

QUELS SONT LES NOMS ET LES FORMES SPATIALES DE CES MOLÉCULES ?**Objectifs**

Connaissant la structure de Lewis (donc l'enchaînement carboné) de différents composés organiques, on cherchera à déterminer leur nom normalisé et leur forme spatiale.

On se propose d'étudier les molécules des hydrocarbures pouvant contenir 1 atome de carbone puis 2, 3 etc. jusque 6 puis les composés organiques comportant 1 puis 2 atomes d'oxygène et jusqu'à 4 atomes de carbone puis de déterminer le nom normalisé des composés correspondant et leur forme spatiale.

Pour cela, on utilise le logiciel gratuit ChemSketch téléchargeable sur le site : <http://www.acdlabs.com/>. Ce logiciel construit les molécules en respectant les règles de l'octet et du duet. Par le calcul, il optimise les interactions entre les atomes d'une molécule afin de représenter la structure la plus stable de la molécule.

- Lancer le logiciel ChemSketch par : Démarrer => Programme => ACDLabs => ChemSketch
- S'assurer que le logiciel fonctionne en mode Structure (en haut à gauche)
- Dans le menu déroulant *ACD/Labs*, cocher *3Dviewer* si nécessaire.

Une nouvelle fenêtre apparaît, on peut basculer entre les 2 fenêtres par les icônes en bas à gauche Chemsk et 3D

I- Étude des hydrocarbures**ALCANES****a) étude de la structure géométrique****1) avec un atome de carbone**

- Dans le menu vertical à gauche de l'écran, sélectionner l'élément C et cliquer dans la fenêtre de travail. Répéter l'opération pour créer une deuxième molécule en un autre endroit de la fenêtre.
- Puis sélectionner l'élément H. Sur la deuxième molécule, à partir de l'élément C, tirer en maintenant la souris. Répéter 4 fois l'opération (donc 5 H au total !) : observations ?
- Sélectionner la première molécule correctement écrite avec l'outil Lasso.

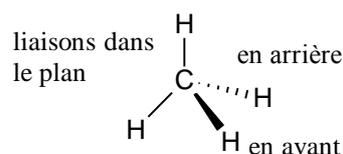
Dans le menu déroulant *Tools*, sélectionner *3D Structure Optimization* ou cliquer sur l'icône 

Avec la souris, déplacer la molécule dans toutes les directions

- Cliquer sur l'icône Copy to 3D (en bas à gauche)
- Par les icônes sous les menus déroulant, choisir les différents modes de représentation possibles de la molécule (en passant sur l'icône avec la souris, le nom de la représentation s'affiche)
- En mode "Balls and Sticks", sélectionner l'icône "Angle between bonds" Sélectionner ensuite 1 atome de H, l'atome de C et un autre atome H : l'angle s'affiche en bas à gauche.

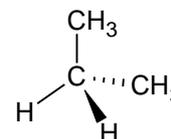
Remarque : Noter que l'écriture de la formule de Lewis (respect de la règle de l'octet pour C et du duet pour H) ne présume en rien de la disposition spatiale de la molécule. Pour rendre compte de la disposition spatiale, il faut utiliser des modes de représentation spécifique.

La représentation de Cram permet de rendre compte de la disposition tétraédrique autour d'un atome de C..



Représentation de la molécule de méthane.

Lorsque la molécule comporte plusieurs atomes de carbone, on ne représente qu'un seul atome C en représentation de Cram, le reste de la molécule est représentée en formule semi-développée.



Représentation de la molécule de propane.

- Compléter le tableau-réponses. (à faire au fur et à mesure de la progression de la feuille énoncé)

Première S

2) Avec deux atomes de carbone

- Construire une molécule comportant deux atomes de carbone avec l'outil C puis une seconde en utilisant la construction H par H.
- Avec la molécule construite par le logiciel, demander la représentation 3D (Menu **Tools**, puis **3D Structure**

Optimization ou cliquer sur l'icône 

- Avec la molécule construite H par H, demander la représentation 3D

Les deux molécules obtenues ont-elles la même structure dans l'espace ?

- Dans chaque cas, après être passé par **Copy to 3D**, regarder les valeurs des angles de torsion (sélectionner les 2 C et deux H respectivement sur chaque C, commencer par sélectionner H).
- Lorsque ces mesures sont effectuées, pour la molécule construite par le logiciel, dans la fenêtre 3D, cliquer sur le bouton 3D Optimization. En observant le résultat conclure sur la forme spatiale la plus favorable.

3) Avec trois atomes de carbone

- Construire la molécule en utilisant l'outil C.
- Compléter le tableau-réponses.

