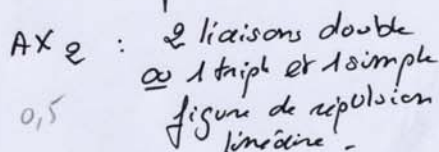
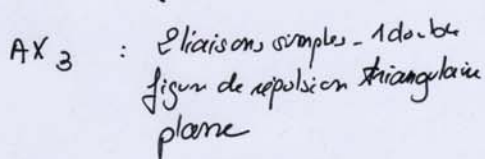
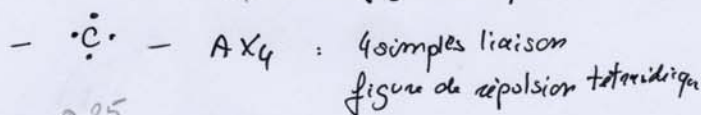
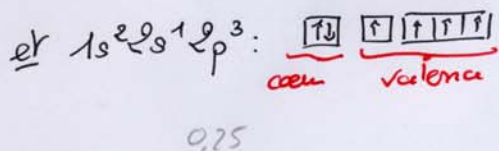
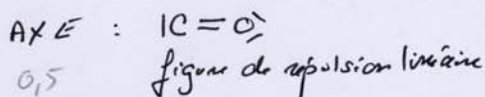
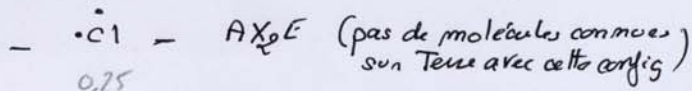
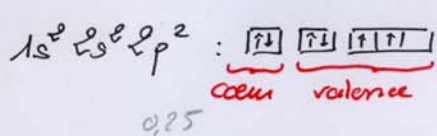


# Atomistique - Chimie Structurale 2011

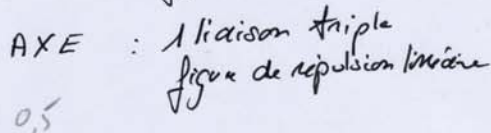
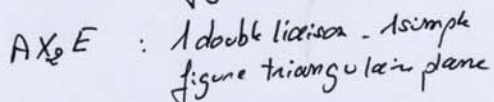
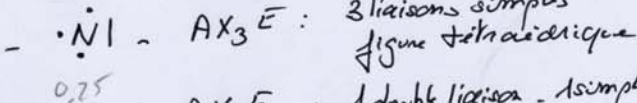
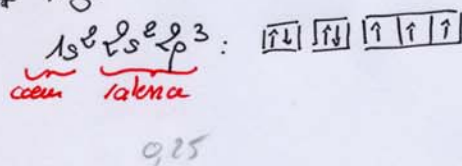
## 1 - Formules de Lewis - Structures électroniques - Figures VSEPR

14

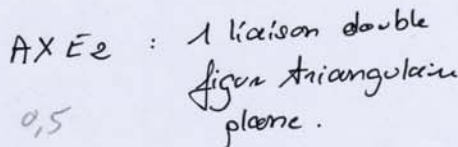
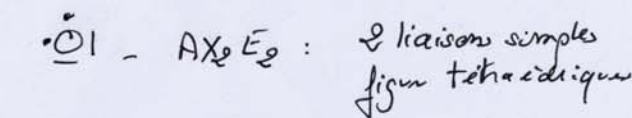
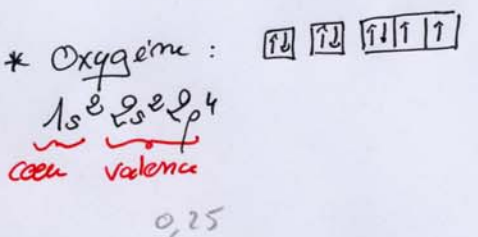
\* Carbone :



\* Azote



\* Oxygène :

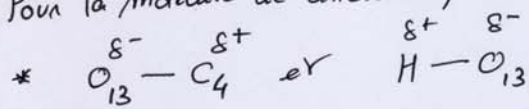


## e- polarisation des liaisons -

1,2,5

1 la polarisation d'une liaison provient d'une différence forte entre les atomes liés. Ceci entraîne une répartition "déséquilibrée" de la densité électronique au sein de la liaison - et la création de deux pôles centraux sur les atomes : l'atome le plus électro-négatif porte alors la charge négative  $\delta^-$  et l'atome le plus électro-positif porte la charge positive  $\delta^+$ .  
On convient qu'une différence d'électro-négativité de  $\Delta\chi = 0,5$  est nécessaire pour qu'une liaison soit polarisée -

