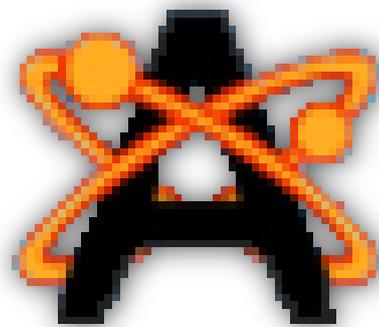


# Avogadro et la STÉRÉOCHIMIE



## Modification de la couleur d'arrière-plan

La couleur d'arrière-plan (initialement noire) peut être changée grâce au menu Vue > Couleur d'arrière-plan ...

## Pour dessiner un modèle moléculaire

Sélectionner l'outil dessin  en haut.

A l'aide de la souris, bouton gauche maintenu appuyé, on obtient, en étirant puis en relâchant, d'abord l'éthane, puis en reproduisant l'opération à partir d'un des deux carbones, un alcane linéaire de plus en plus grand.

Partant ensuite d'un atome de carbone de la chaîne carbonée, on peut avec le même principe obtenir un alcane ramifié.

Pour annuler une action : menu Edition > Undo ... ou plus simplement CTRL+Z.

## Optimisation manuelle de la représentation moléculaire

L'outil de manipulation  permet d'optimiser manuellement la représentation d'une molécule : en cliquant sur cet outil, on peut ensuite déplacer un atome sans rompre de liaison(s).

## Optimisation automatique de la représentation moléculaire

Avec le menu Extensions > Optimisation de la géométrie ... , on obtient un modèle respectant la géométrie de la molécule (longueurs relatives des liaisons, angles entre liaisons, ...).

## Pour représenter une molécule autre qu'un alcane

### Exemple de l'éthylène

A partir de l'éthane (outil dessin  sélectionné, puis cliquer et étirer sur la zone de travail), cliquer sur la liaison C-C : on obtient l'éthylène; un clic supplémentaire donne l'acétylène.

On retrouve l'éthane en cliquant une fois de plus.

### Exemple de l'éthanol

A partir de l'éthane, cliquer sur

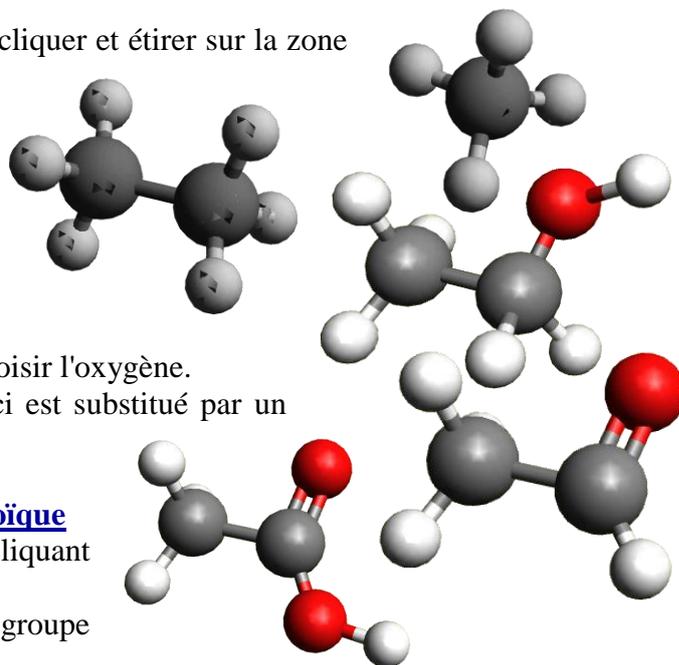
et dans la liste déroulante  , choisir l'oxygène.

En cliquant sur un des 6 atomes d'hydrogène, celui-ci est substitué par un groupe hydroxyle -OH.

### Passage de l'éthanol à l'éthanal puis à l'acide éthanoïque

L'oxygène étant toujours sélectionné dans la liste, en cliquant sur la liaison C-O, on obtient l'éthanal :

Puis en cliquant sur l'atome d'hydrogène du groupe fonctionnel, on obtient l'acide éthanoïque :



### Une molécule plus complexe : l'acide butènedioïque

- Rechercher la/les formule(s) possible(s) de formule brute  $C_4H_4O_4$ .
- Dessiner, modéliser, représenter et écrire la/les molécule(s) trouvée(s).

