

S18 – Isomérisation de constitution

1 Qu'est-ce qu'un isomère ?

Définition

Des **isomères** sont des molécules qui ont la **même formule brute** (même nombre d'atomes de chaque élément) mais des **structures différentes**.

Isomères : Même formule brute + Structures différentes \Rightarrow Propriétés différentes

Exemple fondamental : butane vs isobutane

Molécule	Formule brute	Structure	T _{ébullition}
Butane	C ₄ H ₁₀	 Linéaire butane	Linéaire
Isobutane	C ₄ H ₁₀	 Ramifiée isobutane	-11,7 °C

✳ À RETENIR :

- ISOMÈRE = même formule brute, structure différente
- Structure différente \rightarrow Propriétés différentes
- La formule brute seule ne suffit JAMAIS pour identifier une molécule

2 Les trois types d'isomérisation de constitution



L'**isomérisation de constitution** (ou isomérisation de structure) regroupe trois types d'isomérisation selon la nature de la différence entre les molécules.

1. Isomérisation de chaîne

Définition

Les isomères ont des **chaînes carbonées de formes différentes** : linéaire, ramifiée ou cyclique.

Exemple : C₅H₁₂ (pentane et isopentane)

Isomère	Structure	Type de chaîne
Pentane	 pentane	Linéaire (5 C alignés)
Isopentane (2-méthylbutane)	 isopentane	Ramifiée

Conséquence

Les propriétés **physiques** sont différentes :

- **Température d'ébullition** : linéaire > ramifiée (meilleur empilement)
- **Viscosité** : linéaire > ramifiée
- **Texture** (en cosmétique) : linéaire = épais, occlusif ; ramifié = léger, pénétrant

Application cosmétique



Molécule	Type de chaîne	Propriété	Usage
Acide stéarique (C ₁₈)	Linéaire	Émollient occlusif, texture épaisse	Crèmes riches
Squalane (C ₃₀)	Ramifiée	Émollient léger, texture fluide	Sérums, huiles sèches

2. Isomérisation de position

Définition

Les isomères ont le **même groupe fonctionnel**, mais à des **positions différentes** sur la chaîne carbonée.

Exemple : C₃H₈O (propanol)

Isomère	Structure	Position du groupe –OH
Propan-1-ol	 propan-1-ol	En bout de chaîne (C1)
Propan-2-ol	 propan-2-ol	Au milieu de chaîne (C2)

Conséquence

Les propriétés **chimiques** sont légèrement différentes :



- **Réactivité** : l'accessibilité du groupe fonctionnel change
- **Solubilité** : légère différence selon la position
- **Activité biologique** : peut être très différente

3. Isomérisation de fonction

Définition

Les isomères ont des **groupes fonctionnels différents**.

Exemple : C₂H₆O

Isomère	Structure	Fonction
Éthanol	 éthanol	Alcool (–OH)
Méthoxyméthane (éther diméthylque)	 méthoxyméthane	Éther (–O–)

Conséquence

Les propriétés sont **radicalement différentes** :

Propriété	Éthanol (alcool)	Méthoxyméthane (éther)
État à 20 °C	Liquide	Gaz
T _{ébullition}	78 °C	-24 °C
Solubilité dans l'eau	Très soluble	Peu soluble
Odeur	Alcool	Éther

Tableau récapitulatif

Type d'isomérisation	Ce qui change	Propriétés affectées	Exemple
Chaîne	Forme de la chaîne carbonée (linéaire, ramifiée, cyclique)	Propriétés physiques (<i>T_{ébullition}</i> , viscosité, texture)	Butane vs Isobutane
Position	Emplacement du groupe fonctionnel	Réactivité, solubilité, activité biologique	Propan-1-ol vs Propan-2-ol
Fonction	Nature du groupe fonctionnel	Toutes les propriétés (état, solubilité, odeur, activité)	Éthanol (alcool) vs Méthoxyméthane (éther)

✚ À RETENIR :

- ISOMÉRIE DE CHAÎNE = forme différente
→ propriétés PHYSIQUES différentes
- ISOMÉRIE DE POSITION = même fonction, endroit différent
→ réactivité et activité différentes
- ISOMÉRIE DE FONCTION = fonction différente
→ propriétés RADICALEMENT différentes

3 Pourquoi la structure influence les propriétés

Principe général

La **structure** d'une molécule détermine :

1. Sa **forme** dans l'espace
2. Les **interactions** qu'elle peut avoir avec d'autres molécules
3. Son **accessibilité** (réactivité, reconnaissance biologique)

Exemple 1 : Température d'ébullition

Structure	Empilement	Interactions	T _{ébullition}
Linéaire	✓ Bon (comme des crayons)	Fortes	Haute
Ramifiée	✗ Mauvais (comme des arbres)	Faibles	Basse

💡 Plus les molécules s'empilent facilement, plus les forces de Van der Waals sont importantes, plus il faut d'énergie pour les séparer.

