



Fiche de synthèse n° 1.d

Isomérisation

Les isomères sont des espèces chimiques de même formule brute qui diffèrent par :

- l'ordre ou la nature des liaisons (isomérisation de constitution),
- la disposition des atomes dans l'espace (stéréoisomérisation).

1. Isomères de constitution

Les **isomères de constitution** sont des molécules qui possèdent la **même formule brute** mais ont des **formules développées différentes**

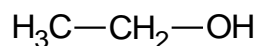
Les isomères ont des propriétés physiques, chimiques et biologiques différentes.

On distingue trois types d'isomérisation :

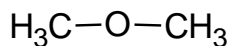
- **Isomérisation de fonction** : les molécules présentent des groupes caractéristiques différents.

Exemples :

Éthanol



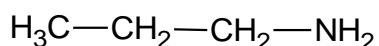
Méthoxyméthane



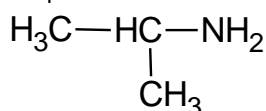
- **Isomérisation de position** : les molécules possèdent la même fonction, mais le groupement caractéristique est porté par des carbones différents de la chaîne carbonée.

Exemples :

Propan-1-amine



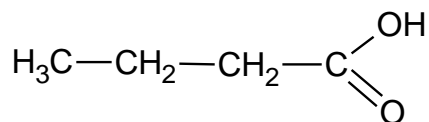
Propan-2-amine



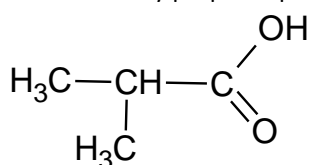
- **Isomérisation de chaîne** : l'enchaînement des atomes sur la chaîne carbonée est différent.

Exemples :

Acide butanoïque



Acide 2-méthylpropanoïque



2. Stéréoisomères

Quand on étudie une molécule dans l'espace, des nouveaux types d'isomérisation apparaissent : on parle de stéréoisomérisation.



Des **stéréoisomères** sont des isomères qui ont la même formule développée mais qui diffèrent par la disposition de leurs atomes dans l'espace.

On distingue 2 types de stéréoisomères :

- les isomères de conformation
- les isomères de configuration

2.1. Les isomères de conformation

On appelle **conformation** d'une molécule les différentes représentations spatiales qu'elle peut prendre par suite de **libre rotation** autour de ses simples liaisons.

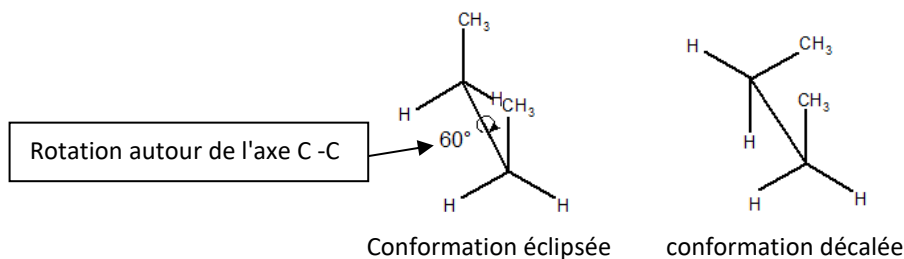
Deux **conformères** représentent donc la même molécule, dans des dispositions spatiales et d'état d'énergie différents. Le passage d'une conformation à une autre se fait par simple rotation autour d'une liaison simple **sans rupture de liaison**.

Remarque : Le passage d'une conformation à une autre se fait rapidement à température ambiante. Un composé existe donc successivement sous différentes conformations en équilibre entre elles.

Parmi toutes les conformations, il en existe deux plus particulières :

- Les **conformations éclipsées**, dans lesquelles les groupes d'atomes portés par le 1^{er} carbone à l'avant occultent les groupes d'atomes portés par le carbone de derrière
- Les **conformations décalées**, dans lesquelles les groupes d'atomes placés devant sont situés exactement à la même distance de deux groupes d'atomes de derrière

Exemple : différentes conformations du butane

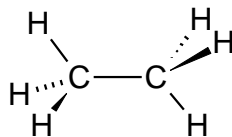


La **conformation la plus stable** énergétiquement est celle pour laquelle :

- les liaisons covalentes sont les plus éloignées (moins de répulsions électroniques)
- les gros substituants sont les plus éloignés (moins de gêne stérique)

La conformation la plus stable est donc une conformation décalée.

