Synthèse en chimie organique (partie 1)

Structure des entités chimiques organiques

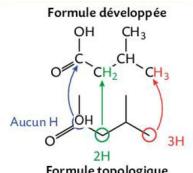
Formules topologiques

La formule topologique est un mode de représentation simplifié des molécules organiques :

- La chaine carbonée est représentée par une ligne brisée
- Les atomes d'hydrogène qui sont directement liés à un atome de carbone ne sont pas représentés
- La liaison double est représentée par un double trait, et la liaison triple par un triple trait

On appelle hétéroatomes (O, N,...) des atomes autres que C et H.

Exemple:



Formule topologique

Squelette carboné

Le squelette carboné représente l'enchainement des atomes de carbone constituant la molécule.

Si une liaison (double ou triple) ou un cycle est présent, le squelette est dit insaturé.

Chaîne carbonée saturée

Lorsque les atomes de carbone ne forment entre eux que des liaisons simples.



Carbones tétragonaux et tétraédriques

Chaîne carbonée insaturée

Lorsqu'au moins deux atomes de carbone voisins sont liés par une double liaison.



éthylène

Chaîne linéaire

Lorsqu'un carbone est lié à d'autres carbones sans faire de ramifications.



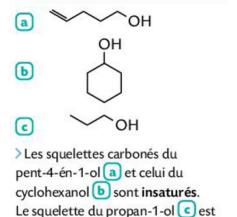
Molécule d'octane (linéaire saturée)

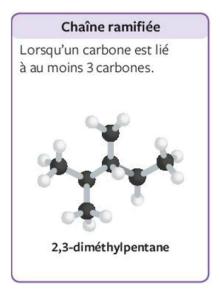
Chaîne cyclique

La chaîne se referme sur elle-même et forme un cycle.



cyclohexane





Familles fonctionnelles et nomenclature

Règles de nomenclature

saturé.

La nomenclature systématique est un point à ne pas négliger. En effet, dans un exercice, les molécules peuvent être nommées et non représentées ; la méconnaissance de la nomenclature, et donc l'incapacité à représenter correctement les molécules de départ, rendant la résolution de l'exercice alors impossible.

Le nom d'une molécule découle de celui des alcanes : on enlève le « e » au nom de l'alcane et on ajoute une terminaison qui indique à quelle famille la molécule appartient.

Quand une molécule possède plusieurs fonctions, celle qui donne la terminaison du nom et la numérotation de la chaine carbonée est la fonction la plus oxydée, on parle de fonction prioritaire. Les fonctions secondaires sont traitées comme des ramifications : on les indique par un préfixe précédé d'un indice de position.

Les terminaisons pour les différentes fonctions rencontrées et les préfixes utilisées pour les fonctions secondaires sont regroupés dans les tableaux ci-dessous :

Terminaison indiquant la famille :

Fonction	Terminaison	Préfixe pour une fonction secondaire
Alcène	(ane) = ène	

1	Acide carboxylique	Acideoïque	
2	Ester	oate d'yle	
3	Amide	amide	
4	Aldéhyde	al	Охо
5	Cétone	one	Охо
6	Alcool	ol	Hydroxy
7	Amine primaire	amine	Amino



(Classement par ordre de priorité décroissante)

Voici la méthode pour nommer une molécule :

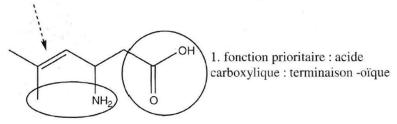
- 1. On repère la fonction prioritaire qui donne la terminaison du nom
- 2. On repère une éventuelle insaturation (on a alors une double terminaison)
- 3. On repère la chaine carbonée la plus longue contenant la fonction prioritaire et on la numérote de façon à ce que cette fonction porte le plus petit numéro : on a ainsi le préfixe de la chaine carbonée.
- 4. On repère les ramifications et les fonctions secondaires : on énumère leurs noms précédés de leur position (par ordre alphabétique)

Remarque : il peut y avoir quatre parties dans le nom d'une molécule :

Préfixe + chaine principale + suffixe d'insaturation + suffixe de fonction

Exemple de cas extrême :

2. Insaturation en position 4 : double terminaison -4-ènoïque



4. ramification méthyl en position 5 et fonction secondaire amine primaire en position 3 : 3-amino-5-méthyl

3. chaîne carbonée principale : 6 carbones : préfixe hexan

Acide 3-amino-5-méthylhex-4-ènoïque

En classe de terminale, le nom des molécules organiques devrait comporter que trois parties :



En première :

Groupe caractéristique*	Famille de composés	Formule générale
+OH] hydroxyle	Alcool	R — OH
carbonyle	Aldéhyde	O O O H OU H OU H OU H OU N OU H
	Cétone	O II R —C—R'
O II +C-OH carboxyle	Acide carboxylique	0 R — C — OH

^{*}Ces groupes ne peuvent être liés directement qu'à des atomes d'hydrogène H ou à des atomes de carbone C non liés à des atomes autres que l'hydogène H ou le carbone C.

