

(public 2008)

**Résumé :** Ce texte est consacré à l'étude de la géométrie d'une molécule, en fonction des données imposées par les liaisons chimiques (longueurs, angles).

**Mots clés :** élimination, géométrie effective, polynômes

---

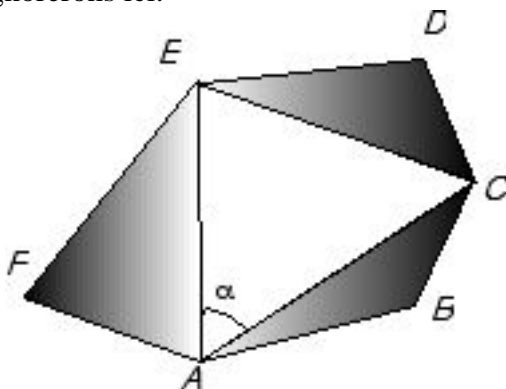
- *Il est rappelé que le jury n'exige pas une compréhension exhaustive du texte. Vous êtes laissé(e) libre d'organiser votre discussion comme vous l'entendez. Des suggestions de développement, largement indépendantes les unes des autres, vous sont proposées en fin de texte. Vous n'êtes pas tenu(e) de les suivre. Il vous est conseillé de mettre en lumière vos connaissances à partir du fil conducteur constitué par le texte. Le jury appréciera que la discussion soit accompagnée d'exemples traités sur ordinateur.*

## 1. Présentation du problème

Le problème de la forme géométrique dans l'espace d'une molécule est souvent essentiel, en chimie et en biologie, pour prévoir les propriétés du produit. Chaque molécule n'a que quelques configurations possibles, qui sont déterminées par la longueur de ses liaisons, et les angles que doivent faire entre elles les différentes liaisons.

Nous choisirons l'exemple d'une molécule formant un cycle à six atomes : cela pourrait être le cyclohexane, le glucose ...

Dans la modélisation ci-dessous, nous ne prendrons en compte que les liaisons entre les atomes constituant le cycle, et non celles avec des atomes voisins du cycle. Ces liaisons influent en réalité sur les liaisons du cycle, et pourraient modifier très légèrement sa géométrie. Nous l'ignorons ici.



La chimie nous impose les longueurs des liaisons :

$$AB = L_1, BC = L_2, CD = L_3,$$

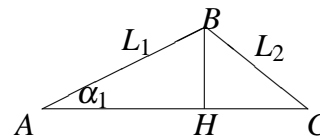
$$DE = L_4, EF = L_5, FA = L_6$$

ainsi que les mesures des angles entre les différentes liaisons :  $\Phi_1$  entre les liaisons  $AF$  et  $AB$ ,  $\Phi_2$  entre  $BA$  et  $BC$ ,  $\Phi_3$  entre  $CB$  et  $CD$ ,  $\Phi_4$  entre  $DC$  et  $DE$ ,  $\Phi_5$  entre  $ED$  et  $EF$ ,  $\Phi_6$  entre  $FE$  et  $FA$  (tous les angles considérés ici sont non orientés).

Les points  $A$ ,  $C$  et  $E$  définissent alors un plan. Nous allons montrer qu'on peut déterminer facilement toutes les caractéristiques du triangle  $(ACE)$  et que les coordonnées de  $B$ ,  $D$  et  $F$

doivent vérifier un système d'équations polynomiales. En le résolvant, on en déduira les configurations possibles de la molécule.

L'idée générale est la suivante. Intéressons-nous par exemple d'abord au triangle  $(ABC)$  : les longueurs  $L_1$  et  $L_2$  sont fixées, ainsi que l'angle  $\Phi_2$ , ce qui détermine l'angle  $\alpha_1$  des vecteurs  $\vec{AC}$  et  $\vec{AB}$ , les longueurs  $AC$ ,  $AH$  et  $BH$ ,  $H$  désignant le pied de la hauteur issue de  $B$ .



On peut travailler de la même façon dans les triangles  $(CDE)$  et  $(EFA)$  ce qui détermine en particulier les longueurs  $AC$ ,  $CE$  et  $EA$ , dont on déduit l'angle  $\alpha$  entre les vecteurs  $\vec{AC}$  et  $\vec{AE}$  dans le triangle  $(ACE)$ .

$B$  est alors un point du cercle de centre  $H$  de rayon  $HB$ , contenu dans le plan orthogonal à  $AC$  passant par  $H$ . On sait qu'on peut paramétrer le cercle unité dans un plan (à un point près) sous la forme :

$$x = \frac{1 - u^2}{1 + u^2}, y = \frac{2u}{1 + u^2}.$$

Plaçons-nous dans un repère orthonormé direct  $\mathcal{R} = (A, \vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$  tel que  $\vec{i}$  dirige  $AC$ , et  $\vec{j}$  soit dans le plan  $(ACE)$ . On écrit alors en fonction du paramètre  $u$  les coordonnées de  $B$ .

