

Chapitre 06 : les molécules

formules et groupes caractéristiques

La formulation d'un médicament fait intervenir de nombreuses molécules dont celles des substances actives liées à leurs structures et leurs compositions.

1. Les molécules et leurs représentations

1.1. Définition d'une molécule

Une molécule est un édifice électriquement neutre, formé d'un assemblage d'atomes connectés entre eux par des liaisons chimiques.

Ces liaisons permettent aux atomes de gagner le nombre d'électrons dont ils ont besoin pour satisfaire à la règle du « duet » ou de l'octet.

Symbole	Nom	Nombre de liaisons
H	Hydrogène	1
C	Carbone	4
N	Azote	3
O	Oxygène	2
F	Fluor	1
Cl	Chlore	1

Tableau

Nombre de liaisons formées par différents atomes

Exemple

Deux atomes d'hydrogène peuvent mettre en commun leur unique électron pour former la molécule de dihydrogène. Les deux électrons mis en commun sont considérés comme appartenant aux deux atomes : chacun vérifie alors la règle du duet.

1.2. Formules d'une molécule

Il existe plusieurs façons de représenter une même molécule. La représentation utilisée dépend du niveau d'information souhaité.

a. Formule brute

Elle donne :

- la nature des atomes ;
- le nombre de chacun de ces atomes. Ce nombre est indiqué en bas, à droite du symbole des atomes.

La formule brute ne donne **aucune indication sur l'enchaînement des atomes** dans la molécule.

On indique en premier le nombre d'atomes de carbone (symbole C), puis le nombre d'atomes d'hydrogène (symbole H) et enfin les autres types d'atomes (par ordre alphabétique).

Lorsqu'il n'y a qu'un atome, on ne met pas de 1 en indice à côté du symbole.

Exemple

La molécule de piracetam est utilisée dans certains médicaments pour améliorer la mémoire et l'attention. Elle se compose de 6 atomes de carbone, 10 atomes d'hydrogène, 2 atomes d'azote et 2 atomes d'oxygène. La formule brute de la molécule s'écrit : $C_6H_{10}N_2O_2$.

b. Formule développée et liaisons entre atomes

Dans la formule développée d'une molécule, on fait figurer, dans un plan :

- les atomes (représentés par leur symbole) ;
- les liaisons entre les atomes de la molécule (symbolisées par des traits).

Il existe trois types de liaison :

- simple liaison (représentée par un simple trait) ;
- double liaison (double trait) : elle compte comme deux liaisons simples ;
- triple liaison (triple trait) : elle compte comme trois liaisons simples.

c. Formule semi-développée

La formule semi-développée est obtenue en simplifiant la formule développée de la molécule : **on ne représente plus les liaisons engagées par les atomes d'hydrogène.**

Le nombre d'atomes d'hydrogène liés à un atome est alors indiqué à côté du symbole de l'atome.

Bilan : différentes formules pour représenter une molécule

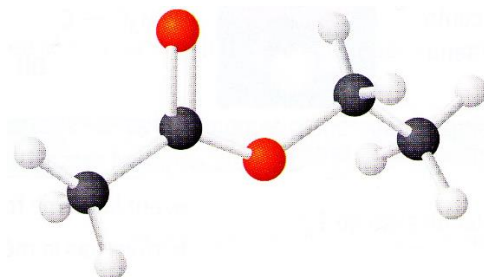
Formule	brute	Développée	semi-développée
méthode de représentation	symbole de l'élément et nombre d'atomes présents (en indice)	l'enchaînement des atomes est donné; les liaisons sont représentées par des tirets	on reprend la formule développée sans représenter les liaisons faites par les atomes d'hydrogène; le nombre d'atomes d'hydrogène est précisé en indice
exemple de l'éthanol	C_2H_6O	<pre> H H H — C — C — O — H H H </pre>	CH_3-CH_2-OH
limite de la représentation	elle ne donne pas l'enchaînement des atomes et ne donne aucune information sur les propriétés chimiques	ces représentations sont planes, alors qu'en réalité la plupart des molécules présentent une géométrie liée à l'orientation dans l'espace des liaisons des atomes (stéréochimie).	

1.3. Modélisation d'une molécule

Les modèles moléculaires ou des logiciels de représentation (Chemsketch, par exemple) permettent de **représenter les molécules dans l'espace.**

Les atomes sont représentés par des boules de couleur, les liaisons par des bâtonnets, orientés de manière à respecter la géométrie de la molécule.

Exemple : modèle moléculaire de l'éthanoate d'éthyle (image Hatier 2014)



Un modèle moléculaire ne fournit qu'une représentation imagée : les proportions ne sont pas conservées et dans la réalité, les atomes ne sont pas colorés et ne sont pas reliés par des bâtonnets.

