

# S18 – Isomérisation de constitution


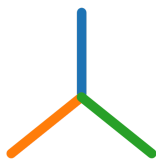
## 1 Qu'est-ce qu'un isomère ?

### 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 <sub>ébullition</sub>
Butane	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	Linéaire 	Linéaire
Isobutane	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	Ramifiée 	-11,7 °C

✳ À RETENIR :

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

## 2 Les trois types d'isomérie de constitution



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

### 1. Isomérie de chaîne

#### Définition

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

**Exemple :  $C_5H_{12}$  (pentane et isopentane)**

Isomère	Structure	Type de chaîne
Pentane		Linéaire (5 C alignés)
Isopentane (2-méthylbutane)		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
<b>Acide stéarique</b> (C <sub>18</sub> )	Linéaire	Émollient occlusif, texture épaisse	Crèmes riches
<b>Squalane</b> (C <sub>30</sub> )	Ramifiée	Émollient léger, texture fluide	Sérums, huiles sèches
<b>Dodécane</b> (C <sub>12</sub> H <sub>26</sub> )	Linéaire	Toucher plus "gras", évaporation plus lente	Solvant / support
<b>Isododécane</b> (C <sub>12</sub> H <sub>26</sub> )	Ramifiée	Toucher sec, évaporation plus rapide, améliore la tenue	Maquillage longue tenue, sprays

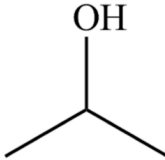
## 2. Isomérisation de position

### Définition

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

### Exemple : C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>O (propanol)

Isomère	Structure	Position du groupe –OH
Propan-1-ol		En bout de chaîne (C1)

Isomère	Structure	Position du groupe –OH
Propan-2-ol		Au milieu de chaîne (C2)

## Conséquence

Les propriétés **chimiques** sont légèrement différentes :

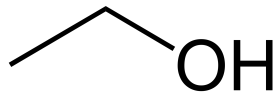
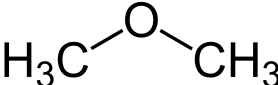
- **Réactivité** : l'accessibilité du groupe fonctionnel change
- **Solubilité** : légère différence selon la position
- **Activité biologique** : peut être très différente

## 3. Isomérisie de fonction

### Définition

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

### Exemple : C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>O

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

## Conséquence

Les propriétés sont **radicalement différentes** :

Propriété	Éthanol (alcool)	Méthoxyméthane (éther)
État à 20 °C	Liquide	Gaz
T <sub>ébullition</sub>	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
<b>Chaîne</b>	Forme de la chaîne carbonée (linéaire, ramifiée, cyclique)	Propriétés <b>physiques</b> ( <i>T<sub>ébullition</sub></i> , viscosité, texture)	Butane vs Isobutane
<b>Position</b>	Emplacement du groupe fonctionnel	Réactivité, solubilité, activité biologique	Propan-1-ol vs Propan-2-ol
<b>Fonction</b>	Nature du groupe fonctionnel	<b>Toutes</b> 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 <sub>ébullition</sub>
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)

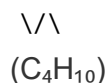
- Si **identiques** → ce sont les **mêmes molécules**
- Si **différentes** → ce **sont des isomères**

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

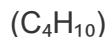
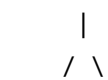
- Chaîne différente ? → **Isomérisation de chaîne**
- Même fonction, position différente ? → **Isomérisation de position**
- Fonction différente ? → **Isomérisation de fonction**

### Exemple d'application

**Molécule A :**



**Molécule B :**



1. Formules brutes : **C<sub>4</sub>H<sub>10</sub> = C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>** ✓ (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
<b>Menthol</b> vs <b>Isomenthol</b>	$C_{10}H_{20}O$	Stéréoisomères	Seul le menthol est rafraîchissant
<b>Acide stéarique</b> (linéaire) vs <b>Isostéarate</b> (ramifié)	$C_{18}H_{36}O_2$	Chaîne	Texture différente (épais vs léger)
<b>Rétinol</b> vs <b>Isotrétinoïne</b>	$C_{20}H_{28}O_2$	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
<b>Isomère</b>	Molécule ayant la même formule brute qu'une autre mais une structure différente
<b>Isomérisation de constitution</b>	Isomères dont l'enchaînement des atomes est différent
<b>Isomérisation de chaîne</b>	Isomères de constitution dont la chaîne carbonée est différente
<b>Isomérisation de position</b>	Isomères de constitution dont le groupe fonctionnel est à des positions différentes
<b>Isomérisation de fonction</b>	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 <sub>ébullition</sub> 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<sub>ébullition</sub>, viscosité, texture)
- **Propriété chimique** (réactivité, solubilité, activité biologique)

## Lien avec la suite de la progression

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