

## Activité expérimentale n°1 : Modélisation des molécules

### Objectif : Utiliser des modèles moléculaires et un logiciel de représentation

Tous les médicaments ont un principe actif. C'est une molécule qui possède des propriétés thérapeutiques. Une molécule est un édifice formé de plusieurs atomes. La disposition de ces atomes entraîne des propriétés physiques et chimiques bien particulières. Par exemple deux molécules ayant exactement les mêmes atomes peuvent parfois différer de manière dramatique : l'un peut être un médicament efficace et l'autre un poison.

#### Doc. 1 Les modèles des molécules

Dans un modèle moléculaire, chaque atome est modélisé par une boule, de couleur et de taille déterminées. Ces boules peuvent être liées entre elles afin de modéliser des molécules.

On distingue les modèles compacts et les modèles éclatés :

- les modèles compacts représentent au mieux la réalité et permettent d'évaluer le volume des molécules ;
- les modèles éclatés permettent de représenter les liaisons entre les atomes.

Ces modèles ne sont qu'une représentation de la réalité, mais ils en facilitent la compréhension. Il est également possible de modéliser des molécules grâce à des logiciels.

Couleur du modèle	○	●	●	●	●
Symbole de l'atome	H	C	N	O	Cl
Nom de l'atome	Hydrogène	Carbone	Azote	Oxygène	Chlore



> Modèles compact (a) et éclaté (b) de la molécule d'ammoniac  $\text{NH}_3$ . Le dosage de l'ammoniac dans le sang peut permettre de révéler une insuffisance hépatique.

1. Remplir le tableau ci-dessous :

Atome	Nombre de liaisons formées	Atome	Nombre de liaisons formées
Hydrogène		Oxygène	
Carbone		Chlore	
Azote			

2. En utilisant les informations recensées dans le tableau, modéliser sur votre feuille les molécules de dihydrogène  $\text{H}_2$ , de  $\text{CH}_3\text{Cl}$ , de  $\text{C}_2\text{H}_6$ , de dioxygène  $\text{O}_2$ , de diazote  $\text{N}_2$  et de dioxyde de carbone  $\text{CO}_2$ . Les tracer avec le logiciel Avogadro. Montrer au professeur.
3. Deux molécules, l'éthanol et le méthoxyméthane, possèdent la même formule brute  $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$ . A l'aide des modèles moléculaires et du logiciel Avogadro, déterminer deux manières d'agencer les atomes de carbone, d'hydrogène et d'oxygène.
4. Comparer la façon dont peuvent s'agencer, avec d'autres atomes, les atomes d'oxygène et de carbone dans ces deux molécules.
5. L'éthanol et le méthoxyméthane (vus à la question 3) sont appelées isomères. Proposer une définition de ce terme.
6. La molécule de paracétamol est modélisée sur le bureau du professeur. Trouver une représentation simple de cette molécule indiquant le nombre de liaison entre chaque atome.

### Notice d'utilisation du logiciel Avogadro

Le logiciel Avogadro permet de créer un modèle moléculaire éclaté ou compact d'une molécule. On peut aussi faire des rotations de cette molécule pour l'observer sous des angles différents.

- 1) Ouvrir le logiciel Avogadro



- 2) Si la fenêtre Paramètres de dessin n'est pas ouverte à gauche cliquer sur **Paramètres des outils**

- 3) Décocher **ajuster les hydrogènes**

- 4) On peut choisir l'élément grâce au menu déroulant

- 5) La multiplicité correspond au type de liaison.

- 6) S'il y a une erreur et que l'on souhaite tout effacer il faut aller dans l'onglet **Script** et cliquer sur **Clear molecule**

- 7) Pour optimiser la géométrie de la molécule, il faut cliquer dans l'onglet **Extensions** sur **Optimisation de la géométrie**

- 8) Si vous souhaitez travailler avec un modèle moléculaire compact il faut aller dans **Paramètres d'affichage** et cochez

#### Sphères de Van der Walls

- 9) Enfin pour faire tourner la molécule utiliser l'**outil de rotation automatique**