Exemple : conformation la plus stable de l'éthane



L'isomérisation de conformation est très importante dans les phénomènes du monde vivant :

- les réactions de synthèse des protéines
- les réactions de duplication de l'ADN
- l'efficacité des enzymes



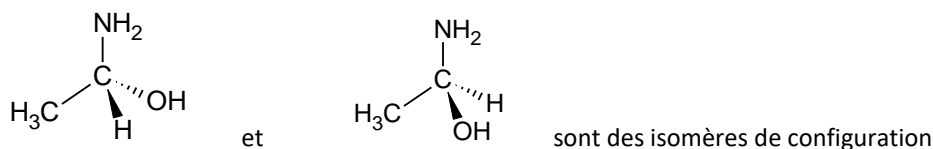
Certains composés d'intérêt thérapeutique peuvent parfois se révéler davantage actifs sous l'une ou l'autre de leurs conformations.

2.2. Les isomères de configuration

Des **isomères de configuration** sont des molécules différentes qui ont la même formule développée mais une représentation spatiale différente. Elles ne sont **pas superposables**.

Pour passer d'une configuration à l'autre, il faut **rompre des liaisons**.

Exemple :

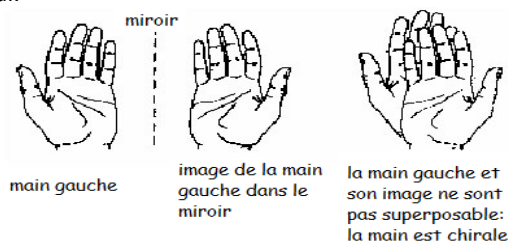


On passe de l'une à l'autre en cassant une liaison simple.

Un objet est dit **chiral** s'il n'est pas superposable à son image dans un miroir plan.

De nombreux composés qui existent dans les organismes vivants sont chiraux.

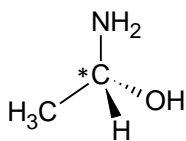
Exemple: une main est un objet chiral.



Un atome de **carbone asymétrique**, noté C*, est un atome de carbone **tétraédrique**, lié à 4 groupes d'atomes tous différents.

Une molécule contenant un seul atome de **carbone asymétrique** est forcément **chirale**.

Exemple :



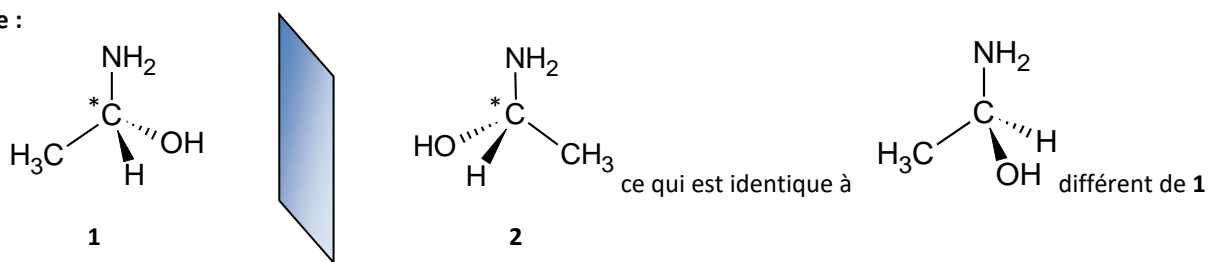
Cette molécule est chirale car elle présente un carbone asymétrique et un seul.

Remarque : des molécules qui comportent plusieurs atomes de carbone asymétriques ne sont pas forcément chirales. Si elles présentent un axe, plan ou centre de symétrie, alors elles sont superposables à leur image dans un miroir et donc non chirales.

Une molécule chirale peut exister sous **2 configuration différentes**, image l'une de l'autre dans un miroir. Ces deux configurations sont appelées **énantiomères**.



