

S17 – Représentations des molécules organiques

1 Les trois modes de représentation

Pourquoi trois représentations ?

Une même molécule organique peut être représentée de **trois façons** différentes, selon le niveau de détail souhaité. Chaque représentation a ses avantages et ses usages.

1. Formule brute

Définition

La **formule brute** (ou moléculaire) indique le **nombre** d'atomes de chaque élément présent dans la molécule.

Notation



Convention : Les éléments sont écrits dans l'ordre : C, H, puis les autres par ordre alphabétique (N, O, S...).

Exemple : le butane



4 atomes de carbone, 10 atomes d'hydrogène.

Avantages et limites

Avantage	Limite
<input checked="" type="checkbox"/> Très compacte, facile à écrire	<input checked="" type="checkbox"/> Ne montre pas comment les atomes sont reliés

Avantage	Limite
<input checked="" type="checkbox"/> Permet de calculer la masse molaire	 Plusieurs molécules peuvent avoir la même formule brute (isomères, cf. S18)

2. Formule semi-développée

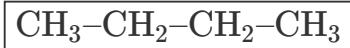
Définition

La **formule semi-développée** montre l'**enchaînement** des atomes de carbone et les groupes de liaisons (CH_3 , CH_2 , CH , C).

Convention

- Les liaisons **C–C** sont représentées par des **tirets** (-)
- Les hydrogènes liés à chaque carbone sont **écrits** à côté du C
- Les liaisons **C–H** ne sont **pas dessinées** (pour alléger)

Exemple : le butane



Notation des groupes

Groupe	Nombre de liaisons C–C	Exemple
CH_3	1 (en bout de chaîne)	Extrémité
CH_2	2 (au milieu de chaîne)	Milieu
CH	3 (carbone ramifié)	Branchement
C	4 (carbone quaternaire)	Centre de ramifications

Avantages et limites

Avantage	Limite
<input checked="" type="checkbox"/> Montre la structure de la chaîne	 Longue à écrire pour les grandes molécules
<input checked="" type="checkbox"/> Facile à comprendre	 Ne montre pas la géométrie 3D

3. Formule topologique (ou développée)

Définition

La **formule topologique** est une représentation **simplifiée** où :

- Chaque **sommet** du zigzag = **1 atome de carbone**
- Chaque **extrémité** de trait = **1 atome de carbone**
- Les **hydrogènes** ne sont **pas écrits** (implicites)
- Les **liaisons C–C** sont représentées par des **traits**

Convention du carbone tétravalent

Le carbone fait **toujours 4 liaisons**. Si on ne voit que 1, 2 ou 3 liaisons (avec d'autres carbones ou groupes fonctionnels), le reste est complété par des **hydrogènes non dessinés**.

Nombre de liaisons visibles	Nombre de H implicites	Groupe
1 (bout de chaîne)	3	CH ₃
2 (milieu de chaîne)	2	CH ₂
3 (carbone ramifié)	1	CH
4 (carbone quaternaire)	0	C

Exemple : le butane



4 sommets = 4 carbones. Les hydrogènes ne sont pas écrits mais sont présents : CH₃–CH₂–CH₂–CH₃.

Avantages et limites

Avantage	Limite
<input checked="" type="checkbox"/> Très compacte	<input type="checkbox"/> Nécessite de connaître les conventions
<input checked="" type="checkbox"/> Montre la géométrie de la molécule	<input type="checkbox"/> Les H ne sont pas visibles
<input checked="" type="checkbox"/> Utilisée universellement en chimie	

★ À RETENIR :

- BRUTE = inventaire (nombre d'atomes)
- SEMI-DÉVELOPPÉE = enchaînement (groupes CH₃, CH₂...)
- TOPOLOGIQUE = géométrie simplifiée (sommets = C)
- Sommet ou extrémité = 1 atome de CARBONE
- Les HYDROGÈNES sont IMPLICITES (non écrits)
- Le carbone fait TOUJOURS 4 liaisons

2 Conversion entre représentations

Brute → Semi-développée

Méthode :

1. Compter les **C** dans la formule brute
2. Répartir les C en **CH₃** (bouts) et **CH₂** (milieu)
3. Relier avec des **tirets** (-)

Exemple : C₅H₁₂ → ?

