

		Charge	Masse
Noyau	Proton	$+e = 1.60 \times 10^{-19}C$	$1.67 \times 10^{-27}kg$
	Neutron	0	$1.67 \times 10^{-27}kg$
Périphérie	Électron	$-e$	$9.11 \times 10^{-31}kg$

A_ZX	A : nbre de nucléons (protons + neutrons). Z : n° atomique (nbre de protons).
-----------	--

Si le nombre d'électrons est différence du nombre de protons alors l'atome est chargé :

Positive = cation	Négative = anion
${}^A_ZX^{2+}$	${}^A_ZX^{2-}$

Un atome est caractérisé par :

Son élément	Son n° atomique (nombre de protons)
-------------	-------------------------------------

Isotope deux atomes qui possèdent le même nombre de protons mais un nombre de neutrons différent.

Chaque atome possède une signature photonique (lumineuse) unique.

Structure des molécules

Les liaisons entre les atomes pour former des molécules se matérialise par le partage d'électrons. Pour comprendre comment les molécules sont fabriquer il faut étudier la configuration des électrons des atomes.

Configuration électronique des atomes

La position d'un électron autour d'un atome est défini par :

n nombre quantique. $l < n$ nbre quantique secondaire	$m \leq l $ nbre quantique magnétique. ms ou s spin = ± 0.5
---	---

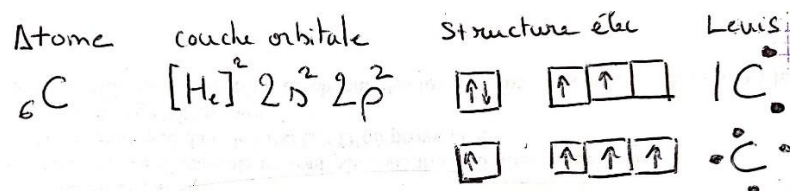
l	0	1	2		n	l	$n+l$	couches orbitales
m	0	-1 0 1	-2 -1 0 +1 +2		1	0	1	1s
$n=1$	<input type="checkbox"/>				2	0	2	2s
$n=2$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	2 électrons par case avec spin inverse	3	1	3	2p
$n=3$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		4	0	4	3s
couches \rightarrow		<u>P</u>	<u>D</u>		5	1	5	3p
					6	2	6	4s
					7	3	7	4p
					8	4	8	4d
					9	5	9	5s
					10	6	10	5p
					11	7	11	5d
					12	8	12	6s
					13	9	13	6p
					14	10	14	6d
					15	11	15	7s
					16	12	16	7p
					17	13	17	7d
					18	14	18	8s
					19	15	19	8p
					20	16	20	8d
					21	17	21	9s
					22	18	22	9p
					23	19	23	9d
					24	20	24	10s
					25	21	25	10p
					26	22	26	10d
					27	23	27	11s
					28	24	28	11p
					29	25	29	11d
					30	26	30	12s
					31	27	31	12p
					32	28	32	12d
					33	29	33	13s
					34	30	34	13p
					35	31	35	13d
					36	32	36	14s
					37	33	37	14p
					38	34	38	14d
					39	35	39	15s
					40	36	40	15p
					41	37	41	15d
					42	38	42	16s
					43	39	43	16p
					44	40	44	16d
					45	41	45	17s
					46	42	46	17p
					47	43	47	17d
					48	44	48	18s
					49	45	49	18p
					50	46	50	18d
					51	47	51	19s
					52	48	52	19p
					53	49	53	19d
					54	50	54	20s
					55	51	55	20p
					56	52	56	20d
					57	53	57	21s
					58	54	58	21p
					59	55	59	21d
					60	56	60	22s
					61	57	61	22p
					62	58	62	22d
					63	59	63	23s
					64	60	64	23p
					65	61	65	23d
					66	62	66	24s
					67	63	67	24p
					68	64	68	24d
					69	65	69	25s
					70	66	70	25p
					71	67	71	25d
					72	68	72	26s
					73	69	73	26p
					74	70	74	26d
					75	71	75	27s
					76	72	76	27p
					77	73	77	27d
					78	74	78	28s
					79	75	79	28p
					80	76	80	28d
					81	77	81	29s
					82	78	82	29p
					83	79	83	29d
					84	80	84	30s
					85	81	85	30p
					86	82	86	30d
					87	83	87	31s
					88	84	88	31p
					89	85	89	31d
					90	86	90	32s
					91	87	91	32p
					92	88	92	32d
					93	89	93	33s
					94	90	94	33p
					95	91	95	33d
					96	92	96	34s
					97	93	97	34p
					98	94	98	34d
					99	95	99	35s
					100	96	100	35p
					101	97	101	35d
					102	98	102	36s
					103	99	103	36p
					104	100	104	36d
					105	101	105	37s
					106	102	106	37p
					107	103	107	37d
					108	104	108	38s
					109	105	109	38p
					110	106	110	38d
					111	107	111	39s
					112	108	112	39p
					113	109	113	39d
					114	110	114	40s
					115	111	115	40p
					116	112	116	40d
					117	113	117	41s
					118	114	118	41p
					119	115	119	41d
					120	116	120	42s
					121	117	121	42p
					122	118	122	42d
					123	119	123	43s
					124	120	124	43p
					125	121	125	43d
					126	122	126	44s
					127	123	127	44p
					128	124	128	44d
					129	125	129	45s
					130	126	130	45p
					131	127	131	45d
					132	128	132	46s
					133	129	133	46p
					134	130	134	46d
					135	131	135	47s
					136	132	136	47p
					137	133	137	47d
					138	134	138	48s
					139	135	139	48p
					140	136	140	48d
					141	137	141	49s
					142	138	142	49p
					143	139	143	49d
					144	140	144	50s
					145	141	145	50p
					146	142	146	50d
					147	143	147	51s
					148	144	148	51p
					149	145	149	51d
					150	146	150	52s
					151	147	151	52p
					152	148	152	52d
					153	149	153	53s
					154	150	154	53p
					155	151	155	53d
					156	152	156	54s
					157	153	157	54p
					158	154	158	54d
					159	155	159	55s
					160	156	160	55p
					161	157	161	55d
					162	158	162	56s
					163	159	163	56p
					164	160	164	56d
					165	161	165	57s
					166	162	166	57p
					167	163	167	57d
					168	164	168	58s
					169	165	169	58p
					170	166	170	58d
					171	167	171	59s
					172	168	172	59p
					173	169	173	59d
					174	170	174	60s
					175	171	175	60p
					176	172	176	60d
					177	173	177	61s
					178	174	178	61p
					179	175	179	61d
					180	176	180	62s
					181	177	181	62p
					182	178	182	62d
					183	179	183	63s
					184	180	184	63p