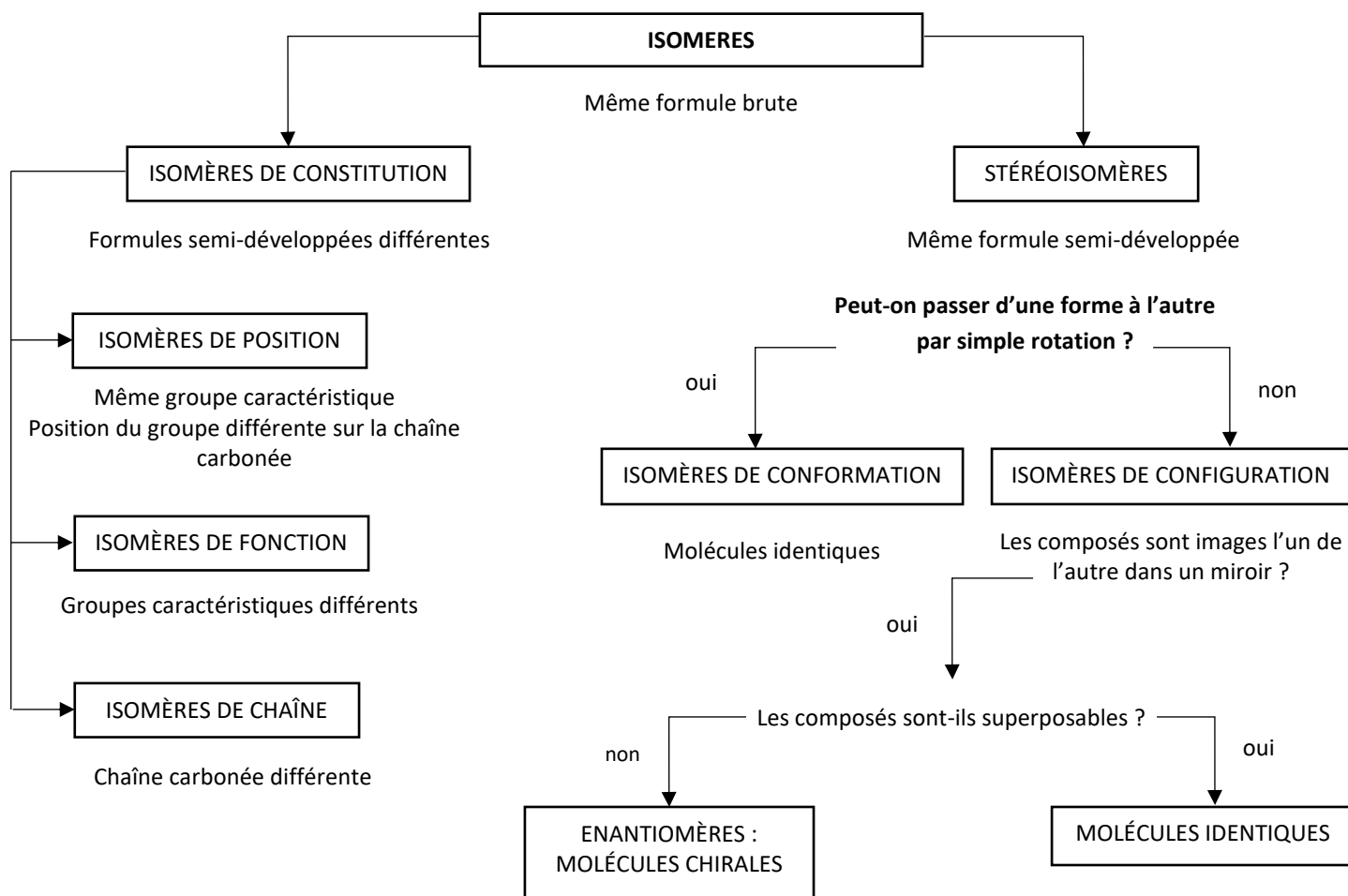
Exemple :



Les molécules 1 et 2 sont images l'une de l'autre dans un miroir et sont non superposables : elles sont donc énantiomères.

Deux énantiomères ont des **propriétés chimiques et physiques similaires** (tant que le réactif mis en jeu n'est pas chiral), mais des **propriétés biologiques différentes**.

