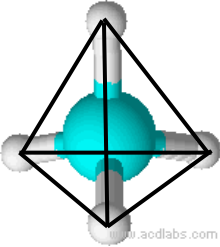
1) Cas du méthane CH₄ :

Ouvrir le logiciel Avogadro. Ouvrir le tutoriel_1.swf avec internet explorer ou Mozilla Fire Fox. Regarder plusieurs fois le tutoriel.

Construction de la molécule de méthane CH₄ : Cliquez sur le symbole , choisir l'élément carbone (6) dans la fenêtre de gauche, Cliquer dans la page blanche, CH₄ apparaît. Pour optimiser la géométrie de la molécule appuyer sur les

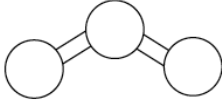
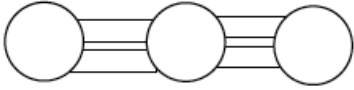
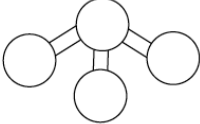
touches Ctrl + Alt + O. Cliquez sur le symbole  pour la faire pivoter et observer sa forme.

À l'aide de la boîte de modèles moléculaires, fabriquer la molécule de méthane.

	Nom de la forme géométrique Tétraèdre.
--	--

2) Autres exemples : (O : rouge ; N : bleu ; C : noir ; H : blanc) (Voir fiche géométrie des molécules).

À l'aide de la boîte de modèles moléculaires, déterminer les adjectifs décrivant la géométrie des molécules suivantes :

Représentation de Lewis	Nom de la géométrie	dessin
Eau H ₂ O	Coudée	
dioxyde de carbone CO ₂	Linéaire	
Ammoniac NH ₃	Pyramidale	

III. ISOMERIE

1) Isomérisation de constitution :

Des molécules sont **isomères** si elles possèdent la **même formule brute** mais des **formules semi-développées différentes**.

La formule développée est une formule de Lewis ne faisant pas apparaître les doublets non liants.

La formule semi-développée d'une molécule ne fait pas apparaître les liaisons avec l'hydrogène.

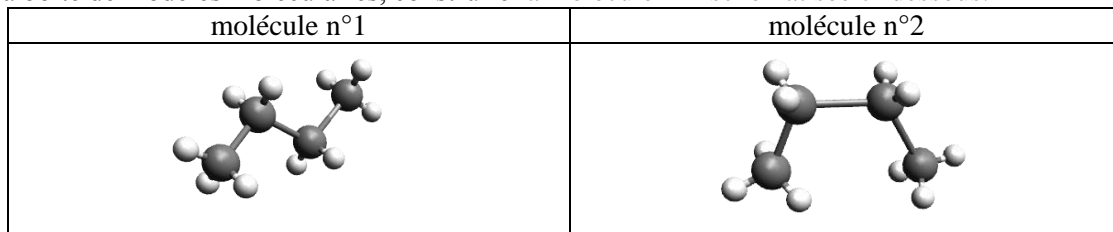
Donner les formules semi-développées de deux molécules isomères de formule brute C₂H₆O :

CH₃—CH₂—OH	CH₃—O—CH₃
---	--

Q 2. Donner les formules semi-développées de trois isomères de formule brute C₂H₄O, sur la feuille réponse.

2) Isomérisation spatiale Z/E

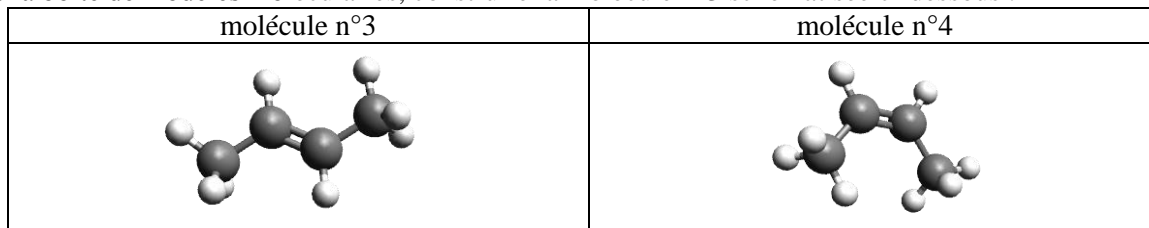
À l'aide de la boîte de modèles moléculaires, construire la molécule n°1 schématisée ci-dessous.



Comment la molécule n°1 peut-elle se transformer en molécule n°2 ?

Par libre rotation autour de la liaison carbone-carbone entre les carbones 2 et 3.