On écrit également en fonction d'un paramètre  $v$  les coordonnées de  $F$ . Le fait que l'angle des liaisons en  $A$  soit  $\Phi_1$  impose la relation :

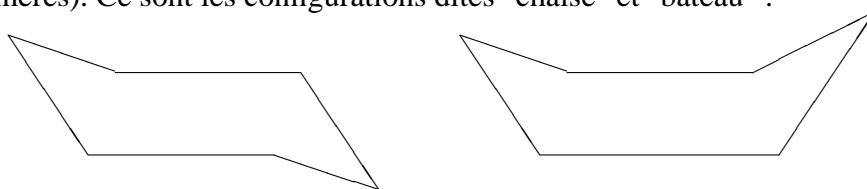
$$\langle \vec{AB} | \vec{AF} \rangle = L_1 L_6 \cos \Phi_1$$

qui donne une première relation polynomiale entre  $u$  et  $v$ .

De même, on repèrera  $D$  à l'aide d'un paramètre  $w$ . En répétant le processus précédent à partir des sommets  $C$  et  $E$  au lieu de  $A$ , le fait que l'on connaisse  $\Phi_1$ ,  $\Phi_3$  et  $\Phi_5$  donnera un système d'équations que doivent vérifier  $u$ ,  $v$  et  $w$ , et ceci permettra de déterminer les configurations possibles de la molécule.

## 2. Cas du cyclohexane

Les chimistes disent qu'il existe deux configurations possibles pour le cyclohexane (on parle de stéréoisomères). Ce sont les configurations dites "chaise" et "bateau" :



### 2.1. Détermination du système de conditions

L'étude est simplifiée dans cet exemple par les nombreuses symétries du problème. Ici, en effet, on a en  $A, B, C, D, E$  et  $F$  six atomes de carbone, pour lesquels les angles  $\Phi_i$ ,  $i \in [1, 6]$ , sont tous égaux à  $109$  et les longueurs  $L_i$ , toutes égales, seront prises comme unité de longueur.

Le triangle  $(ABC)$  est isocèle, et son angle au sommet  $B$  est connu, ce qui donne immédiatement l'angle  $\alpha_1$  en  $A$ , ainsi que les longueurs  $AH = \cos \alpha_1$  et  $HB = \sin \alpha_1$ .

Le triangle  $(ACE)$  est équilatéral ce qui donne  $\alpha = \frac{\pi}{3}$ .

Il faut maintenant lier  $u$ ,  $v$  et  $\Phi_1$ .

Prenons un repère orthonormé direct  $\mathcal{R} = (A, \vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$  tel que  $\vec{i}$  dirige  $(AC)$ ,  $\vec{j}$  soit dans le plan  $(ACE)$  et  $\vec{k}$  soit normal au plan  $(ACE)$ .

On peut paramétrer le point  $B$  sous la forme :

$$\begin{cases} x_B = AH \\ y_B = HB \frac{1-u^2}{1+u^2} \\ z_B = HB \frac{2u}{1+u^2} \end{cases} .$$

Pour paramétrer  $F$  en fonction de  $v$ , il suffit d'écrire les coordonnées de  $F$  en imaginant d'abord  $AC$  et  $AE$  superposés, puis de faire une rotation d'angle  $\alpha$  autour de  $\mathbb{R} \vec{k}$ .

En écrivant la relation :

$$L_2 L_6 \cos \Phi_1 = \langle \vec{AB} | \vec{AF} \rangle$$

et en ne gardant que le numérateur, on obtient alors une condition polynomiale  $P(u, v) = 0$ , où  $P$  est de la forme :

$$P(u, v) = a + buv + c(u^2 + v^2) + du^2v^2$$

si on a fait attention de bien orienter  $u$  et  $v$  de façon symétrique, pour que  $P$  soit symétrique en  $u$  et  $v$ . Si on a orienté  $u$  et  $v$  de façon identique, poser  $v' = 1/v$  et simplifier permet en principe de se ramener à un polynôme  $\tilde{P}(u, v')$  symétrique, que nous noterons toujours  $P(u, v)$  dans la suite.

$a, b, c, d$  sont des coefficients qui peuvent être exprimés en fonction des angles en jeu.

## 2.2. Résolution du système

$P$  est un polynôme de degré 2 en chacune de ses variables.