4) Avec 4, 5 et 6 atomes de carbone

- Construire la molécule en utilisant l'outil C, mais en notant les différentes possibilités d'enchaînement des atomes de carbone.
- Compléter le tableau-réponses.
- Dans chaque cas, combien obtient-on de molécules isomères différentes ? (Préciser le nom normalisé de chaque isomère)

Si tous les atomes de C de la chaîne n'apparaissent pas :

- dessiner une molécule (par exemple le propane)
- sélectionner le bouton **Select/Move** (rond avec flèche centripète Sud-Est... situé le plus à gauche)
- sélectionner un C et cliquer
- une fenêtre **Properties** apparaît
- sélectionner **Common** puis **Show Carbon**, valider **All** puis **Set Default**

Ainsi par défaut, tous les atomes de carbone seront dessinés.

Rappel : des isomères sont des molécules qui ont des formules brutes identiques mais qui correspondent à des espèces chimiques différentes.

b) Nomenclature (à n'utiliser que pour les molécules les plus complexes)

- Sélectionner la molécule avec l'outil **Lasso**
- Puis cliquer sur l'icône  ou Menu **Tools**, puis **Generate** puis **Name for structure**

Remarque : il est préférable de trouver d'abord le nom français en utilisant les règles usuelles de nomenclature puis de vérifier avec l'outil de nomenclature de Chemskech

ALCENES

On se propose d'étudier les hydrocarbures avec une liaison double; pour cela, on partira des molécules d'alcanes trouvés précédemment et on transformera une liaison simple en liaison double : il suffit, après avoir sélectionné l'élément carbone (menu d'élément à gauche), de sélectionner une liaison sur une molécule d'alcane construite puis de cliquer. On peut ainsi transformer liaison simple => liaison double => liaison triple => liaison simple)

a) étude de la structure géométrique

- Déterminer ainsi les structures de Lewis puis les structures spatiales de tous les alcènes comportant au maximum 5 atomes de carbone.
- Mesurer les angles des liaisons autour d'un atome de carbone impliqué dans une double liaison.
- Pour les molécules comportant 3,4 et 5 atomes de carbone, combien obtient-on d'isomères possibles ?
- Combien le but-2-ène, le pent-2-ène ont-ils d'isomères ayant le même enchaînement carboné ? Expliquer ce cas d'isomérisation.
- Compléter le tableau-réponses.

b) nomenclature : Déterminer les noms des différentes molécules obtenues.

Remarque : il est préférable de trouver d'abord le nom français en utilisant les règles usuelles de nomenclature puis de vérifier avec l'outil de nomenclature de Chemskech

ALCOOL

On se propose d'étudier les composés organiques ayant un groupe hydroxyle -OH ; pour cela, on partira des molécules d'alcanes trouvés précédemment et après avoir sélectionné l'élément oxygène (menu d'élément à gauche) d'ajouter ce O sur un carbone d'une molécule d'alcane construite.

a) Étude de la structure géométrique

- Déterminer ainsi les structures de Lewis puis les structures spatiales de tous les alcools comportant au maximum 4 atomes de carbone.
- Compléter le tableau-réponses.
- Pour 3 et 4 atomes de carbone, combien obtient-on d'isomères possibles ?

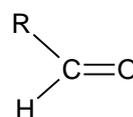
b) Nomenclature : Déterminer les noms des différentes molécules obtenues.

Remarque : il est préférable de trouver d'abord le nom français en utilisant les règles usuelles de nomenclature.

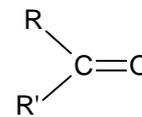
ALDÉHYDE et CÉTONE

On se propose d'étudier les composés organiques ayant un groupe carbonyle C=O.

Aldéhyde et cétone se différencient par les structures ci-dessous :



aldéhyde



cétone

a) Étude de la structure géométrique

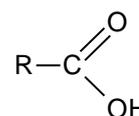
- Déterminer ainsi les structures de Lewis puis les structures spatiales de tous les aldéhydes et cétones comportant au maximum 4 atomes de carbone. Pour construire les molécules, utiliser l'outil **Radical**, sélectionner dans le tableau le bouton **CHO** (formyl), puis, si nécessaire, utiliser le bouton **élément C**.
- Pour 3 et 4 atomes de carbone, combien obtient-on d'isomères possibles ?
- Compléter le tableau-réponses.

b) Nomenclature : Déterminer les noms des différentes molécules obtenues.

Remarque : il est préférable de trouver le nom français en utilisant les règles usuelles de nomenclature.

ACIDE CARBOXYLIQUE

On se propose d'étudier les composés organiques ayant un groupe carboxyle COOH.



