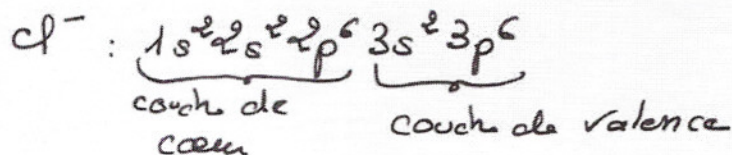
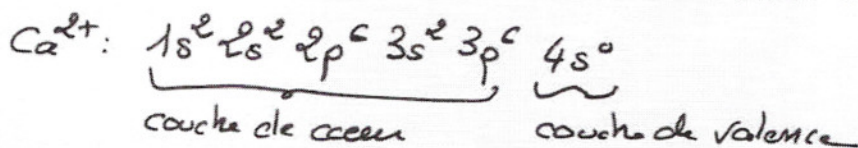
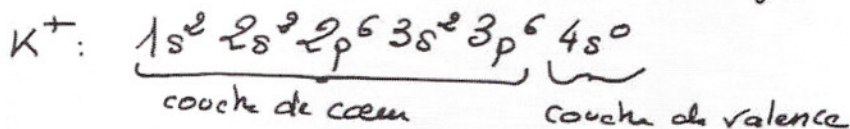


Epreuve d'atomistique

27 octobre 2003

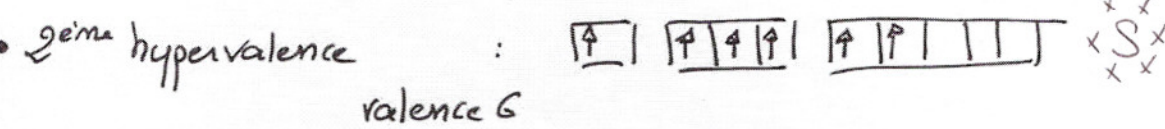
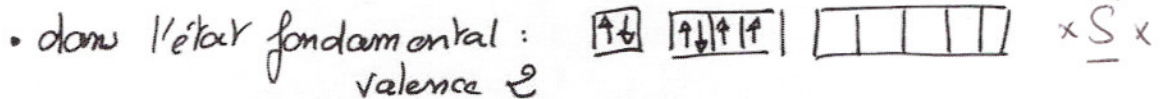
- 1 - le potassium appartient à la famille des alcalins.
 le calcium appartient à la famille des alcalino-terreux.
 le chlore appartient à la famille des halogènes.

ici les plus stables pour ces atomes et configurations électroniques :

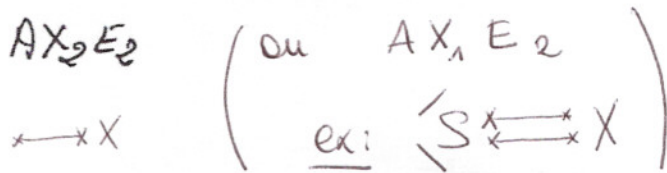


2 - atome de soufre : S $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4 3d^0$

formalisme des cases quantiques :

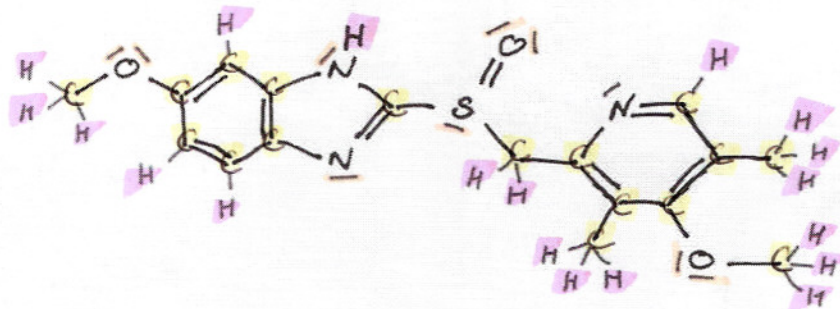


Pour la valence la plus faible (2), le type VSEPR de l'atome de soufre est



3-

Lewis



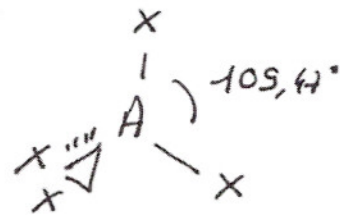
Ajouts : des atomes de C, d'H et des doublets e⁻ libres.