Vu les symétries du cycle, on a à résoudre le système :

$$\begin{cases} P(u, v) = 0 \\ P(v, w) = 0 \\ P(w, u) = 0 \end{cases} .$$

On peut espérer des solutions pour lesquelles  $u, v$  et  $w$  sont égaux. Cela revient à résoudre l'équation  $P(u, u) = 0$ , et vu la forme de  $P$ , ça ne doit poser aucun problème puisque c'est une simple équation bicarrée.

De même, on peut espérer une solution dans laquelle par exemple  $u$  et  $v$  sont égaux. On sait alors qu'il prend l'une des valeurs déterminées précédemment, et il ne reste qu'à résoudre par rapport à  $z$  l'équation  $P(u, z) = 0$  pour trouver  $w$ .

Ensuite, il faut déterminer les solutions moins symétriques, s'il en existe.

### 3. Cas du glucose

Pour le glucose, on a en  $A$  un atome d'oxygène, en  $B, C, D, E$  et  $F$  cinq atomes de carbone.

Les angles  $\Phi_i, i \in [2, 6]$ , sont tous égaux à 109 et  $\Phi_1$  est égal à 106, tandis que  $L_i$ , pour  $i \in [2, 5]$  vaut 1,54 Å,  $L_1$  et  $L_6$  valent 1,43 Å.

Le problème est alors nettement moins symétrique, ce qui conduira à des calculs plus compliqués.

Pour déterminer  $\alpha_1$  dans le triangle  $(ABC)$ , on peut par exemple se placer dans un repère du plan  $(ABC)$  d'origine  $B$ , dont l'axe des abscisses est  $(BC)$ .

On écrit alors les coordonnées de  $C$  et  $A$  dans ce repère, ce qui donne :

$$\begin{cases} AC = \sqrt{L_1^2 - 2L_1L_2 \cos \Phi_2 + L_2^2} \\ \cos \alpha_1 = \frac{L_1 - L_2 \cos \Phi_2}{\sqrt{L_1^2 - 2L_1L_2 \cos \Phi_2 + L_2^2}} \\ \sin \alpha_1 = \frac{L_2 \sin \Phi_2}{\sqrt{L_1^2 - 2L_1L_2 \cos \Phi_2 + L_2^2}} \end{cases}$$

En permutant les rôles des variables, on trouve les distances  $CE$  et  $EA$ .

Il reste à déterminer  $\alpha$  dans le triangle  $(ACE)$ . Un peu de géométrie élémentaire donne :

$$\cos \alpha = \frac{AE^2 + AC^2 - EC^2}{2AC AE}.$$

Comme pour le cyclohexane, on trouve alors une condition en écrivant le lien entre  $u, v$  et  $\Phi_1$ .

Par permutation des rôles des différentes variables, on obtiendra, aux sommets  $C$  et  $E$ , deux autres conditions.

#### 3.1. Résolution du système de conditions

On cherche à résoudre le système constitué des trois conditions précédemment trouvées, qui est de la forme :

$$\begin{cases} P(u, v) = 0 \\ Q(u, w) = 0 \\ Q(v, w) = 0 \end{cases}$$

où  $P$  et  $Q$  sont des polynômes.

La molécule présentant une symétrie autour de  $A$ , on peut chercher une solution telle que  $u = v$ , ce qui conduit à résoudre  $P(u, u) = 0$  puis, pour les valeurs de  $u$  ainsi déterminées  $Q(u, v) = 0$ .

Le problème qui reste est alors de savoir si on a toutes les solutions.

## Suggestions pour le développement

- ▶ *Soulignons qu'il s'agit d'un menu à la carte et que vous pouvez choisir d'étudier certains points, pas tous, pas nécessairement dans l'ordre, et de façon plus ou moins fouillée. Vous pouvez aussi vous poser d'autres questions que celles indiquées plus bas. Il est très vivement souhaité que vos investigations comportent une partie traitée sur ordinateur et, si possible, des représentations graphiques de vos résultats.*
  - Il sera prudent d'étudier d'abord plutôt le cas du cyclohexane, plus simple que le glucose.
  - On pourra faire les calculs de la modélisation qui conduit aux conditions polynomiales.
  - On pourra déterminer les solutions, en priorité celles où deux des variables prennent la même valeur, et si possible également les autres.
  - Quelle(s) méthode(s) pourrait-on utiliser pour résoudre le système directement ?
  - Le problème du nombre de solutions du système est apparu plusieurs fois. Quel(s) argument(s) permettent de le connaître, en comptant éventuellement les solutions complexes en même temps que les réelles ?
    - Dans le cas du cyclohexane en particulier, que peut-on en conclure ?