

CONFORMATIONS ET CONFIGURATIONS DE MOLÉCULES



Capacité(s) contextualisée(s) mise(s) en jeu durant l'activité :

- ✓ Visualiser, à partir d'un modèle moléculaire ou d'un logiciel de simulation, les différentes conformations d'une molécule.

I. But

- Visualiser les différentes conformations d'une molécule et déterminer la plus stable.
- Visualiser différentes configurations d'une molécule.

II. Documents

(s'approprier)



II.1. Doc.1 : Représentation de Newman

La projection de Newman est une technique permettant de représenter facilement les différentes conformations d'une molécule.

Comment représenter une conformation ?

Dans un premier temps, on choisit le côté par lequel on va regarder la molécule. Cette première étape est symbolisée sur le schéma par l'œil (**Fig.1**). Puis on représente les trois liaisons du carbone, le plus proche de l'observateur, par trois segments formant des angles de 120° . Le second carbone, éclipsé par le premier, est représenté par un cercle. Les trois segments, représentant les liaisons du second carbone, ne sont pas dessinés à l'intérieur du cercle. Pour représenter une autre conformation, il suffit de tourner autour de la liaison centrale. Cette opération est symbolisée par la flèche verte.

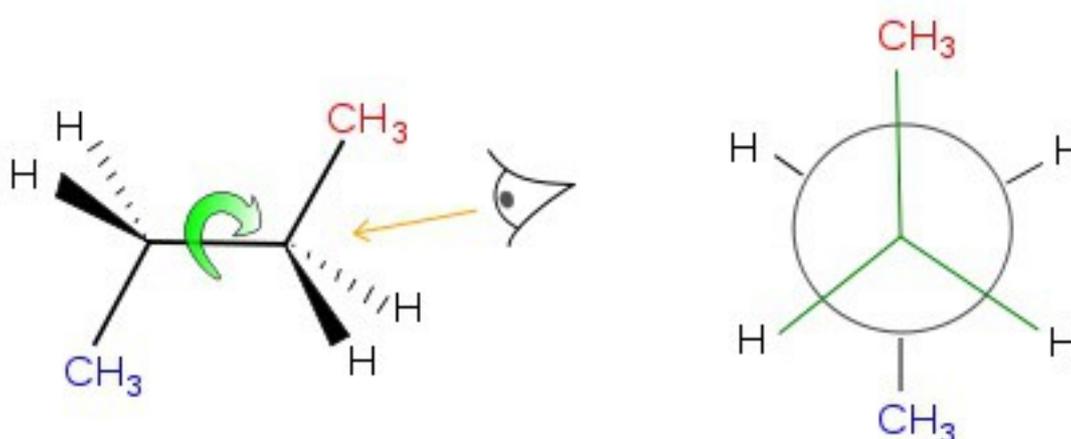
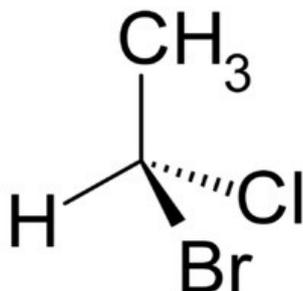