4-

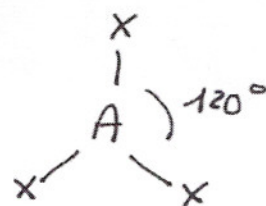
- AX₄ : C₁, C₁₄, C₂₁, C₂₂, C₂₄
- AX₃E : S₁₂, N₉ } passent en AX₃ par délocalisation maximale
↳ demandé
- AX₂E₂ : O₈, O₂₃ } passent en AX₂E par délocalisation maximale
- AX₃ : C₃, C₄, C₅, C₆, C₇, C₁₀, C₁₅, C₁₇, C₁₈, C₁₉, C₂₀, C₈
- AX₂E : N₁₁, N₁₆
- AXE₂ : O₁₃

Figures de répulsion idéales:

→ pour AX₄, AX₃E, AX₂E₂
la géométrie idéale est tétraédrique



→ pour AX₃, AX₂E, AXE₂
la géométrie idéale est trigonale plane



5 - des atomes de carbone de forme VSEPR AX₄ :

C₁, C₁₄, C₂₁, C₂₂, C₂₄

sont hybridés sp³ : 4 directions de liaison équivalentes nécessitant quatre orbitales hybridées équivalentes

• des atomes de carbone de forme VSEPR AX₃ :

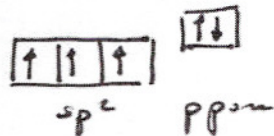
C₃, C₄, C₅, C₆, C₇, C₈, C₁₅, C₁₇, C₁₈, C₁₉, C₂₀, C₁₀

sont hybridés sp² : 3 directions de liaison équivalentes nécessitant trois orbitales hybridées équivalentes - d'orbitale p pure non utilisée dans l'hybridation participe aux systèmes π

6 - Atomes d'azote :

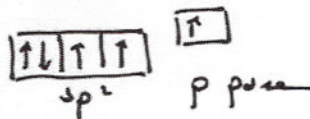
N₉ : initialement AX₃E (hybridation sp³) passe en forme VSEPR AX₃ (hybridation sp²)

le doublet libre est localisé dans une orbitale p pure et participe à la délocalisation :



N₁₁; N₁₆ : de forme VSEPR AX₂E (hybridation sp²) -

le doublet libre est localisé dans une de ces trois directions équivalentes, i.e. dans une orbitale hybride sp²

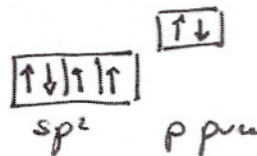


Atomes d'oxygène

O₂, O₃ : initialement AX₂E₂ (hybridation sp³) passe en forme VSEPR AX₂E (hybridation sp²)

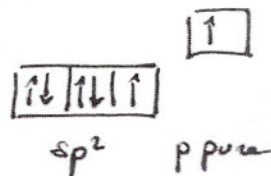
→ un doublet libre est localisé dans une p pure