- 5 C → 2 × CH₃ (bouts) + 3 × CH₂ (milieu)
- CH₃–CH₂–CH₂–CH₂–CH₃

Semi-développée → Topologique

Méthode :

1. Repérer chaque **groupe** (CH₃, CH₂, CH, C)
2. Remplacer chaque groupe par un **sommet** ou une **extrémité**
3. Relier les sommets par des **traits** (liaisons C–C)
4. **Ne pas écrire** les hydrogènes

Exemple : CH₃–CH₂–CH₃ → ?

- 3 groupes → 3 sommets
- Relier en zigzag :



Topologique → Semi-développée

Méthode :

1. Compter les **sommets** et **extrémités** → nombre de carbones
2. Pour chaque carbone, compter les **liaisons visibles**
3. Compléter avec des **hydrogènes** pour arriver à **4 liaisons**
4. Écrire CH_3 (1 liaison), CH_2 (2 liaisons), CH (3 liaisons), C (4 liaisons)

Exemple :



- 4 sommets → 4 C
- C1 (bout, 1 liaison) → CH_3
- C2 (milieu, 2 liaisons) → CH_2
- C3 (milieu, 2 liaisons) → CH_2
- C4 (bout, 1 liaison) → CH_3
- Résultat : $\text{CH}_3\text{--CH}_2\text{--CH}_2\text{--CH}_3$

Topologique → Brute

Méthode :

1. Compter les **sommets** → nombre de C
2. Pour chaque C, compter les **liaisons visibles**, compléter avec H
3. Additionner tous les H

4. Écrire $C_x H_y$

Exemple : $/// \rightarrow ?$

- 5 sommets $\rightarrow \mathbf{5 C}$
- Bouts ($2\times$) : 1 liaison $\rightarrow 3 H$ chacun = 6 H
- Milieu ($3\times$) : 2 liaisons $\rightarrow 2 H$ chacun = 6 H
- Total : 5 C + 12 H $\rightarrow \mathbf{C_5H_{12}}$

3 Les chaînes carbonées

Définition

La **chaîne carbonée** est la succession d'atomes de carbone reliés entre eux dans une molécule organique.

Les trois types de chaînes

1. Chaîne linéaire (ou non ramifiée)

Définition : Tous les atomes de carbone sont alignés en une **seule chaîne**, sans ramifications.

Exemple : le pentane (C_5H_{12})

Formule semi-développée : $CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-CH_3$

Formule topologique :

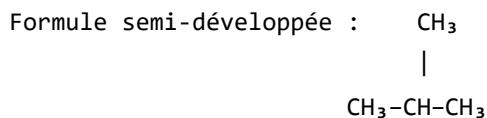


En cosmétique : Acides gras saturés (acide laurique C_{12} , acide stéarique C_{18}), paraffine liquide.

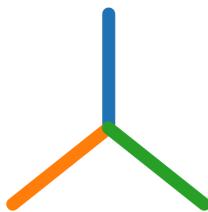
2. Chaîne ramifiée

Définition : La chaîne principale porte une ou plusieurs **ramifications** (branches secondaires).

Exemple : l'isobutane (C_4H_{10})



Formule topologique :

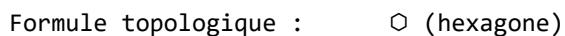


En cosmétique : Squalane (émollient ramifié, texture légère), isohexadécane (émollient volatile).

3. Chaîne cyclique

Définition : Les atomes de carbone forment un **anneau fermé** (cycle).

Exemple : le cyclohexane (C_6H_{12})



En cosmétique : Menthol (cyclohexane + OH + ramifications), cyclométhicone (silicone cyclique).

