

# S17 – Représentations des molécules organiques

## 1 Les trois modes de représentation

### Pourquoi trois représentations ?

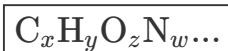
Une même molécule organique peut être représentée de **trois façons** différentes, selon le niveau de détail souhaité. Chaque représentation a ses avantages et ses usages.

### 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

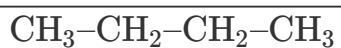
### Définition

La **formule semi-développée** montre l'**enchaînement** des atomes de carbone et les groupes de liaisons ( $\text{CH}_3$ ,  $\text{CH}_2$ ,  $\text{CH}$ ,  $\text{C}$ ).

### 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
$\text{CH}_3$	1 (en bout de chaîne)	Extrémité
$\text{CH}_2$	2 (au milieu de chaîne)	Milieu
$\text{CH}$	3 (carbone ramifié)	Branchement
$\text{C}$	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 <sub>3</sub>
2 (milieu de chaîne)	2	CH <sub>2</sub>
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 : CH<sub>3</sub>–CH<sub>2</sub>–CH<sub>2</sub>–CH<sub>3</sub>.

#### 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  $\text{CH}_3$ ,  $\text{CH}_2\ldots$ )
- 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  **$\text{CH}_3$**  (bouts) et  **$\text{CH}_2$**  (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** ( $\text{CH}_3$ ,  $\text{CH}_2$ ,  $\text{CH}$ , 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 CH<sub>3</sub> (1 liaison), CH<sub>2</sub> (2 liaisons), CH (3 liaisons), C (4 liaisons)

### Exemple :



- 4 sommets → 4 C
- C1 (bout, 1 liaison) → CH<sub>3</sub>
- C2 (milieu, 2 liaisons) → CH<sub>2</sub>
- C3 (milieu, 2 liaisons) → CH<sub>2</sub>
- C4 (bout, 1 liaison) → CH<sub>3</sub>
- Résultat : CH<sub>3</sub>–CH<sub>2</sub>–CH<sub>2</sub>–CH<sub>3</sub>

## 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<sub>x</sub>H<sub>y</sub>

**Exemple : ///** → ?

- 5 sommets → **5 C**
- Bouts (2×) : 1 liaison → 3 H chacun = 6 H
- Milieu (3×) : 2 liaisons → 2 H chacun = 6 H
- Total : 5 C + 12 H → **C<sub>5</sub>H<sub>12</sub>**

## 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 (C<sub>5</sub>H<sub>12</sub>)**

Formule semi-développée : CH<sub>3</sub>-CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-CH<sub>3</sub>

Formule topologique :

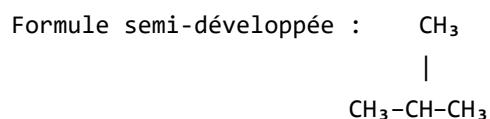


**En cosmétique** : Acides gras saturés (acide laurique C<sub>12</sub>, acide stéarique C<sub>18</sub>), paraffine liquide.

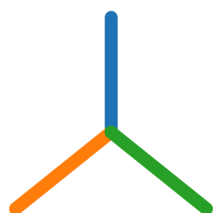
#### 2. Chaîne ramifiée

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

### Exemple : l'isobutane (C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>)



Formule topologique :

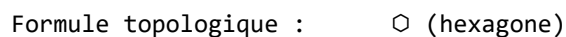


**En cosmétique :** Squalane (émollient ramifié, texture légère), isohexadécane (émollient volatile).

## 3. Chaîne cyclique

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

### Exemple : le cyclohexane (C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>)



**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 <sub>18</sub> )
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
<b>Formule brute</b>	Nombre d'atomes de chaque élément ( $C_xH_y...$ )
<b>Formule semi-développée</b>	Enchaînement des groupes ( $CH_3$ , $CH_2$ , $CH...$ ) avec liaisons C–C
<b>Formule topologique</b>	Représentation simplifiée (sommets = C, H implicites)
<b>Chaîne carbonée</b>	Succession d'atomes de carbone reliés
<b>Chaîne linéaire</b>	Tous les C alignés en une seule chaîne
<b>Chaîne ramifiée</b>	Chaîne principale + branches secondaires
<b>Chaîne cyclique</b>	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
1 liaison visible → $CH_3$	Bout de chaîne

Règle	Application
2 liaisons visibles → CH <sub>2</sub>	Milieu de chaîne
3 liaisons visibles → CH	Carbone ramifié
4 liaisons visibles → C	Carbone quaternaire

## Méthodes de conversion

Conversion	Méthode clé
<b>Brute → Semi-développée</b>	Répartir les C en CH <sub>3</sub> (bouts) et CH <sub>2</sub> (milieu)
<b>Semi-développée → Topologique</b>	Remplacer les groupes par des sommets, relier
<b>Topologique → Semi-développée</b>	Compter liaisons par C, compléter avec H
<b>Topologique → Brute</b>	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 (CH<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>, CH, C)**
- **Ramification – Cycle – Anneau**



## Lien avec la suite de la progression

Séance	Réinvestissement
<b>S18</b>	Isomérisie → même formule brute, représentations topologiques différentes
<b>S19</b>	Fonctions organiques → ajouter les groupes fonctionnels (OH, C=O, NH <sub>2</sub> ) sur les chaînes
<b>S20</b>	TP3 dossier moléculaire → identifier des ingrédients à partir de leur formule topologique
<b>S22</b>	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*)