*Pour cela utiliser les documents mis à disposition.*

## Construire et dire si les composés suivants sont chiraux ou achiraux

- le 2-bromopentane
  - le 3-bromopentane
  - le 1-bromo-2-méthylbutane
  - le 2-bromo-2-méthylbutane
- 

### Effacement

Pour effacer une structure, cliquer en haut sur l'outil de sélection .

« Dessiner » un cadre autour de la structure, bouton gauche de la souris maintenu appuyé, puis dans le menu Edition, cliquer sur Effacer.

### Sauvegarde du modèle moléculaire créé

Dans le menu Fichier puis Enregistrer sous ... , on peut choisir parmi plusieurs types de fichiers, en particulier CML : Le modèle peut alors être réédité dans Avogadro (Fichier > Ouvrir ... ) ;

*Attention : le nom du fichier ne doit pas comporter de lettre accentuée.*

Pour enregistrer la molécule sous forme d'image, dans le menu Fichier, il faut choisir Exporter :

- l'option Graphiques ... permet d'obtenir une image au format BMP, PNG, ou JPEG ;
- l'option Graphiques vectoriels ... permet d'exporter au format PDF, SVG, ou EPS.

### Déplacer la molécule

Cliquer sur l'outil de navigation  , puis sur la molécule avec le bouton droit de la souris, et déplacer en maintenant appuyé.

### Zoomer sur la molécule

Cliquer sur l'outil de navigation  , puis sur la molécule avec la molette de la souris. Selon le sens de rotation de la molette, on augmente ou diminue la taille de la molécule.

### Rotation de la molécule autour d'un atome donné

Cliquer sur l'outil de navigation  , puis sur un atome donné de la molécule avec le bouton gauche de la souris, et déplacer celle-ci en maintenant le bouton gauche appuyé.