Structure générale d'un acide carboxylique :

a) Étude de la structure géométrique

- Déterminer ainsi les structures de Lewis puis les structures spatiales de tous les acides comportant au maximum 4 atomes de carbone. Pour construire les molécules, utiliser l'outil **Radical**, sélectionner dans le tableau le bouton **COOH** (carboxyl), puis, si nécessaire, utiliser le bouton **élément C**.
- Pour 3 et 4 atomes de carbone, combien obtient-on d'isomères possibles ?
- Compléter le tableau-réponses.

b) Nomenclature: Déterminer les noms des différentes molécules obtenues.

Remarque : il est préférable de trouver le nom français en utilisant les règles usuelles de nomenclature.

QUELS SONT LES NOMS ET LES FORMES SPATIALES DE CES MOLÉCULES ?

I- Hydrocarbures (Ne pas remplir les cases en grisé)

ALCANES

Rem : quand il y a plusieurs isomères, préciser les isomères !

Nombre d'atomes de carbone	Nom de l'alcane	Formule brute	Formule de Lewis ou formule semi-développée*	Écriture topologique	Représentation de Cram
1 atome					
2 atomes					
3 atomes					
4 atomes (préciser les différentes possibilités)					
5 atomes (préciser les différentes possibilités)					

* Formule de Lewis pour les deux premiers et semi-développée pour les suivants.

Forme spatiale

Angle entre les liaisons :

Angle de torsion H-C-C-H après optimisation (molécule à 2 atomes de carbone) :

ALCÈNES*Rem : quand il y a plusieurs isomères, préciser les isomères*

Nombre d'atomes de carbone	Nom de l'alcène	Formule brute	Formule de Lewis ou formule semi-développée*	Écriture topologique
2 atomes				
3 atomes				
4 atomes				
5 atomes				

* Formule de Lewis pour les deux premiers et semi-développée pour les suivants.

Forme spatiale

Angle entre les liaisons autour d'un atome C impliqué dans une double liaison :

Première S
II- Étude des composés oxygénés

ALCOOL

Rem : quand il y a plusieurs isomères, préciser les isomères

Nombre d'atomes de carbone	Nom de l'alcool	Formule brute	Formule de Lewis ou formule semi-développée*	Écriture topologique	Représentation de Cram
1 atome					
2 atomes					
3 atomes					
4 atomes					

* Formule de Lewis pour les deux premiers et semi-développée pour les suivants.

ALDÉHYDE et CÉTONE*Rem : quand il y a plusieurs isomères, préciser les isomères*

Nombre d'atomes de carbone	Nom de l'aldéhyde ou de la cétone	Formule brute	Formule de Lewis ou formule semi-développée*	Écriture topologique
1 atome				
2 atomes				
3 atomes				
4 atomes				

* Formule de Lewis pour les deux premiers et semi-développée pour les suivants.

ACIDE CARBOXYLIQUE*Rem : quand il y a plusieurs isomères, préciser les isomères*

Nombre d'atomes de carbone	Nom de l'acide carboxylique	Formule brute	Formule de Lewis ou formule semi-développée*	Écriture topologique
1 atome				
2 atomes				
3 atomes				
4 atomes				

* Formule de Lewis pour les deux premiers et semi-développée pour les suivants.

FENÊTRE DE ChemSketch

The screenshot shows the ChemSketch software window titled "ACD/3D : ChemSketch Window - [noname00.sk2]". The interface includes a menu bar (File, Edit, Pages, Tools, Templates, Options, Documents, I-Lab, ACD/Labs, Help), a toolbar with various drawing and editing tools, and a central workspace with a ruler. On the left, a vertical toolbar contains element selection buttons for C, H, N, O, P, S, Cl, Br, R, and #. The workspace contains several chemical structures: a methane molecule (CH₄), a propene molecule (C₃H₆), and a propyl radical (H₃C-CH₂-CH₂·). At the bottom, there is a status bar with information like "Fragments: 3", "C₉H₂₂", and "Mol.W.: 130.271". Navigation buttons at the bottom include "ChemSk", "Copy to 3D", and "3D".

Labels pointing to specific features in the interface:

- Mode structure
- Outil Lasso
- 3D structure Optimisation
- Outil Carbone
- Radical
- Vers la fenêtre ChmSk
- Vers la fenêtre 3D

FENÊTRE 3D

The screenshot shows the "ACD/3D : 3D Window - (Untitled)" interface. The menu bar includes File, Edit, View, Measure, Options, ACD/Labs, and Help. The toolbar contains tools for viewing and measuring the 3D model. The main area displays a ball-and-stick model of a propyl radical. At the bottom, there is a status bar with "NO NAME" and navigation buttons "ChemSk" and "3D".

Labels pointing to specific features in the 3D window:

- Balls and Sticks
- Angle between 2 bonds
- Calculate torsion angle
- 3D Optimisation
- Vers fenêtre ChemSk