→ un doublet libre est localisé dans une sp²

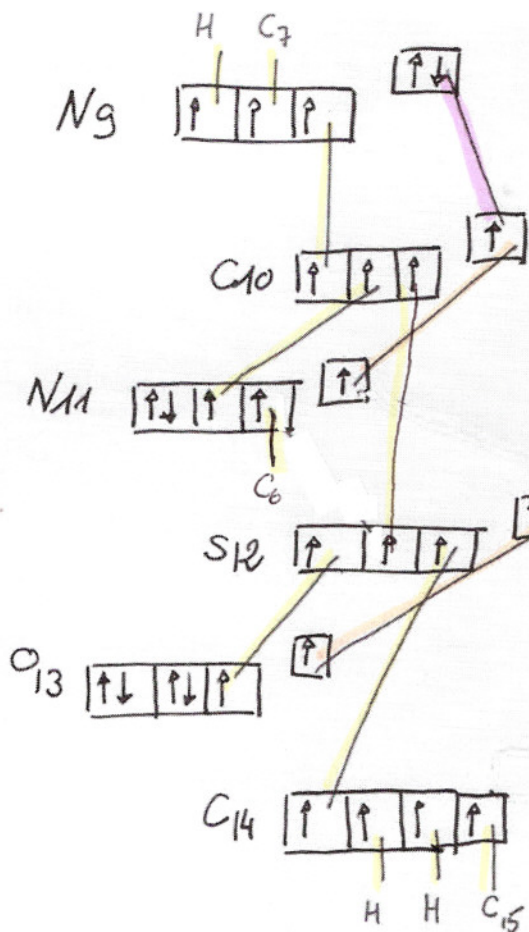


O₁₃ : de forme VSEPR AXE₂ (hybridation sp²)

les deux doublets sont localisés dans les orbitales hybridées sp²



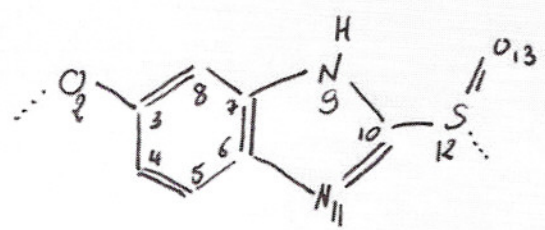
7 -



- schéma de liaison σ et π
 - délocalisation

← Schéma de liaison de S particulier (mon traité en cours, donc pas compte faux le jour de l'exam)
 + doublet e^- libre

8 - Il existe deux systèmes π dans cette molécule

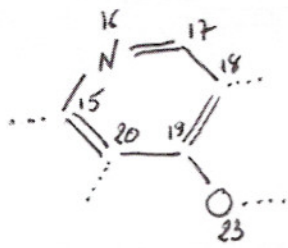


- le premier se délocalise sur les atomes $O_2, C_3, C_4, C_5, C_6, C_7, C_8, N_9, C_{10}, N_{11}, S_{12}$ et O_{13}

- chaque carbone apporte $1e^-$ à la délocalisation - O_{13}, S_{12} et N_{11} participent à la délocalisation en apportant également $1e^-$ (impliqués dans des liaisons doubles)
- O_2 et N_9 apportent chacun $2e^-$ à la délocalisation en faisant participer leur doublet libre

Au total $14e^-$ délocalisés dans ce système π

des atomes coplanaires sont ici tous les atomes lourds (C, N, O et S) participant à la délocalisation plus tous les atomes qui leur sont liés : les H et C_1 et C_{14}



- le deuxième système π se délocalise sur les atomes C_{15} , N_{16} , C_{17} , C_{18} , C_{19} , C_{20} et O_{23}

- chaque carbone apporte $1e^-$ à la délocalisation; l'atome d'azote apporte également $1e^-$ à la délocalisation.
- l'oxygène O_{23} , en partageant son doublet libre, apporte deux électrons à la délocalisation

Au total, $8e^-$ délocalisés dans ce système π

des atomes coplanaires pour ce système sont C_{15} , N_{16} , C_{17} , C_{18} , C_{19} , C_{20} et O_{23} ainsi que les atomes d'hydrogène et les atomes de carbone (C_{21} , C_{22} , C_{24} et C_{14}) liés à cette liste.

- 9 - • O_2 , N_{11} , O_{13} , N_{16} et O_{23} ainsi que l'hydrogène lié à N_9 sont susceptibles de créer des liaisons hydrogènes intermoléculaires

- la basicité est l'aptitude à capter un proton - le doublet libre de N_{11} est accessible (dans 1 orbitale sp^2) alors que le doublet libre de N_9 est impliqué dans la délocalisation - N_{11} est donc plus susceptible de capter le proton, il est plus basique.

10 - la membrane est formée de polymères hydrophobes

- les chaînes latérales des acides aminés au contact de la membrane doivent être hydrophobes (ou lipophile, apolaire, pas de liaison H)
- les chaînes latérales des aa formant le canal doivent être hydrophiles (ou lipophile, polaire, liaison hydrogène possible)

11 - la molécule d'omeprazole est trop grosse pour s'insérer dans un canal destiné à faire transiter des ions - L'omeprazole doit donc agir à un autre moment de la cascade biochimique menant à l'ouverture du canal.