Remarque : un mélange contenant les deux énantiomères d'un composé en proportions égales est appelé mélange racémique.





Fiche de synthèse n° 1.a

Les différentes représentations des molécules organiques

1. Les différentes formules chimiques

1.1. Formules brutes, développées, semi-développées et topologiques

La **formule brute** indique l'ensemble des constituants d'un édifice. Le nombre de chacun d'entre eux est porté en indice en bas à droite du symbole de l'élément. S'il s'agit d'un ion, la charge globale de l'édifice est inscrite en haut à droite.

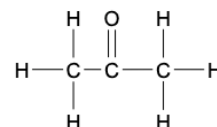
Exemples : Une molécule d'eau comporte un atome d'oxygène et deux atomes d'hydrogène, on la note : H_2O .

L'aspirine a pour formule brute $\text{C}_9\text{H}_8\text{O}_4$ cela veut dire qu'elle comporte 9 atomes de carbone, 8 atomes d'hydrogène et 4 atomes d'oxygène.

L'ion hydroxyde HO^- est constitué de 1 atome d'hydrogène et de 1 atome d'oxygène, l'ensemble de l'édifice portant 1 charge globale négative.

La **formule développée** montre les liaisons covalentes (simples ou multiples) mises en jeu entre les différents constituants. Elle explique comment les atomes sont reliés les uns aux autres au sein de l'édifice.

Exemple : Une formule développée de la molécule de formule brute $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$ est donnée par la représentation ci-contre :

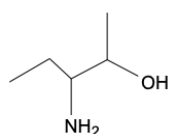


La **formule semi-développée** permet de condenser les liaisons mettant en jeu des atomes d'hydrogène autour des atomes concernés pour plus de lisibilité.

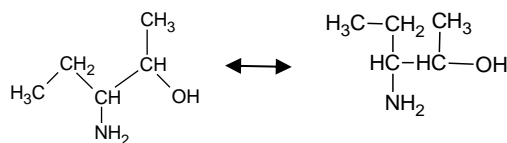
Ainsi la molécule précédente s'écrirait : $\text{H}_3\text{C}-\overset{\text{O}}{\underset{\parallel}{\text{C}}}-\text{CH}_3$

La **formule topologique** représente le squelette carboné par une simple ligne brisée où apparaissent, si cela est nécessaire, les doubles liaisons. Seuls les atomes autres que ceux de C et leurs H associés sont explicitement écrits.

La formule topologique de la molécule précédente est donnée par :





La molécule ci-contre représentée en formule semi-développée s'écrirait :

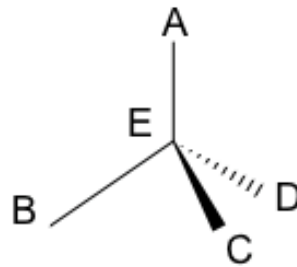
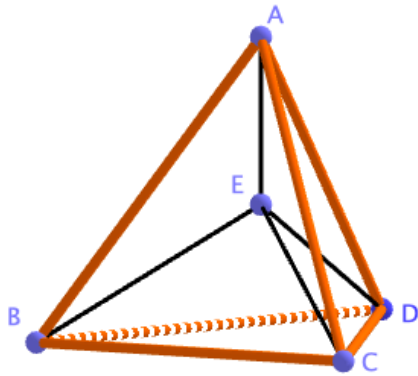




1.2. La représentation de Cram

La représentation de Cram permet de représenter la position des atomes dans l'espace en utilisant les conventions suivantes :

- Les liaisons qui s'effectuent dans le plan de la feuille sont représentées par : —
- les liaisons qui s'effectuent en avant du plan de la feuille sont représentées par : 
- Les liaisons qui s'effectuent en arrière du plan de la feuille sont représentées par : 



2. Les groupes caractéristiques

Un **groupe caractéristique** est un groupe d'atomes qui confère des propriétés spécifiques aux molécules qui le possèdent. On dit que ces molécules forment une **famille chimique**.



