

S17 – Représentations des molécules organiques

1 Les trois modes de représentation

Pourquoi trois représentations ?

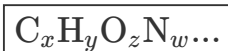
Une même molécule organique peut être représentée de **trois façons** différentes, selon le niveau de détail souhaité. Chaque représentation a ses avantages et ses usages.

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
✓ Très compacte, facile à écrire	✗ Ne montre pas comment les atomes sont reliés

Avantage	Limite
✓ Permet de calculer la masse molaire	✗ Plusieurs molécules peuvent avoir la même formule brute (isomères, cf. S18)

2. Formule semi-développée

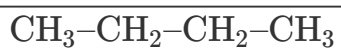
Définition

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 ramification

Avantages et limites

Avantage	Limite
✓ Montre la structure de la chaîne	✗ Longue à écrire pour les grandes molécules
✓ 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
✓ Très compacte	✗ Nécessite de connaître les conventions
✓ Montre la géométrie de la molécule	✗ Les H ne sont pas visibles
✓ Utilisée universellement en chimie	

✦ À RETENIR :

- BRUTE = inventaire (nombre d'atomes)
- SEMI-DÉVELOPPÉE = enchaînement (groupes CH_3 , $\text{CH}_2\ldots$)
- 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 **CH_3** (bouts) et **CH_2** (milieu)
3. Relier avec des **tirets** (—)

Exemple : $\text{C}_5\text{H}_{12} \rightarrow ?$

- $5 \text{ C} \rightarrow 2 \times \text{CH}_3 \text{ (bouts)} + 3 \times \text{CH}_2 \text{ (milieu)}$
- $\text{CH}_3\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_3$

Semi-développée → Topologique

Méthode :

1. Repérer chaque **groupe** (CH_3 , CH_2 , 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 : $\text{CH}_3\text{—CH}_2\text{—CH}_3 \rightarrow ?$

- 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 CH₃ (1 liaison), CH₂ (2 liaisons), CH (3 liaisons), C (4 liaisons)

Exemple :



- 4 sommets → 4 C
- C1 (bout, 1 liaison) → CH₃
- C2 (milieu, 2 liaisons) → CH₂
- C3 (milieu, 2 liaisons) → CH₂
- C4 (bout, 1 liaison) → CH₃
- Résultat : CH₃–CH₂–CH₂–CH₃

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_xH_y

Exemple : $/// \rightarrow ?$

- 5 sommets \rightarrow **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 **C₅H₁₂**

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 ramification.

Exemple : le pentane (C₅H₁₂)

Formule semi-développée : CH₃-CH₂-CH₂-CH₂-CH₃

Formule topologique :

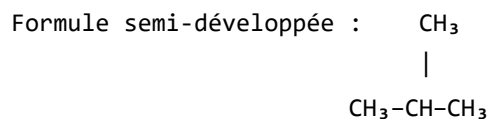


En cosmétique : Acides gras saturés (acide laurique C₁₂, acide stéarique C₁₈), paraffine liquide.

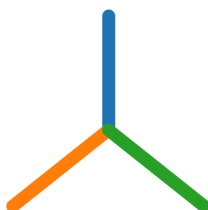
2. Chaîne ramifiée

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

Exemple : l'isobutane (C₄H₁₀)



Formule topologique :

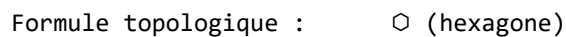


En cosmétique : Squalane (émollient ramifié, texture légère), isohexadécane (émollient volatile).

3. Chaîne cyclique

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

Exemple : le cyclohexane (C₆H₁₂)



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 ramification)
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 ($C_xH_y...$)
Formule semi-développée	Enchaînement des groupes (CH_3 , CH_2 , $CH...$) 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 tétravalent – Hydrogène implicite
- Conversion – Groupe (CH₃, CH₂, CH, C)
- Ramification – Cycle – Anneau



Lien avec la suite de la progression

Séance	Réinvestissement
S18	Isomérisie → 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*)