

Représentation des entités chimiques et géométrie spatiale

Fiche n°

I Formule brute

La nature et le nombre des atomes (ainsi que la charge globale pour les ions) sont indiqués dans une formule brute.

Exemples : $C_4H_{10}O$:
 $Cr_2O_7^{2-}$:

II Représentations rendant compte de l'enchaînement des atomes dans l'édifice

Nom de la représentation	Qu'est-ce qui est représenté sur cette représentation ?	Exemple 1	Exemple 2	Exemple 3
Structure de Lewis	Tous les doublets sont représentés (liants et non liants)			
Formule développée	Tous les doublets liants sont représentés mais pas les doublets non liants.			
Formule semi-développée	Par rapport à la formule développée, les liaisons avec des H ne sont pas représentées et les H sont accolés aux atomes auxquels ils sont liés.			
Formule topologique	Par rapport à la formule semi-développée, on supprime : - tous les C qui apparaissent dans la molécule, les chaînes carbonées étant alors représentées par des lignes brisées, - ainsi que les H <u>reliés aux C seulement</u> .	 (formule brute :)	 (formule brute :)	 (formule brute :)

III Représentation rendant compte de l'enchaînement spatial des atomes

1) Rappel sur la géométrie spatiale autour d'un atome (respectant la règle de l'octet ou du duet pour H)

* On écrit la structure de Lewis du composé

* Pour l'atome considéré, on additionne le nombre X de liaisons dans lesquelles il rentre en jeu (à ne pas confondre avec le nombre de doublets liants) et le nombre E de doublet non liant :

- si $X + E = 2$, si une liaison : atome en bout de chaîne ; si 2 liaisons, géométrie (180° entre les liaisons) autour de l'atome

- si $X + E = 3$, si une liaison : atome en bout de chaîne ; si 2 liaisons, géométrie à ; si 3 liaisons, géométrie

- si $X + E = 4$, si une liaison : atome en bout de chaîne ; si 2 liaisons, géométrie à ; si 3 liaisons, géométrie (angle de entre liaisons) ; si 4 liaisons, géométrie (angle de entre liaisons)

Dans les exemples du II ci-dessus, donner la géométrie autour :

- Du N de l'exemple 1
- D'un C de l'exemple 1
- Du C de la fonction carboxyle de l'exemple 2
- Du O de la fonction hydroxyle de l'exemple 3
- Du Cl de l'exemple 3
- D'un des C de la double liaison de l'exemple 3

2) Représentation/modèle de Cram

Dans une représentation de Cram, on s'intéresse à l'enchaînement spatial des atomes ou groupes d'atomes autour d'un atome défini (ou plusieurs si on le souhaite) afin de rendre compte de la géométrie autour de lui.

Le maximum d'atomes est représenté dans le plan de la feuille en respectant les angles. Ainsi, la représentation de Cram est véritablement utile dans les cas où $X + E = \dots\dots$ avec $X >$

Pour un atome dans le plan de la feuille, les atomes ou groupes d'atomes qui lui sont liés et qui sont en avant du plan de la feuille, sont reliés à lui par un triangle noir plein, pointe vers le plan de la feuille.

Pour un atome dans le plan de la feuille, les atomes ou groupes d'atomes qui lui sont liés et qui sont en arrière du plan de la feuille, sont reliés à lui par un triangle noir hachuré, pointe vers le plan de la feuille.

La vision en perspective ainsi obtenue doit faire part le plus possible de la réalité physique concernant les angles de cette perspectives, tout en faisant visualiser tous les atomes ou groupe d'atomes

Exemples : méthane : structure de Lewis :

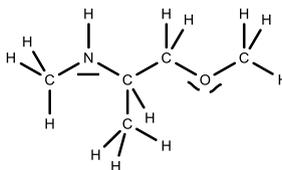


Modèle de Cram :

Propane : structure de Lewis :

Modèle de Cram :

Exemple 1 du II avec le H de N pointant vers l'avant, et pour le C à sa droite, le CH₃ pointant vers l'avant et le H vers l'arrière : structure de Lewis :



Modèle de Cram version formule développée :

Modèle de Cram version formule semi-développée :

Modèle de Cram version formule stopologique :

Exemple 2 du II : structure de Lewis :

Modèle de Cram :

Exemple 3 du II : structure de Lewis :

Modèle de Cram :

III Notion de chiralité

1) Définition

Par définition, un objet est dit chiral s'il n'est pas superposable à son image donnée par un miroir plan. Dans le cas contraire, il est dit achiral.