GROUPE CARACTERISTIQUE	FAMILLES	FORMULE GENERALE DE LA FAMILLE
Groupe hydroxyle —OH	ALCOOL	R—OH
Groupe carbonyle $\begin{array}{c} \text{—C—} \\ \\ \text{O} \end{array}$	ALDEHYDE	R—C—H $\begin{array}{c} \\ \text{O} \end{array}$
Groupe carbonyle $\begin{array}{c} \text{—C—} \\ \\ \text{O} \end{array}$	CETONE	R—C—R_1 $\begin{array}{c} \\ \text{O} \end{array}$
Groupe carboxyle $\begin{array}{c} \text{—C—OH} \\ \\ \text{O} \end{array}$	ACIDE CARBOXYLIQUE	R—C—OH $\begin{array}{c} \\ \text{O} \end{array}$
Groupe amino —NH_2	AMINE	R—NH_2

Remarque : R et R₁ sont des groupes alkyles.

3. La nomenclature et les familles chimiques

Un **alcane** est une molécule organique composé uniquement de C et H relié par des liaisons simples.

Le nom d'un composé organique peut être découpé en 3 parties : **préfixe(s) / radical / suffixe**

- **Le radical** est fixé par le nombre d'atomes de carbone de la chaîne carbonée principale la plus longue:

Nombre d'atome C	1	2	3	4	5	6
Radical	méth	éth	prop	but	pent	hex

- **Le suffixe** est fixé par la famille à laquelle le composé appartient :

Famille	alcane	alcool	aldéhyde	cétone	Acide carboxylique	Amine
Suffixe	...ane	...an-x-ol	...anal	...an-x-one	acide ...anoïque	...an-x-amine

x est l'indice de position du groupe fonctionnel. Il doit être le plus petit possible.



Remarque : l'indice de position du carbone appartenant au groupe carbonyle d'un aldéhyde ou au groupe carboxyle est toujours 1, il n'est donc jamais indiqué.

- **Le préfixe** est le nom du groupe alkyle correspondant aux éventuelles ramifications. Il peut y avoir plusieurs préfixes. Chaque préfixe est précédé de l'indice de position de l'atome de carbone de la chaîne principale auquel la ramification est reliée.

Groupe alkyle	CH ₃ –	CH ₃ – CH ₂ – ou C ₂ H ₅ –	CH ₃ – CH ₂ – CH ₂ – ou C ₃ H ₇ –
Préfixe	Groupe méthyl	Groupe éthyl	Groupe propyl

Remarques :

Si la molécule présente plusieurs groupes alkyles de même nature, le nom de la ramification est précédé d'un préfixe multiplicateur (di, tri, tétra..)

Lors de la numérotation de la chaîne carbonée, le carbone qui porte le groupe caractéristique porte le numéro le plus petit.

A noter :

Dans le nom d'une molécule organique, deux chiffres sont obligatoirement séparés par une virgule alors qu'un chiffre et une lettre le sont par un tiret. Le nom complet forme un mot unique (donc pas d'espace).

Exemples :

Formule semi-développée	Groupe caractéristique	Famille	Nomenclature
$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C}-\text{HC}-\text{CH}_2-\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	aucun	alcane	2-méthylbutane
$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C}-\text{CH}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{OH} \end{array}$	hydroxyle	alcool	propan-2-ol
$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C}-\text{HC}-\text{CH}_2-\text{CH} \\ \qquad \qquad \qquad \parallel \\ \text{CH}_3 \qquad \qquad \qquad \text{O} \end{array}$	carbonyle	aldéhyde	3-méthylbutanal
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \qquad \qquad \qquad \text{O} \\ \qquad \qquad \qquad \parallel \\ \text{H}_3\text{C}-\text{C}-\text{CH}_2-\text{C}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	carbonyle	cétone	4,4-diméthylpentan-2-one
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \qquad \qquad \qquad \text{O} \\ \qquad \qquad \qquad \parallel \\ \text{H}_3\text{C}-\text{HC}-\text{CH}-\text{C}-\text{OH} \\ \qquad \qquad \qquad \\ \text{H}_2\text{C}-\text{CH}_3 \end{array}$	carboxyle	acide carboxylique	acide 2-éthyl-3-méthylbutanoïque
$\begin{array}{c} \text{NH}_2 \\ \\ \text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3 \end{array}$	amino	amine	hexan-3-amine