Famille				
fonctionnelle	Alcool	Acide carboxylique	Aldéhyde	Cétone
Groupe caractéristique	-он	-c_он	-c_\(\begin{array}{c} H \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \	c-c [*] c
Suffixe ou	ol	oïque	al	one

En terminale :

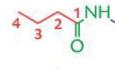
Famille fonctionnelle	Ester	Amine	Amide	Halogér	oalcane
Groupe caractéristique - COO	-c" ⁰	_ \	-c_N-	-F	-cℓ
	_o-c	-14		-Br	-1
Suffixe ou préfixe	oate de yle	amine*	amide*	fluoro ; bromo	chloro ;

^{*} Si l'atome d'azote, en plus d'être lié à la chaîne principale, est aussi lié à des groupes alkyles, le nom est précédé de la mention N-alkyl.

Exemples

3-méthylbutanoate de 2-méthylpropyle

3-méthylpentan-2-amine



N-méthylbutanamide

3-chloro-5-éthyl-4-méthylheptane

Isomérisation de constitution

Deux molécules sont isomères de constitution si elles ont la même formule brute mais des formules semi-développées différentes. On distingue trois types d'isomères de constitution :

Isomérie de chaîne

Formule brute: C₄H₁₀

✓

butane 2-méthylpropane La chaîne carbonée est différente

Isomérie de position

Formule brute: C₄H₁₀O

butan-1-ol

butan-2-ol

La position du groupe fonctionnel (ou de la double liaison) est différente

Isomérie de fonction

Formule brute: C3H6O

$$\begin{array}{ccc} \mathsf{CH_3-C-CH_3} & & \mathsf{CH_3-CH_2-CH} \\ \mathbb{I} & & \mathsf{O} & & \mathsf{O} \end{array}$$

Propanone Propanal

Les fonctions chimiques sont différentes.

Propriétés

Les interactions de van der Waals et les températures de changement d'état

Les interactions de van der Waals font partie de ces interactions attractives de faible énergie qu'il faut rompre pour dissocier (séparer) les molécules et passer de l'état solide à l'état liquide, puis de l'état liquide à l'état gazeux.

Conséquence sur des alcanes ramifiés, isomères de constitution :

Molécule	Formule topologique	Température d'ébullition – T° _{cb} (°C)
Pentane	^	36
2-méthylbutane		28
2.2-diméthylpropane		9,5

Plus la chaîne est ramifiée, plus le dipôle instantané, proportionnel à la longueur de la chaîne, est faible. Les interactions de van der Waals sont donc plus faible que pour les chaînes linéaires correspondantes. Ainsi, l'énergie nécessaire au changement d'état est beaucoup moins importante pour une chaîne ramifiée que pour une chaîne linéaire.

o Cas de molécules polaires et apolaires, mais de masse molaire identique.

Molécule	Température de fusion - T° _f (°C)	Température d'ébullition – T° _{eb} (°C)
Butane	- 138,3	- 0,5
Acétone	- 94,6	+ 56,1

Les liaisons du butane n'étant pas polarisées, cette molécule est le siège de peu d'interactions intermoléculaires par rapport à celle de l'acétone (propanone). En effet, cette dernière possède une liaison fortement polarisée au niveau du groupe carbonyle. Ainsi, la propanone (alias acétone) présente des interactions intermoléculaires supplémentaires.

Les liaisons hydrogènes et les températures de changement d'état

o Cas de molécules isomères de constitution pouvant établir des liaisons hydrogène

aldéhyde ortho-hydroxybenzoïque (aldéhyde salicylique)

 $T^{\circ}_{F} = -7^{\circ}C$

La forme méta de la molécule permet l'établissement de liaisons hydrogène avec des molécules environnantes. La forme ortho a la particularité de pouvoir établir une liaison hydrogène directement avec un atome d'oxygène lié à sa propre molécule. On parle alors de liaison hydrogène intramoléculaire. Cette possibilité de liaison intramoléculaire

diminue la possibilité d'établir une liaison hydrogène avec des molécules voisines. Par conséquent, pour passer de l'état solide à l'état liquide, il faudra apporter moins d'énergie pour séparer les molécules ayant la forme ortho que celles ayant la forme méta. La forme ortho a donc une température de fusion plus basse que la forme méta.

Cas des liaisons hydrogène sur la valeur des pKA

La force d'un acide est liée à sa capacité à réagir plus ou moins avec l'eau. Plus un acide réagit avec l'eau, plus il cèdera facilement un proton.

Regardons les conséquences des liaisons hydrogène intramoléculaires dans l'exemple ci-dessous :

L'acide citrique :
$$HOOC - CH_2 - C - CH_2 - COOH$$

COOH

$$O - H$$

$$D = 4.8$$

$$O - H$$

Solubilité

La solubilité d'une molécule dans un solvant traduit sa capacité de s'y dissoudre. Plus la dissolution est aisée pour le soluté, plus la solubilité est élevée.