Les objets suivants sont-ils chiraux (entourer en rouge ceux qui le sont) : une sphère, un triangle équilatéral, une main, un

escalier en colimaçon avec rampe, la chapelle du lycée Hoche, une tasse unie comme celle-ci :  , la lettre **E**, une pièce de

monnaie de 2 euros  , le drapeau français, un yin yang  , une visse.

Propriété : un objet qui possède au moins ou un ne peut être chiral. Il est forcément achiral.

2) Molécules chirales et utilité de la représentation de Cram

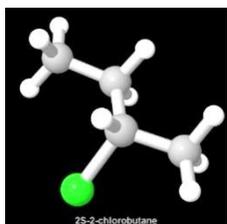
Une molécule est ainsi dite chirale si elle n'est pas superposable à son image donnée par un miroir plan. Dans le cas contraire, elle est dite achirale.

Attention, il faut prendre en compte la libre rotation des simples liaisons pour être certain que l'image ne soit pas superposable à la molécule d'origine.

Les molécules suivantes sont-elles chirales ? eau,

méthane,

dichlorométhane,

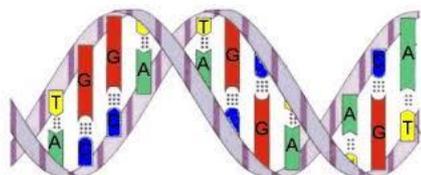


2-chlorobutane représenté ici :

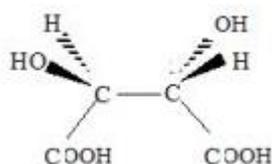
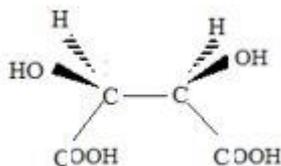
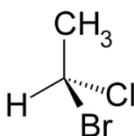
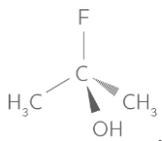
exemple 1 du II comme dessiné dans le paragraphe II,

exemple 2 du II,

exemple 3 du II,

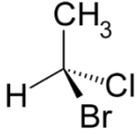


molécule d'ADN :



3) Carbone asymétrique et chiralité

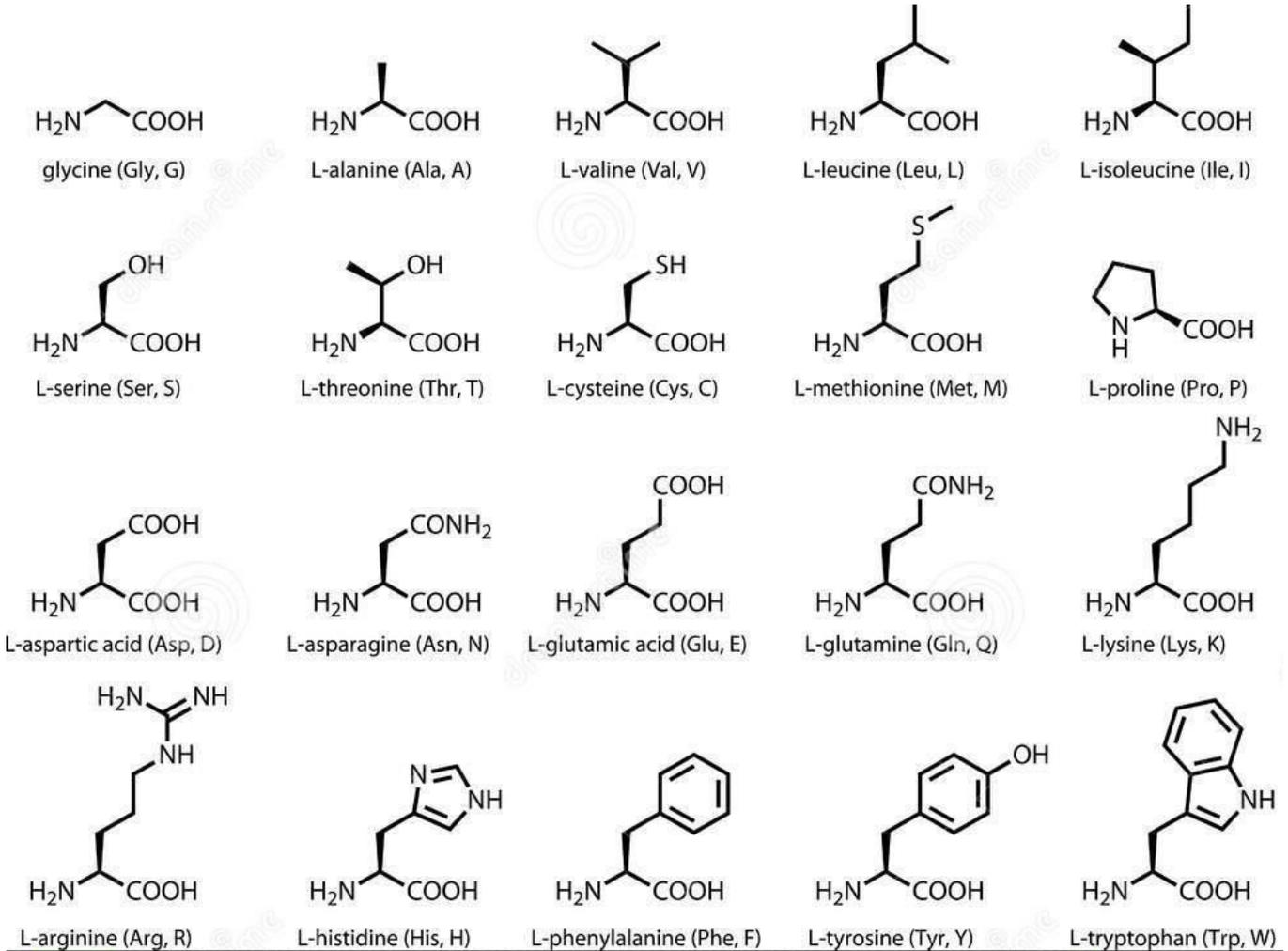
Parmi les atomes de carbone des molécules de cette fiche, certains sont reliés à 4 atomes ou groupes d'atomes différents. Ils sont dits « asymétriques ». On place une petite étoile à côté d'un carbone asymétrique lorsqu'on souhaite indiquer son asymétrie.