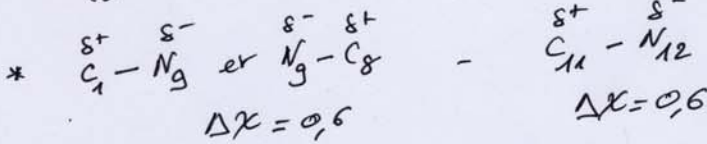
Pour la molécule de sérotonine, les liaisons polarisées sont :



$\Delta\chi_{O-C} = 1,0$

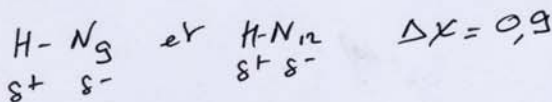
$\Delta\chi_{H-O} = 1,3$

1,5



$\Delta\chi = 0,6$

$\Delta\chi = 0,6$

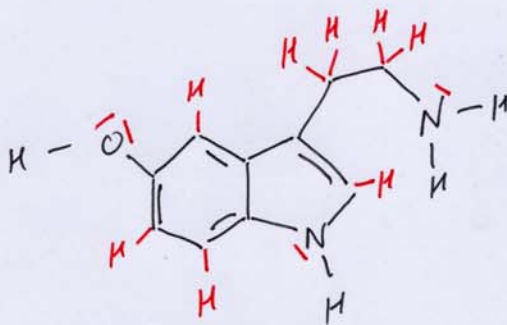


il n'est pas nécessaire qu'ils fassent apparaître les  $\Delta\chi$

(-0,5 si 1 ou 2 marques  
-1 si 3-4-5-6 marques)

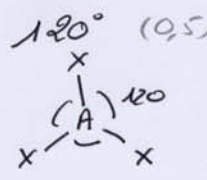
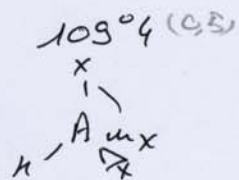
## 3 - Formule semi développée de la sérotonine

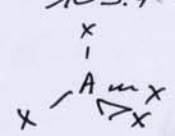
1,1,5

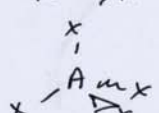


0,5 pour les H  
0,5 pour les doublets de N  
0,5 pour les doublets de O

4 - Familles VSEPR - (-0,25 si tous les atomes n'apparaissent pas dans la famille)

* Atomes de carbone	VSEPR	valeur th. angle
C1-2-3-4-5-6-7-8 (0,5)	AX <sub>3</sub> figure triangulaire plane	120° (0,5) 
C10-11	(0,5) AX <sub>4</sub> figure tétraédrique	109,4° (0,5) 

* Atomes d'azote		
N9-12	(0,5) AX <sub>3</sub> E sous-type de AX <sub>4</sub> figure tétraédrique	109,4° (0,5) 

+ Atome d'oxygène		
O13	(0,5) AX <sub>2</sub> E <sub>2</sub> sous-type de AX <sub>4</sub> figure tétraédrique	109,47° (0,5) 

5 - Hybridation des atomes de carbone (-0,25 si tous les atomes n'apparaissent pas dans la famille)

C1-2-3-4-5-6-7-8 : hybridation sp<sup>2</sup>

chacun de ces atomes de carbone est de type VSEPR AX<sub>3</sub> - Il est donc nécessaire de définir 3 orbitales équivalentes pour décrire les trois directions équivalentes de AX<sub>3</sub> - On doit donc utiliser une hybridation sp<sup>2</sup> (s + p + p)