Exemple 2 : Activité biologique

Le **menthol** et l'**isomenthol** sont des stéréoisomères ($C_{10}H_{20}O$) :

Molécule	Activité rafraîchissante	Raison
Menthol	✓ Forte	Sa forme spatiale lui permet de se fixer sur les récepteurs TRPM8 (récepteurs au froid)
Isomenthol	✗ Très faible	Sa forme spatiale ne correspond pas bien aux récepteurs TRPM8

💡 Comme une clé et une serrure : seule la bonne forme (menthol) peut activer le récepteur. L'isomenthol, même avec la même formule brute, n'a pas la bonne forme.

4 Comment identifier des isomères ?

Méthode

Pour vérifier si deux molécules sont des isomères :

Étape 1 : Écrire ou vérifier la **formule brute** des deux molécules

Étape 2 : Comparer les formules brutes

- Si **différentes** → ce ne sont **pas** des isomères
- Si **identiques** → ce **peuvent** être des isomères (aller étape 3)

Étape 3 : Comparer les **structures** (formules topologiques)

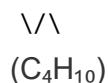
- Si **identiques** → ce sont les **mêmes molécules**
- Si **différentes** → ce **sont des isomères**

Étape 4 : Identifier le **type d'isomérisation**

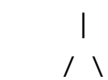
- Chaîne différente ? → **Isomérisation de chaîne**
- Même fonction, position différente ? → **Isomérisation de position**
- Fonction différente ? → **Isomérisation de fonction**

Exemple d'application

Molécule A :



Molécule B :



1. Formules brutes : $\text{C}_4\text{H}_{10} = \text{C}_4\text{H}_{10}$ ✓ (peuvent être des isomères)
2. Structures : **différentes** (linéaire vs ramifiée) ✓ (sont des isomères)
3. Type : **chaîne** (forme de la chaîne carbonée différente)

5 Importance en cosmétique

Sur une fiche technique

Une fiche technique cosmétique indique **toujours** :

- Le **nom INCI** (nomenclature internationale)
- La **formule topologique** (ou le nom IUPAC complet)
- **Jamais** juste la formule brute

Pourquoi ? Parce que la formule brute seule ne permet pas de distinguer les isomères, qui peuvent avoir des propriétés radicalement différentes.

Exemples cosmétiques

Ingrédient	Formule brute	Isomérisation ?	Conséquence
Menthol vs Isomenthol	$C_{10}H_{20}O$	Stéréoisomères	Seul le menthol est rafraîchissant
Acide stéarique (linéaire) vs Isostéarate (ramifié)	$C_{18}H_{36}O_2$	Chaîne	Texture différente (épais vs léger)
Rétinol vs Isotrétinoïne	$C_{20}H_{28}O_2$	Position (double liaison)	Activité et toxicité différentes

Contrôle qualité

Lors du contrôle d'un lot d'ingrédient :

1. Vérifier la **formule topologique** (pas juste la formule brute)
2. Comparer avec la fiche technique de référence
3. En cas de doute, analyse instrumentale (RMN, spectrométrie de masse)

À retenir pour l'E2

Définitions essentielles

Terme	Définition
Isomère	Molécule ayant la même formule brute qu'une autre mais une structure différente
Isomérisation de constitution	Isomères dont l'enchaînement des atomes est différent
Isomérisation de chaîne	Isomères de constitution dont la chaîne carbonée est différente
Isomérisation de position	Isomères de constitution dont le groupe fonctionnel est à des positions différentes
Isomérisation de fonction	Isomères de constitution dont les groupes fonctionnels sont différents

Règles pratiques

Règle	Application
Même formule brute + structures différentes = isomères	Vérifier si deux molécules sont des isomères
Chaîne linéaire → T _{ébullition} plus haute	Comparer des isomères de chaîne
Chaîne ramifiée → texture plus légère	Choisir un émollient en cosmétique
Même fonction, position différente → réactivité différente	Isomérisation de position
Fonction différente → propriétés radicalement différentes	Isomérisation de fonction

Vocabulaire à maîtriser

- **Isomère – Formule brute – Structure – Isomérisation de constitution**
- **Isomérisation de chaîne, de position, de fonction**
- **Chaîne linéaire, ramifiée, cyclique**
- **Groupe fonctionnel – Position**
- **Propriété physique** (T_{ébullition}, viscosité, texture)
- **Propriété chimique** (réactivité, solubilité, activité biologique)

Lien avec la suite de la progression

Séance	Réinvestissement
S17	Représentations → ici : comparer des formules topologiques d'isomères
S19	Fonctions organiques → isomérisation de fonction (alcool vs éther vs cétone)
S20	TP3 dossier moléculaire → identifier des isomères dans un contexte E2, choisir le bon isomère
S22	Évaluation E2 → exploiter des données sur des isomères (propriétés, activité)

Fiche méthode associée

➡ Fiche méthode 01 – Justifier une réponse scientifique (O.A.C.J.)

➡ Fiche méthode 08 – Reconnaître les fonctions organiques