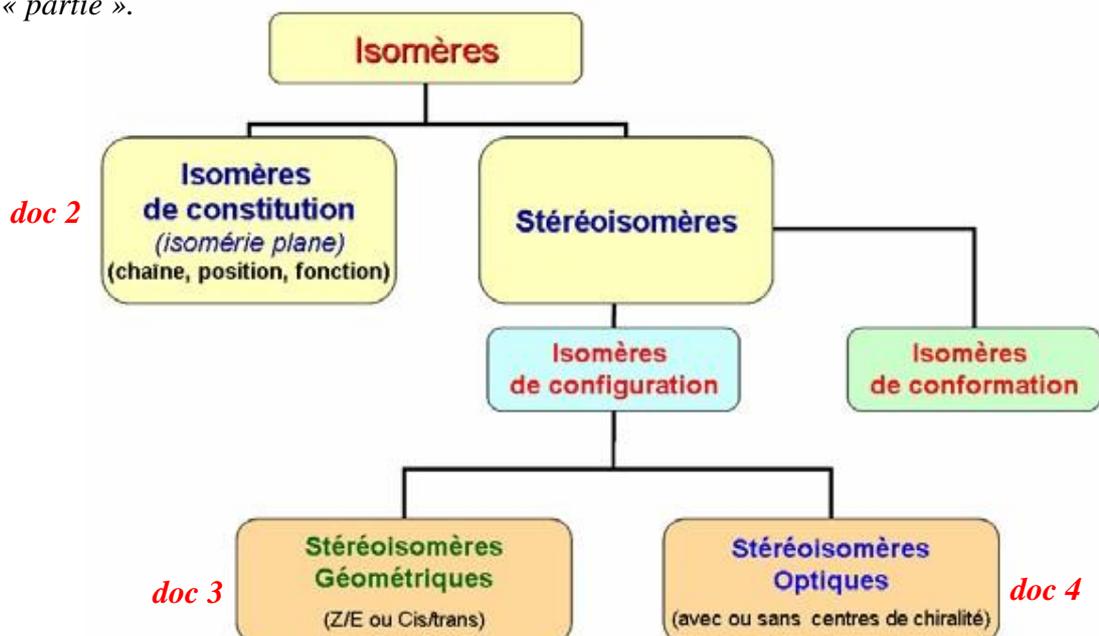
### Rotation automatique

En cliquant sur l'outil de rotation automatique  , puis en imprimant un mouvement de rotation à la molécule à l'aide du bouton gauche de la souris maintenu appuyé puis relâché, la molécule tourne sur elle-même jusqu'à ce qu'un clic sur la zone de travail soit effectué. L'axe de rotation dépend du mouvement initial de la souris.

---

# La STÉRÉOISOMÉRIE ou STÉRÉOCHIMIE

*stéréo* « solide » ou « volumique, qui occupe un volume », du grec ancien *στερεός* (*stereos*) « solide », et de *isomère*, lui-même composé de : *iso* du grec ancien *ἴσος* (*isos*) « même » et *mère* du grec ancien *μέρος* (*mêros*) « partie ».



## Définitions

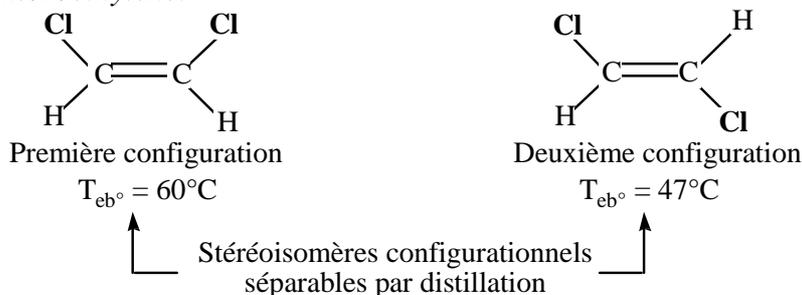
• **Les stéréoisomères** sont des isomères ayant même formule semi-développée, mais qui diffèrent entre eux par la disposition des atomes dans l'espace.

Les stéréoisomères peuvent être des **isomères de configuration** ou des

**isomères de conformation.**

• **Les isomères configurationnels** ou **de configuration** d'un composé donné correspondent chacun à une disposition particulière des atomes constituant sa molécule dans l'espace. Il s'agit donc de molécules différentes que l'on peut isoler.

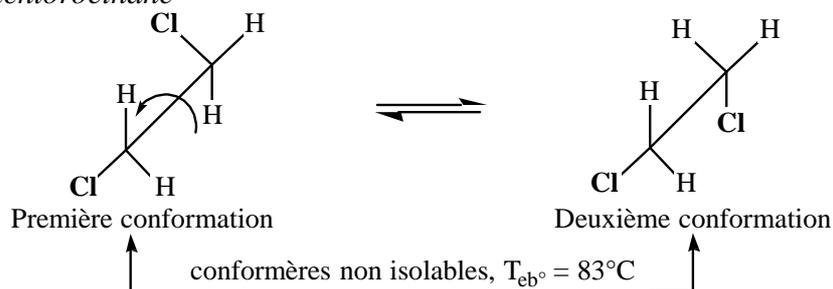
*Exemple du 1,2-dichloroéthylène.*



**Le passage d'une configuration à une autre nécessite la rupture d'une liaison ensuite sa formation de nouveau.** Dans l'exemple ci-dessus c'est la double liaison se trouvant entre les deux carbones.

• **Les isomères de conformation** ou **conformères** correspondent tous à la même configuration. Donc il s'agit d'une seule molécule. De ce fait les conformères sont non isolables.