Fig.1 : Représentation de Cram et de Newman d'une molécule de butane

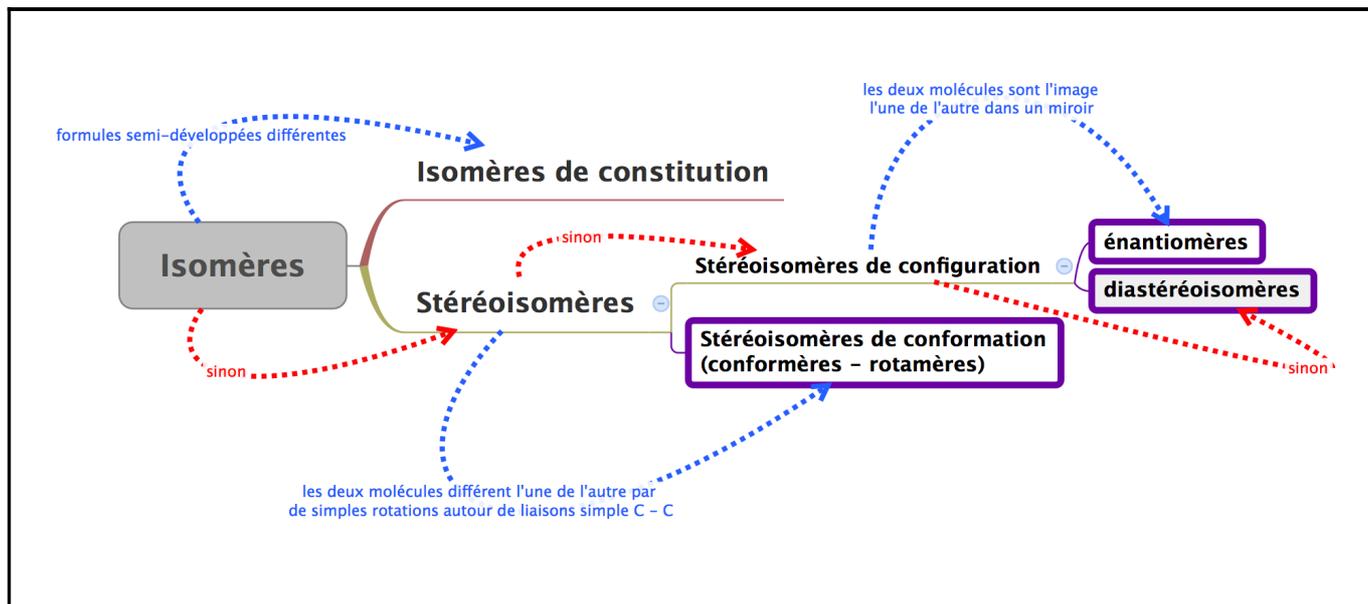
II.2. Doc.2 : Carbone asymétrique

En chimie organique, un atome de carbone asymétrique est un carbone tétraédrique (c'est-à-dire lié à quatre atomes ou groupes d'atomes) qui possède quatre substituants de natures différentes.



Une structure possédant un **unique carbone asymétrique** est **chirale**, c'est-à-dire qu'elle ne peut pas se superposer à son image dans un miroir plan. Deux molécules possédant une telle relation sont appelées des **énantiomères**.

II.3. Doc.3 : Isomères d'une molécule



III. Conformations d'alcane

III.1. Manipulations

(réaliser)



- Construire les modèles moléculaires de l'éthane et du butane.
- Construire ces molécules dans le logiciel de modélisation **Avogadro**.
- Représenter à l'aide des représentations de Cram et Newman plusieurs conformations des molécules d'éthane et de butane.

III.2. Exploitation des résultats

(analyser, valider)



- Pour chaque molécule, quelle est d'après vous la conformation la plus stable ? Pourquoi ?
- Utiliser les fonctionnalités du logiciel **Avogadro** pour vérifier vos hypothèses.
- Conclure.

Appel du professeur

III.3. Manipulations

(réaliser)



- Construire le modèle moléculaire du cyclohexane.
- Construire cette molécule dans le logiciel de modélisation **Avogadro**.
- Retrouver à l'aide de ce modèle moléculaire les deux conformations possibles pour cette molécule.

III.4. Exploitation des résultats

(analyser, valider)



- Laquelle de ces deux conformations est la plus stable ? Pourquoi ?
- Utiliser les fonctionnalités du logiciel **Avogadro** pour vérifier vos hypothèses.
- Conclure.

Appel du professeur

IV. Stéréoisomères de l'alanine

L'alanine est un des 22 acides aminés codés génétiquement. Elle est hydrophobe, possède un groupement méthyle latéral, et est le deuxième plus petit acide aminé parmi les 22 derrière la glycine. La dénomination IUPAC est acide 2-aminopropanoïque ou acide α -aminopropionique.

IV.1. Manipulations

(réaliser)



- Construire le modèle moléculaire de l'alanine.
- Construire cette molécule dans le logiciel de modélisation **Avogadro**.
- Construire le modèle moléculaire du stéréoisomère de configuration de l'alanine.
- Construire cette molécule dans le logiciel de modélisation **Avogadro**.
- Représenter ces deux molécules à l'aide de la représentation de Cram.

Appel du professeur

IV.2. Exploitation des résultats

(analyser, valider)



- Quelle particularité présente cette molécule ?
- Comment qualifie-t-on ces deux stéréoisomères ? Pourquoi ?

Appel du professeur



Pour les plus rapides...

- Trouver, à l'aide du modèle moléculaire et du logiciel de modélisation **Avogadro**, les différents stéréoisomères de l'acide 3-amino, 2-hydroxybutanoïque.
- Représenter ces molécules à l'aide de la représentation de Cram.
- Quelle particularité présentent ces molécules ?
- Déterminer la relation de stéréoisomérisation liant ces molécules deux par deux.