TSPC

CONSTITUTION ET TRANSFORMATION DE LA MATIERE

Synthèse de molécules organiques

Activité n° 1 : Structure et nomenclature des molécules organiques

La **chimie organique** est la chimie des composés du carbone. Parmi ces composés, on distingue ceux qui ne contiennent que les éléments carbone (C) et hydrogène (H) : ce sont les hydrocarbures ; les autres composés organiques peuvent aussi contenir les éléments oxygène (O), azote (N), soufre (S) chlore (CI)

A. REPRESENTATIONS PLANES DES MOLECULES ORGANIQUES

1. <u>Liaisons covalentes dans les molécules organiques</u>

Deux atomes forment une **liaison covalente** lorsqu'ils mettent chacun en commun un électron de leur couche électronique de valence (dernière couche électronique occupée).

Usuellement, le nombre de liaisons covalentes formées par un atome correspond au nombre d'électrons qui lui manquent pour acquérir une structure électronique stable à 8 électrons dans la couche externe (**règle de l'octet** lorsque Z > 5) ou 2 électrons externes pour l'hydrogène H (**règle du duet**)

Elément	Hydrogène	Carbone	Oxygène	Azote	Soufre	Chlore
Z	1	6	8	7	16	17
Structure électronique	1s¹	1s ² 2s ² 2p ²	1s ² 2s ² 2p ⁴	1s ² 2s ² 2p ³	$(K)^2(L)^8(M)^6$	$(K)^2(L)^8(M)^7$
Nombre de liaisons cov.	1	4	2	3	2	1

Ainsi, **l'atome de carbone doit toujours former 4 liaisons covalentes** : il est dit **tétravalent** tandis que l'atome H n'en forme qu'une seule.

2. Conventions de représentation plane des molécules organiques

Formule	Convention	Exemple
développée	Cette représentation fait apparaître l'ensemble des atomes et des liaisons covalentes de la molécule.	НĤ
	Rque : Le plus grand nombre de liaisons covalentes C-C doit être écrit <u>sur une même ligne</u> (excepté pour les molécules à chaîne carbonée cyclique)	H H H-C-C-O-H H H
semi-développée	Les liaisons impliquant les atomes d'hydrogène ne sont plus représentées : les atomes H sont accolés à l'atome auquel ils sont liés.	CH ₃ —CH ₂ —OH
topologique	Les atomes de carbone et les atomes d'hydrogène qui leur sont liés ne sont plus représentés.	<u> </u>
	Les liaisons covalentes C—C sont représentées par des segments écrits en zigzag.	OH

Remarque : Ces écritures « planes » ne présentent que l'enchaînement des atomes de la molécule sans tenir compte de leur distribution spatiale, c'est-à-dire de la géométrie de la molécule.

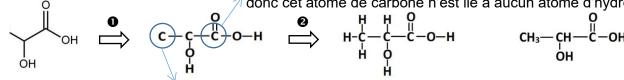
3. De la formule topologique à la formule (semi-)développée d'une molécule

• Un atome de carbone se trouve à chaque extrémité «libre» d'un segment de la chaîne carbonée écrite en zigzag (là où aucun autre élément n'apparaît).

② On ajoute autour de chaque atome de carbone autant de liaison covalente C-H que nécessaire pour que l'atome de carbone soit tétravalent.

Ex: molécule d'acide lactique

4 liaisons covalentes apparaissent déjà dans l'écriture topologique donc cet atome de carbone n'est lié à aucun atome d'hydrogène.



1 seule liaison apparaît dans l'écriture topologique donc cet atome de carbone doit être lié à 3 atomes d'hydrogène.

B. <u>STRUCTURE DES MOLECULES ORGANIQUES</u>

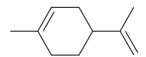
Une molécule organique comporte en général une **chaîne carbonée** (ou squelette carboné, c'est-à-dire un enchaînement d'atomes de carbone) sur laquelle peu(ven)t être fixé(s) un (plusieurs) groupe(s) d'atome(s) nommé(s) **groupe caractéristique** (responsable des propriétés de la molécule).

1. Diversité des chaînes carbonées

Chaîne linéaire	Ex: butanone O O O O O O O O O O O O O O O O O O O	Chaque atome de carbone est lié au plus à deux autres atomes de carbone.
Chaîne ramifiée	Ex: acide 3-méthylbutanoïque CH ₃ CH ₃ CH ₂ CH ₂ OH	Un atome de carbone au moins est lié à trois (ou quatre) autres atomes de carbone.
Chaîne cyclique	Ex : cyclohexène H ₂ C C H ₂ C C H ₂ C H ₂ C H ₂ C	La chaîne carbonée se referme, sur elle-même, entièrement ou en partie.