*Exemple du 1,2-dichloroéthane*



**Le passage d'une conformation à une autre s'effectue par simple rotation et sans rupture de liaisons.**

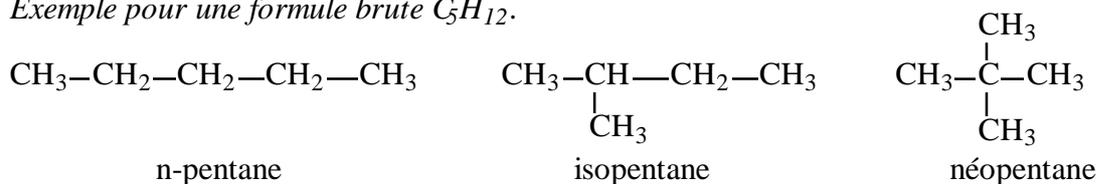
**Définition**

Au sens large du terme, on appelle isomères, des composés chimiques ayant une même formule brute mais des formules développées différentes. On désigne précisément par l'expression d'isométrie plane, les cas d'isométries pouvant être représentés par des schémas plans. On distingue trois sortes d'isométries planes :

**a) Isométrie de chaîne**

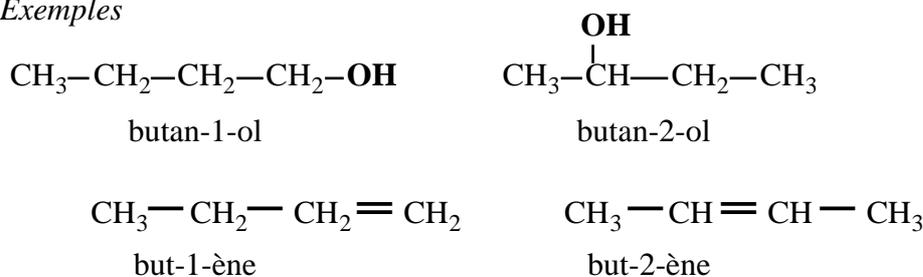
Les squelettes carbonés sont différents:

Exemple pour une formule brute  $C_5H_{12}$ .

**b) Isométrie de position**

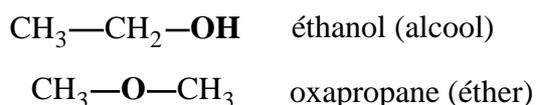
Le squelette de base est le même mais la position de la fonction diffère.

Exemples

**c) Isométrie de fonction**

Les fonctions chimiques sont différentes.

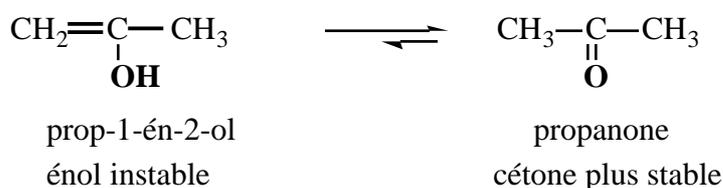
Exemple de  $C_2H_6O$



Ces deux corps se différencient à la fois par leurs propriétés chimiques et physiques ; ils sont porteurs de groupements fonctionnels différents.

Un cas particulier de l'isométrie de fonction; c'est la TAUTOMÉRIE. Deux tautomères sont deux isomères de fonction pouvant se transformer l'un en l'autre par un équilibre chimique dit de tautomérie (migration d'un proton).

Exemple de l'équilibre céto-énolique



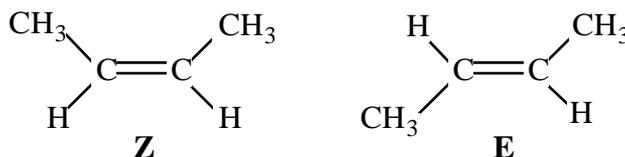
**STÉRÉOISOMÉRIE CONFIGURATIONNELLE**  
**STÉRÉOISOMÉRIE GÉOMÉTRIQUE : Z / E OU CIS/TRANS**

La présence d'une double liaison C=C empêche la rotation des deux carbones l'un par rapport à l'autre. Par conséquent si chacun de ces 2 carbones porte 2 atomes ou groupes d'atomes différents, il peut exister deux configurations distinctes appelées **diastéréoisomères** géométriques,

**dia** du grec ancien  $\delta\acute{\iota}\acute{\alpha}$  (*dia*) « à travers ».

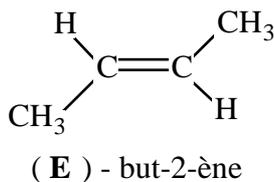
Lorsque les 2 atomes ou groupe d'atomes prioritaires sont du même côté de la double liaison on a une configuration "Z", s'ils sont de part et d'autre on a une configuration "E".