0,5  
si disserter selon la précision de la justification

C10-11 : hybridation sp<sup>3</sup> 0,5

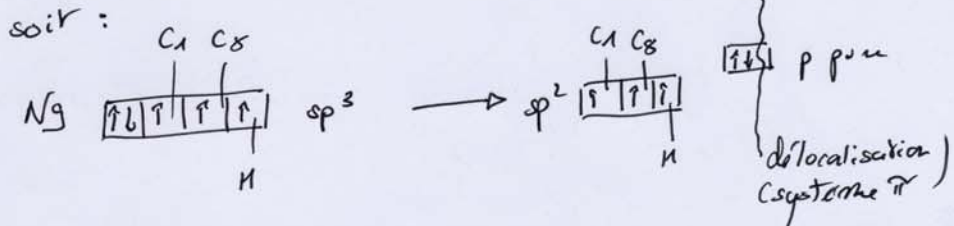
le type VSEPR AX<sub>4</sub> peut être décrit par l'utilisation de quatre orbitales équivalentes - On doit donc utiliser une hybridation qui implique 4 OA : s + p + p + p, soit l'hybridation sp<sup>3</sup>



6 - Hybridation des atomes d'O et d'N.

1/4

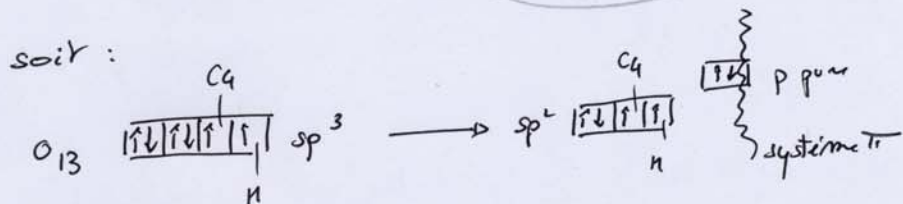
N9 - Le doublet présent sur cet atome d'azote peut participer à la délocalisation (au système  $\pi$ ).  
 (Configuration :  $n - s - \pi$ ). Il va donc y avoir un changement d'hybridation au niveau de cet atome d'azote :  
 initialement  $AX_2E$ , soit hybride  $sp^3$  (voir q précédente),  
 il passe en  ~~$AX_2E$~~   $AX_3$  et se retrouve finalement hybride  $sp^2$



0,5 ( le doublet libre se trouve alors dans une orbitale p pure -

N10 : pas de délocalisation possible - Cet atome d'azote étant de forme VSEPR  $AX_4$ , il sera hybride  $sp^3$ .  
 Son doublet se localise dans une orbitale hybride de type  $sp^3$ .

O13 : un des doublets de cet atome d'oxygène peut participer à la délocalisation sur le système  $\pi$ . Il y a donc un changement d'hybridation de cet atome d'oxygène : de  $sp^3$  (associé à  $AX_2E$ ), il passe en  $sp^2$  (associé à  $AX_2E$ ).



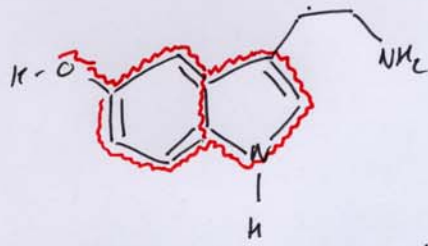
mon demander ( Un doublet localisé dans une p pure  
 Un doublet localisé dans une hybride  $sp^2$  )

7 - Système  $\pi$

1/2

0,5

- Il m'existe qu'un système  $\pi$  sur cette molécule :



impliquant les atomes :

0,5 } C1-2-3-4-5-6-7-8  
N9  
O13

En rouge : atomes sur lesquels s'étend le système  $\pi$

- chaque carbone apporte  $1e^-$  dans la délocalisation - l'azote et l'oxygène en apportent deux

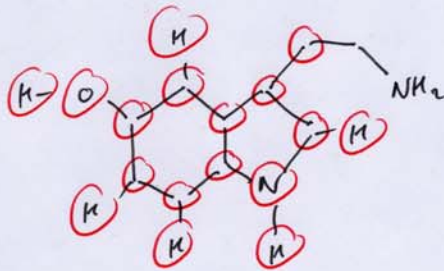
0,5

Il y a donc : 12 électrons qui participent à la délocalisation -

- Les atomes coplanaires sont les atomes lourds participant à la délocalisation + les atomes leur étant liés - Ces les atomes participant à la déloc sont de type VSEPR  $AX_3$  et voient donc une organisation triangulaire plane de ceux

0,5

soit :



En rouge : atomes coplanaires -