La solubilité dépend directement des interactions qui peuvent s'établir entre le solvant et le soluté : plus le nombre et la diversité d'interactions établies est conséquent, plus la solubilité est importante. Ainsi, les espèces polaires se dissolvent bien dans les solvants polaires puisqu'elles établissent des interactions permanentes de van der Waals. De même si des liaisons hydrogène peuvent s'établir.

Par contre, les espèces apolaires ne se dissolvent pas dans un solvant polaire, car les interactions qui s'établissent entre les molécules polaires du solvant sont plus importante que celles qui existent entre les molécules du solvant. Il en découle que les molécules du solvant se lient entre elles, ceci entravant leur miscibilité au soluté.

Les polymères

1. Définition

Un polymère est une macromolécule, constituée d'un enchainement répété d'un même motif, appelé le monomère, reliés les uns aux autres par des liaisons covalentes.

2. Présentation

$$n(H_2C = CH_2) \rightarrow \{H_2C - CH_2\}_n$$

Éthylène (éthène)

Polyéthylène

Présentation de la macromolécule

Les polymères naturels sont des biomolécules qui composent les êtres vivants, par exemple, les protéines, les acides nucléiques, les polysaccharides (tels que la cellulose et la chitine), le caoutchouc naturel ou le latex, la lignine, etc.

Les polymères synthétiques sont très nombreux (PE, PTFE, PVC, polycarbonate, polystyrène...).

3. Exemple du PE polyéthylène

$$n(H_2C = CH_2) \rightarrow \{H_2C - CH_2\}_n$$

Éthylène (éthène) Polyéthylène

4. Exemple du PS polystyrène

5. Réaction de polymérisation du nylon

Hexan-1,6-diamine

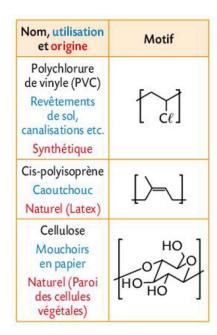
Hexan-1,6-diamine

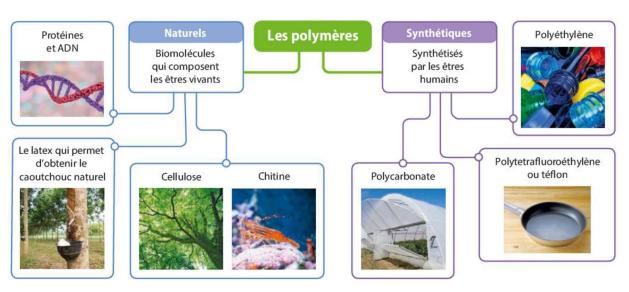
$$H_2O$$

Liaison amide

 H_2O
 H_2O
 H_3O
 H_4O
 H_2O
 H_4O
 H_4O

6. Exemples





Exercices

Exercice 1: QCM

Exercice 2 : Représenter une formule topologique

Représenter les formules topologiques correspondant aux formules semi-développées ci-dessous :

Exercice 3 : Justifier les noms des molécules associées aux formules topologiques

Exercice 4 : Identifier des isomères de constitution

Pour chaque couple de formules topologiques, identifier si les espèces correspondantes sont des isomères de constitution. Justifier.

Exercice 5 : Molécules isomères

Ecrire les formules semi-développées de trois isomères correspondant aux formules brutes ci-dessous :

b.
$$C_4H_8O_2$$

Exercice 6 : Ecrire les formules topologiques ou semi-développée des molécules suivantes

2-méthylpropène Monomère pour la fabrication d'un matériau élastomère	4-méthylpentanal Molécule biologique produite pendant la conversion du cholestérol dans l'organisme
3-méthylbutanal Composé pharmaceutique produit naturellement par fermentation du malt dans la bière	2-méthylbutanoate d'éthyle Présent dans les baies sauvages. Arôme utilisé dans l'industrie alimentaire qui possède une odeur de fruit vert
C Butan-2-amine Utilisé dans les pesticides	Éthanamide Synthétisé pour la première fois en 1847 par JB. Dumas et découvert sur la comète 67P
N-éthyl-N-méthyl-4- méthylpentanamide Utilisé dans les pesticides	fthanoate d'éthyle Molécule odorante à odeur de rhum ou de fruit mûr utilisée comme solvant

Exercice 7 : Représenter un motif

Le polychlorure de vinyle (PVC) est un polymère synthétique. Dans le bâtiment, il est utilisé pour confectionner des fenêtres et des canalisations. On représente ci-dessous une partie de la formule topologique d'une de ses macromolécules : $\mathsf{C}\ell \quad \mathsf{C}\ell \quad \mathsf{C}\ell \quad \mathsf{C}\ell$

- 1. Définir le terme de polymère.
- 2. Représenter le motif du PVC.
- 3. Nommer un autre polymère synthétique et donner son application.