Remarques: Ex: limonène

- Une chaîne carbonée peut être à la fois cyclique et ramifiée.
- Une chaîne carbonée est dite **insaturée** lorsqu'elle comporte au moins une liaison covalente double (ou triple) entre atomes de carbone.



2. Quelques exemples de groupes caractéristiques et de noms de familles de composés

Groupe caractéristique	R-O-H	$\begin{bmatrix} \mathbf{R} \\ \mathbf{o} \mathbf{u} \\ \mathbf{H} \end{bmatrix} - \mathbf{C} - \begin{bmatrix} \mathbf{R'} \\ \mathbf{o} \mathbf{u} \\ \mathbf{H} \end{bmatrix}$	R O C - O - H	R ou H C-O-R'	R-N-R" ou H	R OU H OU H
Nom du groupe	Hydroxyle	Carbonyle	Carboxyle	Ester	Amine	Amide
Nom de la famille	Alcool ①	Aldéhyde ② ou cétone	Acide carboxylique	Ester	Amine ③	Amide

R, R' et R" désignent des chaînes carbonées.

- ① Une molécule comportant le groupe hydroxyle appartient à la famille des **alcools** à condition que le groupe **hydroxyle** soit lié à un **atome de carbone tétragonal** (formant 4 liaisons simples).
- ② Un composé carbonylé est un aldéhyde lorsque le carbone du groupe carbonyle est situé au bout de la chaîne carbonée (donc lié à un atome d'hydrogène). Sinon, le composé carbonylé est une cétone.
- ③ Une **amine** est dite **primaire** ou **secondaire** ou **tertiaire** lorsque l'atome d'azote N est lié respectivement à une ou deux ou trois chaînes carbonées.

Voir exercice 1.

3. Isomérie de constitution

• Des isomères de constitution sont des espèces chimiques dont les molécules ont la même formule brute mais des formules développées (ou semi-développées ou topologiques) différentes.

L'isomérie de constitution peut résulter :

- de la différence de position d'un même groupe caractéristique sur la chaîne carbonée ;

Ex: butan-1-ol

butan-2-ol

OH | CH3-CH2-CH-CH3

CH₃-CH₂-CH₂-CH₂-OH

- de la différence entre chaînes carbonées pour un même groupe caractéristique ;

Ex: butan-1-ol

méthylpropan-1-ol CH₃

CH₃-CH₂-CH₂-CH₂-OH

CH₃-CH-CH₂-OH

- de la différence de groupes caractéristiques

Ex: butan-1-ol

éther diéthylique

CH₃-CH₂-CH₂-CH₂-OH

CH₃-CH₂-O-CH₂-CH₃

• Des isomères de constitution ont des propriétés physiques et chimiques différentes.

Exemple:

Nom	Formule brute	Formule semi-développée	Température de fusion	Température d'ébullition	Masse volumique
Acide éthanoïque	C ₂ H ₄ O ₂	H O H O H	- 16,6°C	118°C	1,05 g/cm ³
Méthanoate de méthyle	C ₂ H ₄ O ₂	H C CH ₃	- 100°C	32°C	0,97 g/cm ³

Voir exercice 2.

C. NOMENCLATURE DES MOLECULES ORGANIQUES

Les règles permettant de nommer les molécules organiques simples (hydrocarbures à chaîne carbonée non cyclique ou molécules ne comportant qu'un seul groupe caractéristique) ou de retrouver la structure d'une molécule à partir de son nom sont données en annexe (détachable).

Voir exercices 3, 4 et 5.

Exercices

1. De la formule topologique à la formule semi-développée

a) Ecrire la formule semi-développée associée à chacune des formules topologiques ci-dessous.

b) Vérifier que les formules semi-développées obtenues sont cohérentes avec les valeurs des masses molaires moléculaires indiquées.

Données:

 $M(H) = 1.0 \text{ g.mol}^{-1}$; $M(C) = 12 \text{ g.mol}^{-1}$; $M(N) = 14 \text{ g.mol}^{-1}$; $M(O) = 16 \text{ g.mol}^{-1}$; $M(S) = 32.1 \text{ g.mol}^{-1}$

c) Caractériser les chaînes carbonées des molécules précédentes (linéaire, ramifiée, cyclique, insaturée) puis entourer et nommer les groupes caractéristiques présents.

2. Isomérie de constitution

- **a)** Quelles sont les trois formules semi-développées possibles pour une molécule de formule brute C₃H₅Cl, sachant que celle-ci-contient une liaison double C=C ?
- **b)** Déterminer les deux formules semi-développées possibles pour une molécule de formule brute C₄H₈O₂ sachant que sa chaîne carbonée n'est pas cyclique et qu'elle comporte un groupe carboxyle.
- **c)** Une amine primaire a pour formule brute C₄H₉–NH₂. Sachant que la chaîne carbonée de la molécule est linéaire, montrer qu'il existe deux formules semi-développées possibles pour cette molécule.
- **3.** Ecrire la formule topologique des molécules à n° impair et la formule semi-développée des molécules à n°pair puis nommer toutes ces molécules.

