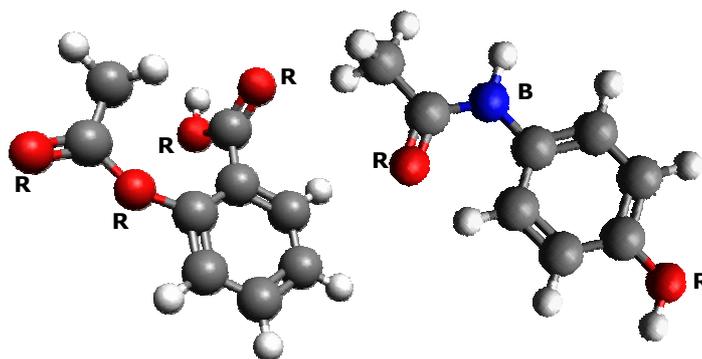


## Plan et documents

- 1) Qu'est-ce qu'une molécule ?
  - 1.1. Définition d'une molécule
  - 1.2. Liaison dans une molécule
  - 1.3. Modèles moléculaires
  - 1.4. Les ions polyatomiques
- 2) Les représentations en 2D des molécules
  - 2.1. Formule développée
  - 2.2. Formule semi-développée
  - 2.3. Formule brute
- 3) Groupes caractéristiques : pourquoi l'aspirine et le paracétamol soignent-ils ?
- 4) Isomères, des faux frères !



Doc. 1 : Molécules d'aspirine et de paracétamol

Ex n° 7, 8, 9, 11, 12, 15 et 17 p 286 à 289.

**Activité 1 : Utilisation du logiciel « Avogadro », éditeur de structures chimiques.**

- Allumer les ordinateurs : pendant que l'un des binômes écrit les noms et classe dans le cahier, l'autre allume l'unité centrale. La session est donnée par le professeur.
- Ouvrir logiciel « Avogadro » dont un raccourci se trouve sur le bureau.
- Vérifier que l'outil est bien sélectionné puis en cliquant sur l'onglet **Paramètres des outils...**, sélectionner **Elément: Carbone (6)**. Vérifier que la « Multiplicité » est bien sur « simple » et que soit cochée l'option « Ajuster les hydrogènes ».
- Cliquer sur l'espace de travail (fond noir). Une molécule de « méthane » doit apparaître.
- Manipuler cette molécule avec l'outil de navigation : déplacer-la avec un clic droit maintenu et faire la tourner autour d'un atome ou d'une liaison avec un clic gauche maintenu sur un atome ou liaison.

En observant cette molécule, commencer à remplir les 2 premières colonnes du tableau ci-dessous.

Pour supprimer un atome ou une molécule, le sélectionner avec puis la touche « Suppr ».

- Changer l'atome en cliquant sur et **Paramètres des outils...** et sélectionner dans la liste déroulante l'élément oxygène.
- Cliquer sur l'espace de travail afin de faire apparaître une molécule ...

Compléter la 3<sup>ème</sup> colonne.

Faire de même avec l'élément azote N, puis fluor, chlore, brome, iode.

ATOMES	H	C	O	N	F, Cl, Br, I
Nombres de liaisons					

Tableau 1.

**Activité 2 :** A l'aide du logiciel « Avogadro », construire le modèle du **dioxyde de carbone CO<sub>2</sub>** :

- L'outil doit être sélectionné. Créer une molécule de méthane puis sélectionner l'élément oxygène. Cliquer sur le plan de travail pour faire apparaître cet atome d'oxygène. Puis en maintenant le clic gauche, relier les 2 atomes d'oxygène et de carbone. Pour faire apparaître une « double liaison », cliquer sur la liaison simple.

Pour obtenir une modélisation bien proportionnée, cliquer sur « Extensions » puis « optimisation de la géométrie ».

Dessiner le modèle de la molécule **d'éthyne (ou acétylène)** qui comporte 2 atomes de carbone et 2 atomes d'hydrogène.