Exemple but-2-ène



La configuration de la molécule est indiquée en faisant précéder son nom de nomenclature internationale par (Z)- ou (E)-.

Exemple



Pour désigner 2 stéréoisomères Z ou E, on établit d'abord un classement sur chacun des carbones doublement liés, entre les 2 atomes ou groupes d'atomes qu'il porte en utilisant la règle séquentielle.

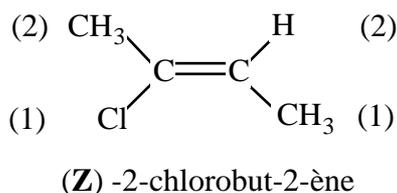
**Règle séquentielle**

(Elle permet la détermination de l'ordre de priorité des atomes ou groupes d'atomes).

On classe les atomes directement liés au carbone portant la double liaison

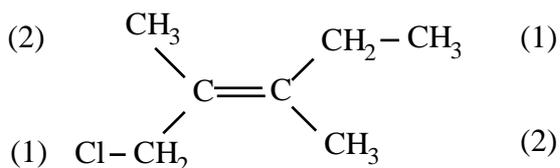
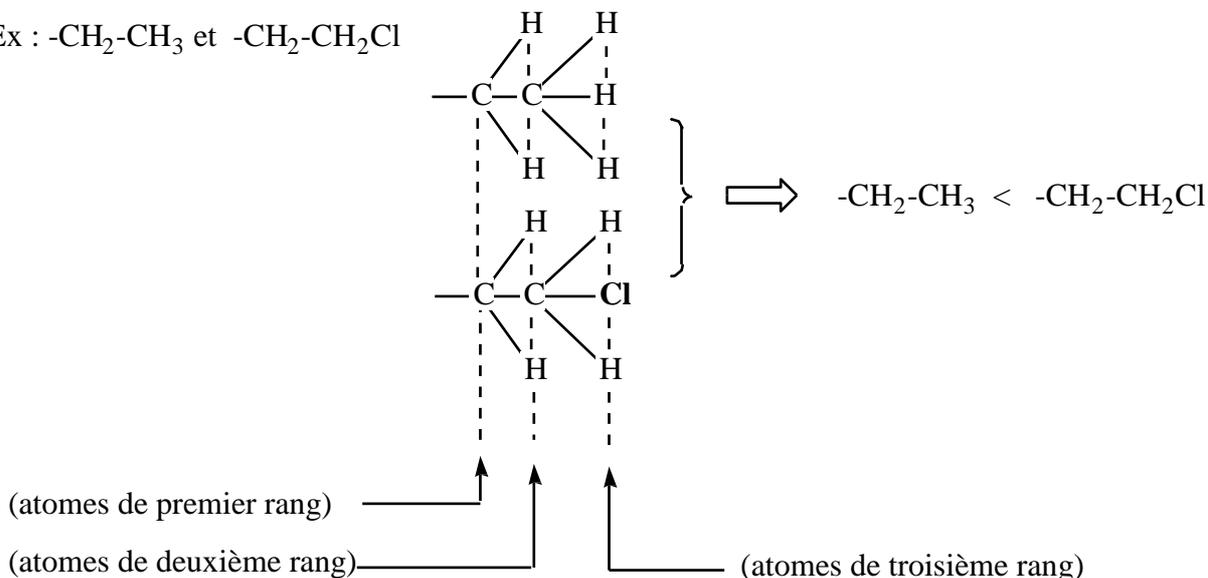
1) par ordre décroissant des numéros atomiques :

Ex : —Cl (Z=17) > —OH (Z=8) > —NH<sub>2</sub> (Z=7) > —CH<sub>3</sub> (Z=6) > —H (Z=1) > : (doublet libre)