2. Structure des molécules organiques

2.1. Constitution d'une molécule organique

Les molécules présentes dans le domaine vivant contiennent essentiellement les éléments carbone, hydrogène, oxygène et azote.

Une molécule organique est, en général, formée d'une chaîne d'atomes de carbone reliés entre eux (c'est la chaîne carbonée). Sur cette chaîne carbonée viennent se fixer d'autres atomes et/ou groupes d'atomes.

La chaîne carbonée peut être linéaire, ramifiée ou cyclique. Le type de chaîne carbonée et sa longueur influent sur les propriétés physiques de la molécule (exemple : température de changement d'état, solubilité dans l'eau).

Illustration : différents types de chaîne carbonée

$\text{CH}_3\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_3$ <p><i>La chaîne carbonée du butane est linéaire</i></p>	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3\text{—CH—CH}_3 \end{array}$ <p><i>La chaîne carbonée du 2-méthylpropane est ramifiée</i></p>	$\begin{array}{c} \text{H}_2\text{C} \text{—} \text{CH}_2 \\ / \quad \backslash \\ \text{H}_2\text{C} \quad \text{CH}_2 \\ \backslash \quad / \\ \text{H}_2\text{C} \text{—} \text{CH}_2 \end{array}$ <p><i>La chaîne carbonée du cyclohexane est cyclique</i></p>
---	--	--

2.2. Groupes caractéristiques



Un **groupe caractéristique** est un ensemble d'atomes qui donne des propriétés chimiques particulières à une molécule.

Dans un groupe caractéristique, il y a au moins un atome différent du carbone et de l'hydrogène.

Illustration

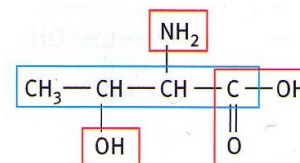
La présence de groupes caractéristiques (carbonyle et ester le plus souvent) confère aux fleurs leur parfum (image Hatier 2014).

Les principaux groupes caractéristiques étudiés en seconde sont :

Groupe caractéristique	hydroxyle	carbonyle	carboxyle	ester	amine	amide
Formule du groupe	$-\text{O}-\text{H}$	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ -\text{C}- \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ -\text{C}-\text{O}-\text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ -\text{C}-\text{O}-\text{C}- \end{array}$	$-\text{N}-$	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ -\text{C}-\text{N}- \end{array}$

Exemple

La thréonine est un acide aminé. Elle est formée d'une chaîne de quatre atomes de carbone (entourée en bleu). On repère la présence de trois groupes caractéristiques (entourés en rouge) : $-\text{OH}$ (hydroxyle), $-\text{NH}_2$ (amine) et $-\text{COOH}$ (carboxyle).



2.3. Notion d'isomérisation

La formule brute ne renseigne pas sur l'enchaînement des atomes qui constituent la molécule. À une même formule brute peuvent être associées plusieurs molécules différentes.

On appelle **isomères** des espèces chimiques qui ont **même formule brute**, mais des **enchaînements d'atomes différents**.

Les isomères ont par conséquent des propriétés physiques et chimiques différentes. Deux molécules isomères sont des molécules différentes.

Exemples

- L'éthanol et méthoxyméthane sont des isomères. Ils ont la même formule brute $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$.

Dans l'éthanol, l'atome d'oxygène est lié à un atome de carbone et à un atome d'hydrogène, alors que dans le méthoxyméthane, il est lié à deux atomes de carbone.

L'éthanol est utilisé dans les solutions désinfectantes et le méthoxyméthane est utilisé dans la fabrication du caoutchouc.

Formules développées	
Éthanol	Méthoxyméthane
$\begin{array}{c} \text{H} & \text{H} \\ & \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{O}-\text{H} \\ & \\ \text{H} & \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} & & \text{H} \\ & & \\ \text{H}-\text{C}-\text{O}-\text{C}-\text{H} \\ & & \\ \text{H} & & \text{H} \end{array}$

Formule semi-développée	
butane	2-méthylpropane
$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3-\text{CH}-\text{CH}_3 \end{array}$

- Il existe deux isomères de formule brute C_4H_{10} , l'un linéaire et l'autre ramifié.

Dans le butane, les quatre atomes de carbone sont alignés. Dans le 2-méthylpropane seuls trois atomes de carbone sont alignés.

Remarque

Il y a plusieurs façons d'écrire la formule chimique développée d'une même molécule. Deux molécules sont isomères uniquement si l'enchaînement des atomes est différent.