- 4. Ecrire les formules semi-développées et topologiques des molécules suivantes.
- ① 2,2-diméthylbutane
- 3 acide 3-méthylbutanoïque
- ⑤ 2-méthylpentan-2-ol
- éthanoate de propyle

- 2 2-éthylpent-1-ène
- hexan-3-one

6

8

- N-méthylbutanamide
- **5.** Ecrire les formules semi-développées et topologiques des trois composés carbonylés isomères de formule brute C₄H₈O (à chaîne carbonée non cyclique) et les nommer.

ANNEXE: REGLES DE NOMENCLATURE EN CHIMIE ORGANIQUE

1. HYDROCARBURES: ALCANES ET ALCENES

1.1. Alcanes

Les alcanes sont une famille d'hydrocarbures à chaîne carbonée saturée non cyclique, de formule brute C_nH_{2n+2} .

a) Alcane à chaîne linéaire

Le nom d'un alcane est formé d'un préfixe indiquant le nombre d'atomes de carbone dans la chaîne carbonée et du suffixe -ane.

Formule brute	Formule semi-développée	Nom
CH ₄	CH ₄	méth ane
C ₂ H ₆	CH ₃ –CH ₃	éth ane
C ₃ H ₈	CH ₃ -CH ₂ -CH ₃	prop ane
C ₄ H ₁₀	CH ₃ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₃	butane
C ₅ H ₁₂	CH ₃ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₃	pentane
C ₆ H ₁₄	CH ₃ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₃	hex ane

b) Alcane à chaîne ramifiée

Un alcane à chaîne ramifiée comporte une chaîne carbonée principale (la plus longue chaîne carbonée qui peut être écrite en ligne dans la formule semi-développée) et des ramifications (ou groupes alkyles dérivant des alcanes)

Exemples de groupes alkyles				
Formule brute	Formule semi-développée	Nom		
-CH ₃	−CH ₄	méth yle		
$-C_2H_5$	-CH ₂ -CH ₃	éth yle		
$-C_3H_7$	-CH ₂ -CH ₂ -CH ₃	propyle		
$-C_3H_7$	-CH(CH ₃) ₂	isoprop yle		
-C ₄ H ₉	-CH ₂ -CH ₂ -CH ₃	but yle		

Pour nommer un alcane à chaîne ramifiée, il faut :

- ① identifier la chaîne carbonée principale (qui est nommée comme l'alcane à chaîne linéaire comportant le même nombre d'atomes de carbone) et les ramifications ;
- ② numéroter les atomes de carbone de la chaîne principale de manière que ceux qui portent des ramifications aient les numéros les plus petits possibles.

Le nom est de la molécule est alors composé du nom de la chaîne principale, précédé du nom des ramifications (dans l'ordre alphabétique) sans le -e final. Chaque nom de ramification* est précédé (si nécessaire) du numéro de l'atome de carbone de la chaîne principale sur lequel elle est fixée.

* Si une même ramification apparaît plusieurs fois, le nom de la ramification est précédé d'un préfixe multiplicatif (di-, tri-, tétra- ...)

$$CH_3$$
 — CH — CH_2 — CH_3
 CH_3

méthylbutane

3-éthyl- 2,4-diméthylhexane

1.2. Alcènes

Les **alcènes** sont une famille d'hydrocarbures à chaîne carbonée non cyclique comportant une **liaison covalente double C=C**, de formule brute C_nH_{2n} .

Le nom d'un alcène dérive de celui d'un alcane de même chaîne carbonée en remplaçant le suffixe -ane par **-ène**, précédé du numéro indiquant la place de la double liaison dans la chaîne carbonée principale*.

CH₃

CH₃-CH=CH-C-CH₃ CH₃

4,4-diméthylpent-2-ène

^{*} La chaîne carbonée principale d'un alcène est la plus longue chaîne carbonée comportant la liaison C=C et les atomes de carbone sont numérotés de manière que ceux de la liaison C=C aient les plus petits numéros possibles.

2. MOLECULES ORGANIQUES COMPORTANT UN SEUL GROUPE CARACTERISTIQUE

Pour nommer une molécule ne comportant qu'un seul groupe caractéristique, il faut :

① identifier ce groupe caractéristique, la chaîne carbonée principale portant ce groupe et les ramifications;

2 numéroter la chaîne carbonée principale de manière que le carbone portant le groupe caractéristique ait le plus petit numéro possible.