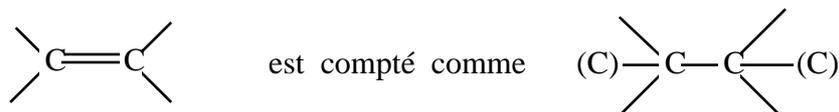
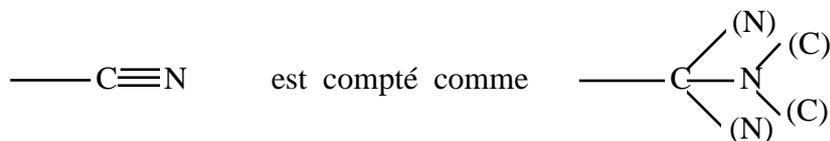
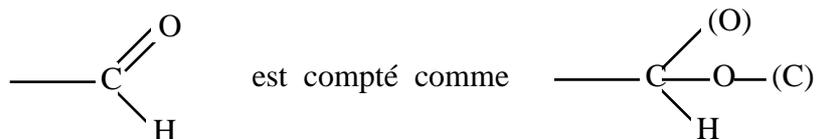
2) en cas d'égalité pour l'atome directement lié, on applique la même règle avec les atomes adjacents (atomes de deuxième rang), s'il y a encore ambiguïté on passe aux atomes de troisième rang...

Ex :  $-\text{CH}_2-\text{CH}_3$  et  $-\text{CH}_2-\text{CH}_2\text{Cl}$



(E) -1-chloro-2,3-diméthylpent-2-ène

3) une liaison multiple équivaut à plusieurs liaisons simples avec le même atome :



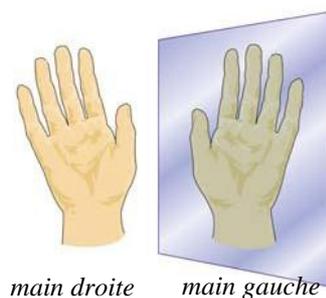
Remarques :

- la valence d'un atome réel est toujours respectée
- le comptage s'arrête toujours à un atome ficti

## Généralités

### a ) La chiralité

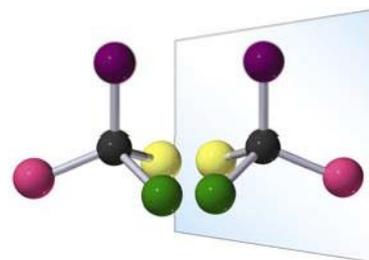
- On dit qu'une molécule est chirale si elle n'est pas superposable à son image dans un miroir plan. Comme objets présentant la propriété de chiralité on peut citer : la main gauche et la main droite, une paire de chaussures, une paire de ciseaux, un tire-bouchon, un escargot (sens d'enroulement de la coquille)...



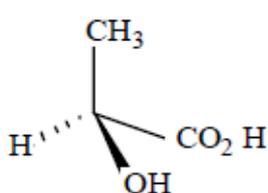
Pour les molécules :

- Une molécule non chirale est dite achirale.
- A quelles conditions une molécule peut être chirale ?

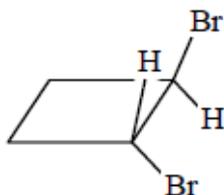
Dans la très grande majorité des cas les molécules chirales sont des molécules qui ne possèdent ni plan, ni centre de symétrie.



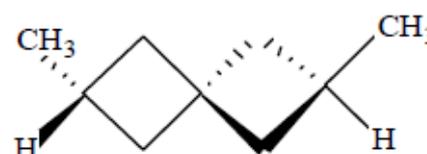
### Exemple de molécules chirales



acide 2-hydroxypropanoïque  
( acide lactique )

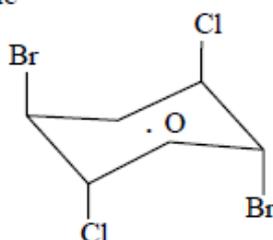
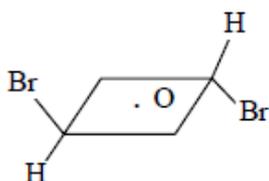
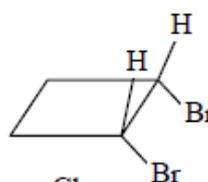
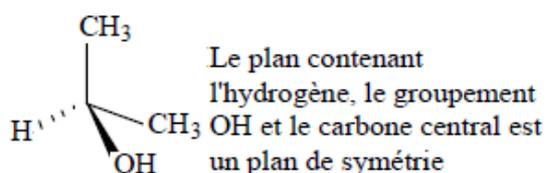


