

UTILISATION DE MODELES MOLECULAIRES

Introduction : La réactivité chimique des molécules présentes dans les médicaments ainsi que leur éventuelle activité biologique dépendent pour une large part de leur géométrie (structure dans l'espace). Cette géométrie est conditionnée par l'orientation dans l'espace des liaisons entre atomes.

But du TP : - utiliser la représentation de Lewis

- Représenter des molécules dans l'espace à l'aide des modèles moléculaires.

I- Différents types de modèles moléculaires.

1- Le modèle éclaté.

Chaque atome est représenté par une sphère (une boule). Les sphères sont liées les unes aux autres par des tiges représentant les doublets de liaisons (les doublets liants) ou les liaisons covalentes.

La longueur des tiges est proportionnelle à la distance entre les noyaux des atomes liés entre eux.

2- Le modèle compact.

Dans ce modèle, plus proche de la réalité, les sphères sont en contact les unes avec les autres, mais on ne peut pas distinguer le nombre de liaisons que deux atomes forment entre eux.

3- Couleurs représentatives.

Compléter le tableau.

Élément chimique	H	C	N	O	Cl
Couleur	Blanc	Noir	Bleu	Rouge	Vert

II- Application. Utilisation des modèles moléculaires.

1- Méthode

- Ecrire le nom et la formule brute de la molécule.
- Ecrire la configuration électronique de chaque atome.
- Trouver le nombre d'électrons n_e de la couche externe de chaque atome.
- En déduire le nombre n_l de liaison(s) covalente(s) que doit établir chaque atome pour acquérir une structure en octet ou en duet.
- Trouver le nombre total n_t d'électrons externes de la molécule en additionnant tous les n_e des atomes de la molécule.
- Trouver le nombre total $n_d = \frac{n_t}{2}$ de doublets liants et non liants (nombre de doublets externes).
- Donner la représentation de Lewis de la molécule. Pour cela, répartir les doublets de la molécule en doublets liants (liaisons covalentes) ou en doublets non liants en respectant :
 - La règle du « duet » pour l'atome d'hydrogène.
 - La règle de l'octet pour les autres atomes.
- Représenter la molécule en utilisant le modèle moléculaire éclaté puis compact (respecter les angles et la géométrie dans l'espace).

2- Molécule de chlorure d'hydrogène (fait en cours avec le professeur) :

Reprendre les résultats vus en cours et compléter le tableau puis représenter la molécule avec les modèles moléculaires.

Molécule	Nom : chlorure d'hydrogène	Formule : HCl
Atomes	H	Cl
Configuration électronique		
n_e		
n_l		
n_t		
n_d		
Répartition des doublets et nature des doublets		

Pour la suite, si on le désire, on pourra s'aider de tableaux similaires afin d'appliquer la méthode énoncée ci-dessus.

- 3- Molécule de dihydrogène H_2
- 4- Molécule d'eau H_2O
- 5- Molécule d'ammoniac NH_3
- 6- Molécule de méthane CH_4
- 7- Molécule de dioxyde de carbone CO_2

III- Isomérisation et médicament :

En lisant une revue, Noémie a appris que la molécule C_2H_6O était un biocarburant de la famille des éthers. Il est appelé méthoxyméthane, ou éther méthylique. Il est issu de la transformation de matières végétales et assimilé à une source d'énergie renouvelable car ses émissions de dioxyde de carbone sont inférieures de 95 % à celles du gazole.

Son camarade Tom est surpris, car il a retenu dans son cours de chimie que le médicament qui permet de désinfecter les plaies, l'alcool à 90°C, est une solution d'un alcool appelé éthanol et ayant la même formule C_2H_6O .

Investigation : Comment savoir si les deux élèves parlent de la même molécule ?

Validation :

- a) Rechercher dans le texte le nom des molécules de formule C_2H_6O évoquées par les deux élèves.
- b) En utilisant une boîte de modèles moléculaires construire les deux molécules.
- c) Ecrire la formule développée de ces deux molécules.
- d) Dans la molécule à laquelle pense Tom, l'atome d'oxygène est lié à un atome de carbone et à un atome d'hydrogène. Quelle est la position de l'atome d'oxygène dans l'autre molécule ? Identifier les deux molécules.