2.1. Alcools

Les alcools sont les composés organiques comportant un groupe hydroxyle -OH fixé sur un atome de carbone tétragonal (formant quatre liaisons simples).

Le nom d'un alcool dérive de celui de l'alcane de même chaîne carbonée en remplaçant le -e final par -ol, précédé du numéro indiquant la position du carbone portant le groupe hydroxyle dans la chaîne carbonée principale.

Exemples:

2.2. Composés carbonylés

Les composés carbonylés sont caractérisés par la présence du groupe carbonyle C=O.

a) Aldéhyde

Dans les aldéhydes, le groupe carbonyle est situé en bout de chaîne carbonée (atome de carbone n°1 de la chaîne principale).

Le nom d'un aldéhyde dérive de celui d'un alcane en remplaçant le -e final par -al.

Exemple:

b) Cétone

Dans les **cétones**, le groupe carbonyle n'est pas situé en bout de chaîne carbonée.

Le nom d'une cétone dérive de celui d'un alcane en remplaçant le -e final par -one, précédé par le numéro de l'atome de carbone du groupe carbonyle dans la chaîne principale.

Exemple : O
$$CH_3$$
– C – CH_2 – CH_2 – CH_3 pentan-2-**one**

2.3. Acides carboxyliques

Les acides carboxyliques comportent le groupe carboxyle -COOH ou -C-OH, forcément situé en bout de chaîne carbonée (atome de carbone n°1 de la chaîne carbonée principale).

Le nom d'un acide carboxylique est formé par acide suivi du nom de l'alcane de même chaîne carbonée terminé par -anoïque (au lieu de -ane).

Exemple:

acide 3-méthylpentanoïque

2.4. Esters

Les **esters** comportent le groupe **ester –C–O**–R, forcément situé en bout de chaîne carbonée (atome de carbone n°1 de la chaîne carbonée principale) où R est un groupe alkyle.

Le nom d'un ester est formé par le nom de l'alcane de même chaîne carbonée que celle qui contient l'atome de carbone du groupe ester, terminé par -anoate de + nom du groupe alkyle.

Exemple:

2-méthylbutanoate d'éthyle

2.5. Amines

• Les amines primaires sont les composés organiques comportant le groupe amine -NH₂.

Le nom d'une amine primaire dérive de celui de l'alcane de même chaîne carbonée en remplaçant le -e final par **-amine**, précédé du numéro indiquant la position du carbone portant le groupe amine dans la chaîne carbonée principale.

Exemple: CH₃-CH-CH₂-**NH₂** méthylpropan-1-amine

• Les amines secondaires comporte un groupe amine R-NH-R' relié à deux chaînes carbonées.

Si le groupe alkyle R possède une chaîne carbonée plus longue que l'alkyle R', le nom de l'amine secondaire est formé comme celui d'une amine primaire à partir de l'alcane de même chaîne carbonée que R, précédé de N-alkyle pour désigner R'.

Exemple : $CH_3-CH_2-CH_2-NH-CH_3$ **N-méthyl**propan-1-amine

2.6. <u>Amides</u>

Les **amides** comportent le groupe **amide** –**C**–**N**–, forcément situé en bout de chaîne carbonée (atome de carbone n°1 de la chaîne carbonée principale).

Le nom d'un amide dérive de celui de l'alcane de même chaîne carbonée, en remplaçant le suffixe -ane par **-anamide**.

Exemple:

$$CH_3$$
 O $| I |$ $CH_3-C-CH_2-C-NH_2$ 3,3-diméthylbut**anamide** CH_3

Remarque : Si un groupe alkyle est lié à l'atome d'azote, le nom alcanamide est précédé par N-alkyl.

Exemple:

3. DU NOM A LA FORMULE SEMI-DEVELOPPEE

Démarche : En décomposant le nom d'un composé organique, de la droite vers la gauche :	Exemple: 3-méthylpentan-2-ol
① le suffixe permet de retrouver le groupe caractéristique et le numéro qui précède donne sa position sur la chaîne carbonée principale ;	2-ol : présence d'un groupe hydroxyle –OH sur le carbone n°2 de la chaîne principale
② le radical alcan- indique le nombre d'atomes de carbone de la chaîne carbonée principale ;	pentan-: 5 atomes de carbone OH C-C-C-C-C
③ le préfixe alkyl - indique la nature de la ramification et le numéro qui précède donne sa position sur la chaîne carbonée principale ;	3-méthyl: présence de –CH ₃ sur le carbone n°3 de la chaîne principale OH C-C-C-C-C CH ₃
I suffit d'ajouter le nombre convenable d'atomes d'hydrogène sur chaque carbone de la chaîne principale pour obtenir la formule semi-développée	OH CH ₃ -CH-CH-CH ₂ -CH ₃ CH ₃