1,2-dibromocyclobutane



2,6-diméthylspiro [3.3] heptane

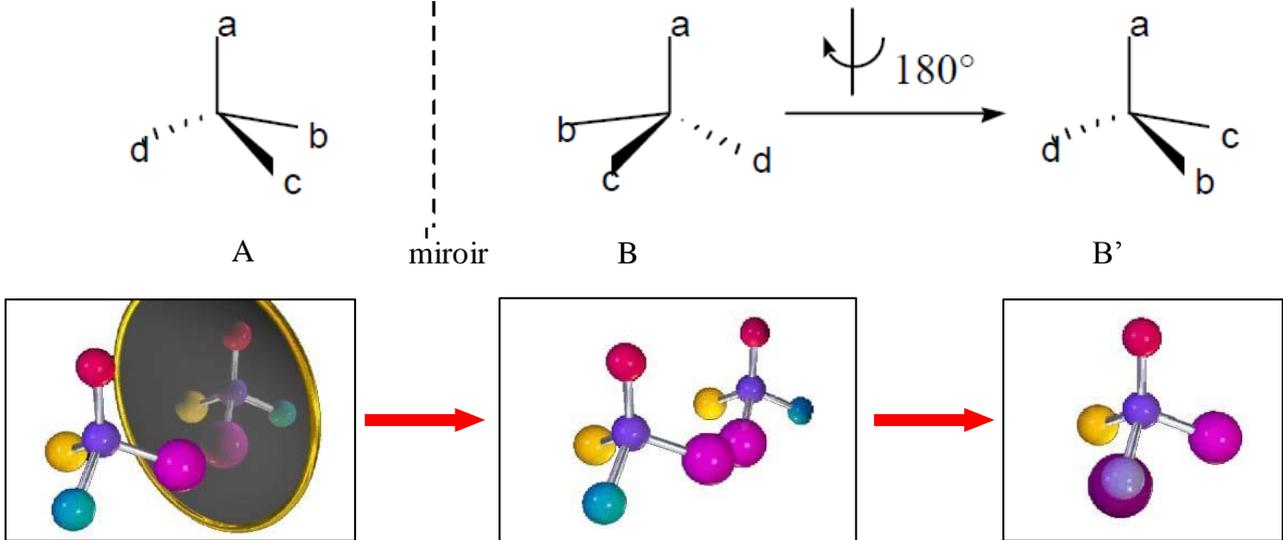
### Exemple de molécules achirales



Les points O sont des centre de symétrie.

## b) L'énantiométrie

Une molécule chirale possède, du fait même de sa chiralité, un stéréoisomère qui est son image par rapport à un miroir plan (image spéculaire).



La relation qui existe entre les molécules A et B (objet - image) est appelée *ENANTIOMERIE* et chacune est l'énantiomère de l'autre. (On dit aussi énantiomorphe, antipode optique ou inverse optique). Les deux énantiomères A et B diffèrent par leur configuration.

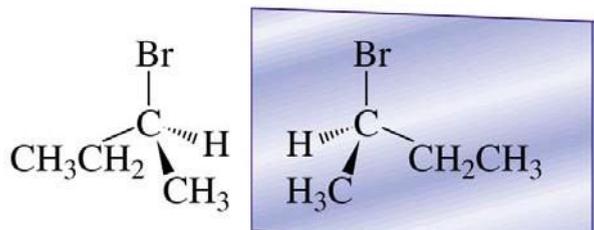
## c) Le carbone asymétrique

### Définitions

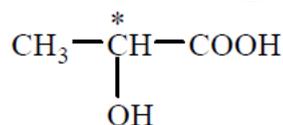
On appelle atome de carbone asymétrique ou centre asymétrique (noté C\*), un atome de carbone portant 4 atomes ou groupements d'atomes différents, donc un carbone tétraédrique.