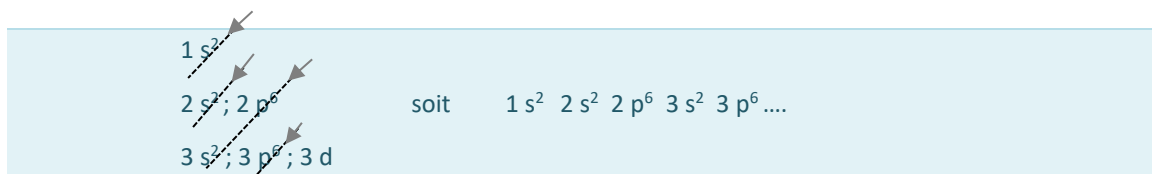
Fiche de synthèse n° 1.b

Structure des molécules et des ions

1. La molécule

1.1. Configuration électronique et électron(s) de valence

Un atome possède autant d'électron(s) que de proton(s). Ceux-ci se répartissent dans les différentes couches et sous couches électroniques, en les remplissant dans l'ordre indiqué par les lignes pointillées : ($Z \leq 18$)



Exemple : N ($Z = 7$) a pour configuration électronique $1 s^2 2 s^2 2 p^3$

Les **électrons de valence** correspondent à la totalité des électrons de la **couche électronique externe** (la dernière à avoir été remplie), notée en caractères gras sur l'exemple.

1.2. Formule de Lewis d'une molécule ou d'un ion

La **formule de Lewis** permet de visualiser la répartition des électrons de valence de chacun des atomes d'un édifice chimique (molécule ou ion).

La **liaison covalente** résulte de la mise en commun d'un électron de valence par chacun des deux atomes engagés pour former cette liaison. Les liaisons covalentes sont représentées par un trait dessiné entre les deux atomes.

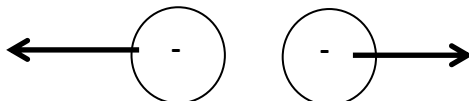
Les **doublets non liants** (qui ne servent pas à faire de liaisons covalentes) sont représentés par des traits disposés autour de l'atome concerné.

Exemples : NH_3 $\text{H}-\text{O}-\text{H}$ $\text{H}-\text{F}$

2. La géométrie des molécules.

2.1. Théorie VSEPR

Principe : Deux charges de même signe se repoussent.



Dans une molécule les doublets électroniques liants et non liants se repoussent puisqu'ils sont tous chargés négativement.

La **géométrie** adoptée par une molécule est celle dans laquelle les doublets d'électrons (liants et non-liants) sont les plus éloignés les uns des autres.



Soit **A** : un atome central donné.

n : le nombre d'atomes X liés à A

m : le nombre de doublets non liants E portés par A

Exemples : CH_4 molécule de type AX_4 de même que $\text{Cl}-\text{P}(\text{Cl})_2=\text{O}$ une liaison multiple ne comptant qu'une seule fois.

NH_3 molécule de type AX_3E ; H_2O molécule de type AX_2E_2

Le tableau ci-dessous récapitule la **géométrie** des molécules de type AX_nE_m pour $n + m \leq 4$

Type	AX_2	AX_3	AX_2E	AX_4	AX_3E	AX_2E_2
n+m	2	3	3	4	4	4
Géométrie	Linéaire	Triangulaire plane	Triangulaire plane	Tétraédrique	Pyramide à base triangle	Plane coudée
Exemples	BeCl_2 ; CO_2	SO_3 ; CO_3^{2-}	SO_2 ; O_3	CH_4 ; POCl_3	NH_3 ; H_3O^+	H_2O ; H_2S

2.2. Mésonérie

Certains édifices possèdent une structure favorable à la **délocalisation des doublets d'électrons de valence et non liants**. Dans ce cas, plusieurs formulations de Lewis sont plausibles, les électrons passant continuellement d'une forme à l'autre. Ces différentes représentations sont appelées : **formes mésomères**.

Exemple : Les flèches courbes traduisent le déplacement des doublets électroniques.