À l'aide de la boîte de modèles moléculaires, construire la molécule n°3 schématisée ci-dessous :

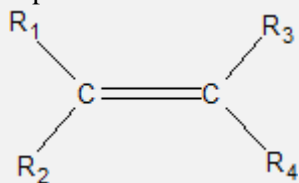


La molécule n°3 peut-elle se transformer en molécule n°4 ?

Non, il n'y a pas libre rotation autour de la liaison double carbone-carbone.

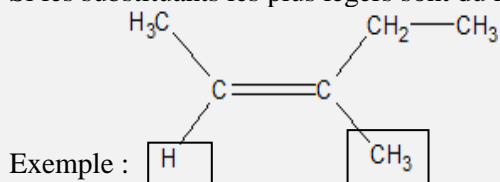
Définition de l'isomérisation Z/E :

Pour qu'une isomérisation Z/E existe : **1. la molécule doit contenir au moins une double liaison C = C** avec R1, R2, R3, R4 représentant des substituants (exemples : H, CH3, Cl, etc.)

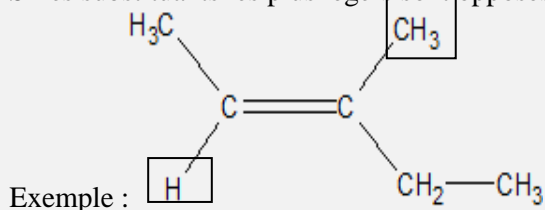


2. de plus, il faut que R1 ≠ R2 et que R3 ≠ R4.

Si les substituants les plus légers sont du même côté : isomère Z (zusammen)



Si les substituants les plus légers sont opposés : isomère E (entgegen)



Pourquoi les molécules n°1 et 2 ne présentent pas d'isomérisation Z/E ?

Car il n'y a pas de double liaison C-C.

Répondre aux questions 3.1. à 3.8. de la feuille réponse.

FEUILLE REPONSE

1. Représentation de Lewis des molécules :

eau oxygénée H ₂ O ₂	ammoniac NH ₃	diazote N ₂	méthylamine CH ₅ N
$\text{H}-\overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{\text{O}}}-\overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{\text{O}}}-\text{H}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{N} \\ \\ \text{H} \end{array}$	$ \text{N}\equiv\text{N} $	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \\ \text{H}-\text{C}-\text{N} \\ \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$

2. Isomérisation de constitution : Donner les formules semi-développées de trois isomères de formule brute C₂H₄O :

$\begin{array}{c} \text{CH}_3-\text{CH} \\ \\ \text{O} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{O} \\ / \quad \backslash \\ \text{CH}_2 \quad \text{CH}_2 \end{array}$	$\text{CH}_2=\text{CH}-\text{OH}$
--	--	-----------------------------------

3. ISOMERIE Z/E :

3.1. À l'aide du logiciel Avogadro fabriquer les molécules n°3 puis n°4. Faire valider par le professeur.

3.2. Le bromostyrène est une molécule organique dont les isomères E et Z ont respectivement l'odeur de jasmin et d'essence.

a) Ouvrir le fichier bromostyreneA.cml, quelle est son odeur ? Justifier.

Groupes légers opposés : isomère E, odeur de jasmin.

b) Ouvrir le fichier bromostyreneB.cml, quelle est son odeur ? Justifier.

Groupes légers même coté : isomère Z, odeur d'essence.

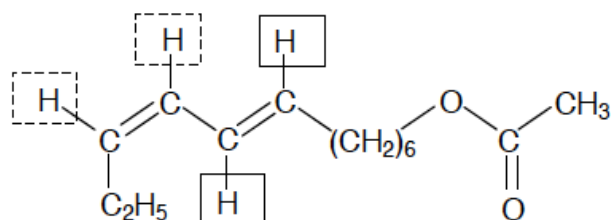
3.3. La molécule ci-dessous est une phéromone qui permet d'attirer des papillons mâles dans des pièges, limitant ainsi la prolifération de cette espèce nuisible pour les pins.

3.4. Combien de liaisons doubles possède cette molécule ?

Trois, deux C=C, une C=O.

3.5. Quelles liaisons doubles présentent une isomérisation Z/E ?

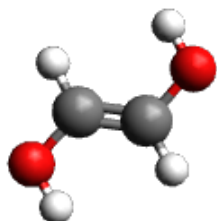
Les deux liaisons C=C.



3.6. Ces liaisons doubles sont-elles Z ou E ?

La première à gauche est un isomère Z, la deuxième un isomère E. Voir schéma ci-dessus.

3.7. À l'aide du logiciel Avogadro, construire une molécule présentant une isomérisation Z/E. Faire valider par le professeur. La dessiner.



3.8. À l'aide du logiciel Avogadro, construire une molécule comportant une double liaison C=C et ne présentant pas une isomérisation Z/E. Faire valider par le professeur. La dessiner.