Exemple :

Propriété : une molécule ne possédant qu'un seul carbone asymétrique est obligatoirement une molécule
 Mais si la molécule possède plus de deux carbones asymétriques, il n'y a pas de résultat général.

Le carbone de la fonction amine de 19 des 20 acides α -aminés rencontrés chez tous les êtres vivants est chiral :



Source : <http://fr.dreamstime.com/image-libre-de-droits-les-22-acides-amin%C3%A9s-normaux-structures-chimiques-image25479916>

On remarque que les 19 AA correspondants sont tous chiraux et que l'agencement spatial autour du C portant la chaîne latérale est toujours le même : si la fonction amine est dans le même plan de la feuille que la fonction acide carboxylique et que le carbone asymétrique avec le groupement amino vers le bas à gauche et le groupement carboxyle en bas à droite par rapport au carbone C*, la chaîne latérale est vers et le H porté par le carbone asymétrique est vers
 De manière générale :

C'est pour cela que l'on trouve toujours la même lettre L placé devant leurs noms.

C'est une des plus grandes et des plus belles énigmes actuelles du monde vivant.

Source : <http://fr.dreamstime.com/image-libre-de-droits-les-22-acides-amin%C3%A9s-normaux-structures-chimiques-image25479916>

IV Qu'en est-il de la structure de Lewis des ions moléculaires ?

1) Exemple d'un anion : l'ion HO⁻, ion

Rappel :

Z(H) = 1 donc la configuration électronique de l'atome de H, non chargé donc ayant électron(s) à l'état fondamental est Le nombre d'électrons de valence est donc :

Z(O) = 8 donc
.....

Il y a donc 1 électron de valence apporté par l'atome de H et 6 électrons de valence apportés par l'atome de O. Mais comme l'ion est chargé négativement, cela signifie qu'un électron de valence s'ajoute à nouveau. On trouve donc au final électrons de valence. En déduire une structure de Lewis respectant la règle du duet (pour H) et la règle de l'octet (pour O) de l'ion HO⁻.

Où se trouve la charge - sur l'ion ? Pourquoi ? Pour ne pas la confondre avec un doublet d'électrons, on l'entoure.

Lorsqu'autour d'un atome, un doublet liant normalement présent dans une molécule devient un doublet non liant sur cet atome, celui-ci est affecté d'une charge négative - .

2) Exemple d'un cation : l'ion H₃O⁺, ion

Lorsqu'autour d'un atome, un doublet
.....
.....

3) Autres exemples classiques

Donner la structure de Lewis en justifiant complètement et succinctement de l'ion carbonate CO₃²⁻, de l'ion ammonium NH₄⁺, de l'ion méthanoate HCOO⁻ (dérivé de l'acide méthanoïque) puis de l'ion propanoate par identification. Terminer par l'ion chlorure Cl⁻.

4) Le cas particulier de l'ion H⁺, ion