Propriétés liées à la structure

Type de chaîne	Propriété principale	Exemple cosmétique
Linéaire longue	Émollient occlusif, film protecteur	Acide stéarique (C_{18})

Type de chaîne	Propriété principale	Exemple cosmétique
Ramifiée	Texture légère, pénétration rapide	Squalane
Cyclique	Propriétés spécifiques (odeur, activité)	Menthol (rafraîchissant)

📌 À RETENIR :

- LINÉAIRE = tous les C alignés (comme un fil)
- RAMIFIÉE = branches qui partent de la chaîne principale
- CYCLIQUE = anneau fermé (les C forment un polygone)

- Structure → Propriété
 - Chaîne longue → émollient
 - Ramification → texture légère
 - Cycle → activité spécifique

4 Application en cosmétique

Lecture d'une fiche technique

Sur une fiche technique d'ingrédient cosmétique, la structure de la molécule est **presque toujours** représentée en **formule topologique**.

Exemple : fiche technique du squalane

Nom INCI : Squalane

Fonction : Émollient

Structure : [formule topologique montrant chaîne ramifiée $C_{30}H_{62}$]

Origine : Olive ou canne à sucre (squalane végétal)

Ce que la formule topologique nous apprend :

- **Chaîne ramifiée** → texture légère, non grasse
- **30 carbones** → molécule longue, émollient efficace
- **Pas de double liaison** → stable à l'oxydation (contrairement au squalène $C_{30}H_{50}$)

Contrôle qualité

Situation : Un lot d'acide stéarique ($C_{18}H_{36}O_2$) est livré. La fiche technique montre une formule topologique.

Démarche :

1. Compter les **sommets** → doit correspondre à 18 C
2. Vérifier la **chaîne linéaire** (pas de ramifications)
3. Repérer le **groupe COOH** (acide carboxylique) à une extrémité
4. Si la structure correspond → valider le lot
5. Si la structure diffère → suspicion d'erreur (mauvais ingrédient, lot contaminé)

📌 À retenir pour l'E2

Définitions essentielles

Terme	Définition
Formule brute	Nombre d'atomes de chaque élément ($C_x H_y \dots$)
Formule semi-développée	Enchaînement des groupes (CH_3 , CH_2 , $CH \dots$) avec liaisons C–C
Formule topologique	Représentation simplifiée (sommets = C, H implicites)
Chaîne carbonée	Succession d'atomes de carbone reliés
Chaîne linéaire	Tous les C alignés en une seule chaîne
Chaîne ramifiée	Chaîne principale + branches secondaires
Chaîne cyclique	Atomes de C formant un anneau fermé

Règles pratiques

Règle	Application
Sommet ou extrémité = 1 C	Compter les carbones dans une formule topologique
Carbone tétravalent (4 liaisons)	Calculer les H implicites

Règle	Application
1 liaison visible → CH_3	Bout de chaîne
2 liaisons visibles → CH_2	Milieu de chaîne
3 liaisons visibles → CH	Carbone ramifié
4 liaisons visibles → C	Carbone quaternaire

Méthodes de conversion

Conversion	Méthode clé
Brute → Semi-développée	Répartir les C en CH_3 (bouts) et CH_2 (milieu)
Semi-développée → Topologique	Remplacer les groupes par des sommets, relier
Topologique → Semi-développée	Compter liaisons par C, compléter avec H
Topologique → Brute	Compter sommets (C) et H implicites

Vocabulaire à maîtriser

- **Formule brute, semi-développée, topologique**
- **Chaîne carbonée – Linéaire, ramifiée, cyclique**
- **Sommet – Carbone tétraivalent – Hydrogène implicite**
- **Conversion – Groupe (CH_3 , CH_2 , CH , C)**
- **Ramification – Cycle – Anneau**

🔗 Lien avec la suite de la progression

Séance	Réinvestissement
S18	Isomérie → même formule brute, représentations topologiques différentes
S19	Fonctions organiques → ajouter les groupes fonctionnels (OH, C=O, NH ₂) sur les chaînes
S20	TP3 dossier moléculaire → identifier des ingrédients à partir de leur formule topologique
S22	Évaluation E2 → lire et interpréter des formules topologiques dans un dossier



Fiche méthode associée

- ➡ **Fiche méthode 01 – Justifier une réponse scientifique (O.A.C.J.)**
- ➡ **Fiche méthode 08 – Reconnaître les fonctions organiques** (*sera utilisée en S19*)