**Activité 3 :** Le schéma de la molécule d'éthanol (constituant des gels alcooliques et de certains sirops) est donné ci-contre. Elle est constituée de 2 atomes de carbone, 1 d'oxygène et les autres d'hydrogène.

- Afin de visualiser sa géométrie dans l'espace, construire cette molécule avec le logiciel « Avogadro » (pensez à « optimiser »).
- Construire cette molécule à l'aide des modèles moléculaires.
- Compléter le tableau 2 suivant :

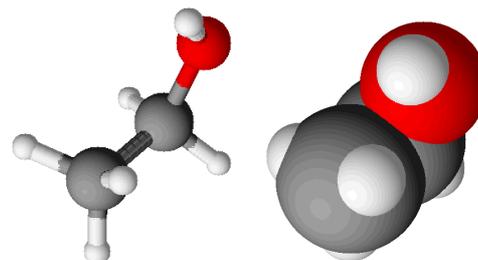


Fig. 1

Fig. 2

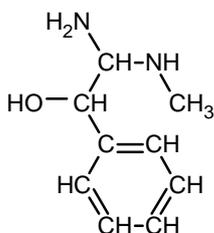
ATOMES	H	C	O	N	F, Cl, Br, I
Couleur standard					

Tableau 2.

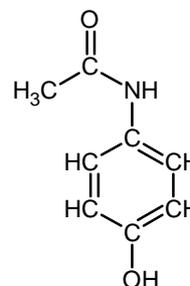
**Tableau 3 : Quelques groupes caractéristiques** que l'on rencontrera (Pour les radicaux R, R', R"... , l'élément attaché aux liaisons peut être un carbone C ou, parfois, un hydrogène H).

NOM	Hydroxyle	Amine	Carbonyle	Carboxyle
Groupe	$R-O-H$	$\begin{array}{c} R \\   \\ R''-N-R' \end{array}$	$\begin{array}{c} O \\    \\ R-C-R' \end{array}$	$\begin{array}{c} O \\    \\ R-C-O-H \end{array}$
NOM	Ester	Amide	Etheroxyde	
Groupe	$\begin{array}{c} O \quad R' \\    \quad   \\ R-C-O-C-R'' \\   \\ R''' \end{array}$	$\begin{array}{c} O \quad R' \\    \quad   \\ R-C-N-R'' \end{array}$	$\begin{array}{c} R' \quad R''' \\   \quad   \\ R-C-O-C-R'''' \\   \quad   \\ R'' \quad R'''' \end{array}$	

**Activité 4 :** Entourer et nommer les groupes caractéristiques présents dans les formules semi-développées de l'éphédrine et du paracétamol données ci-dessous :



**Ephédrine :** Cette substance appartient à la classe A des produits dopants (cette dernière est considérée comme un stimulant).



**Paracétamol :** substance active de nombreuses spécialités médicamenteuses de la classe des antalgiques antipyrétiques non salicylés. Il est indiqué dans le traitement symptomatique de la fièvre et des douleurs d'intensité faible à modérée. Contrairement notamment à l'aspirine, il est dépourvu de propriétés anti-inflammatoires et n'agit pas sur l'agrégation plaquettaire.

Puis écrire la formule semi-développée de la molécule d'aspirine (appelé aussi acide acétylsalicylique) du document 1 et y entourer les groupes caractéristiques (responsable des caractéristiques de ce médicament).

**Activité 5 :** Suite à l'activité 3, à côté de la représentation 3D de la molécule d'éthanol, représenter un isomère de cette molécule.

Dans votre cours, écrire les formules semi-développées de ces 2 molécules isomères.

Plus difficile : trouver les 4 isomères de la molécule de formule brute  $C_4H_8$ .

**Activité 6 :** si temps !

Reproduire sur Avogadro les molécules d'aspirine et de paracétamol.