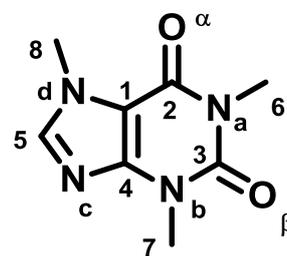


**Examen janvier 2010 :**

La caféine est une méthylxanthine présente dans de nombreux aliments. Elle est bien connue pour ses propriétés de stimulant du système nerveux central et du système cardio-vasculaire. La caféine est utilisée en pharmacologie, notamment contre les céphalées (maux de tête).

A forte dose journalière, la caféine peut entraîner une dépendance, des troubles du rythme cardiaque. Une administration de caféine dépassant 5000 mg peut être mortelle.



**molécule de caféine**

Dans ce sujet, on tiendra compte de **la délocalisation maximale possible pour cette molécule** :

**1 – Sur votre copie**, compléter, si possible avec un crayon d'une autre couleur, la formule semi-développée de cette molécule afin d'obtenir sa formule de Lewis complète.

**2 –** Sous forme d'un tableau,

- donner les formes VSEPR pour chacun des différents atomes de carbone de la caféine (de C<sub>1</sub> à C<sub>8</sub>),
- indiquer la géométrie VSEPR idéale autour de ces atomes, en indiquant la valeur théorique des angles.
- donner l'état d'hybridation de chacun de ces atomes en justifiant votre réponse.

**3 –** Même question pour les atomes d'azote (N<sub>a</sub>, N<sub>b</sub>, N<sub>c</sub> et N<sub>d</sub>) et d'oxygène (O<sub>α</sub> et O<sub>β</sub>). Regrouper les informations dans un tableau.

**4 –** Pour chacun des atomes d'azote (N<sub>a</sub>, N<sub>b</sub>, N<sub>c</sub> et N<sub>d</sub>), indiquez clairement leur schéma de liaison. Pour cela, n'hésitez pas à utiliser le formalisme des cases quantiques. Les électrons devront clairement apparaître dans votre schéma, notamment ceux des doublets libres s'il y a lieu.

**5 –** Pour chacun des atomes d'azote et d'oxygène, spécifier dans quel type d'orbitale se trouvent les doublets libres (ou électrons non-liants). Justifier.

**6 –** Combien existe-t-il de systèmes π dans cette molécule? Sur quels atomes se délocalise(nt) le(s) système(s) π? Décompter le nombre d'électrons présents dans ce(s) système(s) π délocalisé(s). Quels sont les atomes qui sont coplanaires? Justifier vos réponses.

**7 –** Quels atomes de cette molécule sont susceptibles de former des liaisons hydrogène intermoléculaires? Justifier votre réponse. Ne pas hésiter à utiliser des schémas pour expliciter vos réponses.

**8 –** Ecrire les différentes formes mésomères possibles pour cette molécule.