Toute molécule contenant un et un seul atome de carbone asymétrique est chirale. On pourra donc séparer ses 2 énantiomères dextrogyre (+) et lévogyre (-).

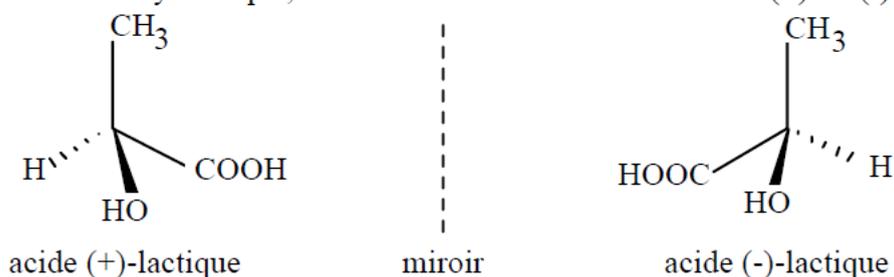
*Exemple du 2-bromobutane*



*Exemple de L'acide lactique*



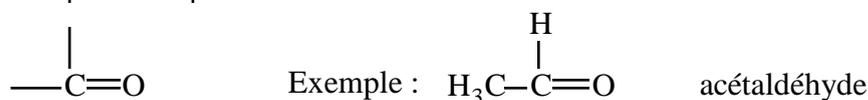
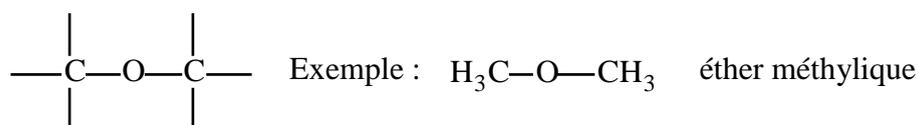
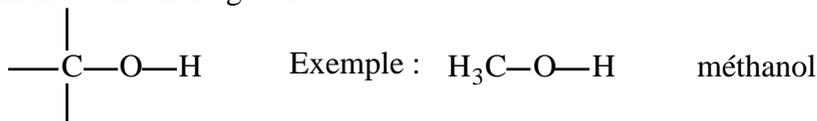
qui possède un carbone asymétrique, existe sous 2 formes énantiomères (+) ou (-).



**Définitions****1- Fonction chimique ou groupement fonctionnel**

On appelle groupement fonctionnel ou fonction chimique, l'atome ou le groupe d'atomes qui caractérise une famille de composés organiques et qui détermine l'ensemble de ses propriétés ainsi que sa réactivité chimique.

Si, en plus du carbone et de l'hydrogène, on considère par exemple l'oxygène, élément bivalent, trois enchaînements sont envisageables :



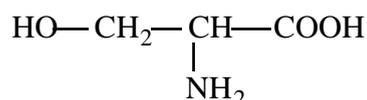
Ces trois fonctions confèrent aux molécules qui les comportent des propriétés différentes. Toutes les molécules contenant l'une de ces fonctions ont des propriétés analogues et constituent une famille homogène.

Le carbone qui porte la fonction est appelé carbone fonctionnel.

**2- Fonction principale**

Lorsqu'une molécule comporte deux ou plusieurs fonctions chimiques, l'une de ces fonctions sera considérée comme *fonction principale* et les autres comme groupements.

Exemple :



Ce composé comporte trois groupes fonctionnels différents : acide carboxylique, amine et alcool. Le groupement acide est la fonction principale et les deux autres sont considérés comme substituants.

Les fonctions chimiques sont classées selon leur *valence*. Une fonction est dite principale lorsqu'elle a la valence la plus élevée.

**3- Valence d'une fonction chimique**

On appelle valence d'une fonction, le nombre d'atomes d'hydrogène substitués sur le carbone fonctionnel par des hétéroatomes\* .

---

\* hétéroatome : atome autre que le carbone et l'hydrogène. Exemple : O, N, S, halogène noté X : F, Cl, Br et I.