Stabilité atomique

Un atome a tendance à prendre la configuration électronique qui lui donne un niveau de stabilité maximal. La stabilité est atteinte dans les conditions suivantes par ordre de stabilité décroissant) :

1. La couche en cours de remplissage totalement pleine ou totalement vide.
2. La couche en cours de remplissage semi complète avec un électron dans chaque case et leur spin dans le même sens.

Remarque : la configuration la plus stable correspond à la configuration électronique du gaz rare le plus proche.



Pour atteindre cet état, l'atome peut gagner ou en perdant des électrons c'est-à-dire former des ions.

Lorsque l'on répartit les électrons sur les couches, il faut inverser 4s et 3d.

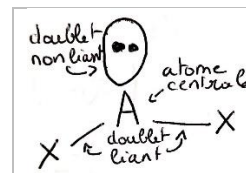
Les électrons qui n'appartiennent pas à des doublets (case)

Valence nbre d'électrons libres n'appartenant pas à des doublets.

Hypervalence même nombre quantique principal pour partager ses électrons (par exemple : C, P, Na.)

VSEPR, la direction des orbitales

La VSEPR est une méthode qui permet de déterminer la structure 3D d'un atome.



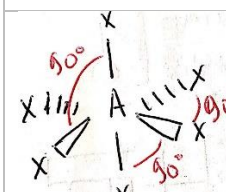
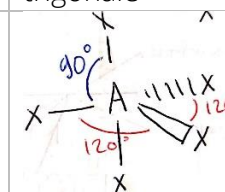
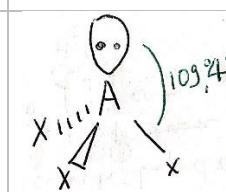
$$AX_pE_q$$

Où

p : nbre d'atomes périphériques.

q : nbre de doublets libres.

Nbre de direction $p + n$ =	1	2	3
Organisation 3D	Linéaire	Coudé	Triangulaire plane
VSEPR et géométrie		AX_2	AX_3

4	5	6	
Tétraédrique	Bipyramide trigonale	Octaèdre	
			

Hybridation des orbitales atomiques

Les électrons de valence permettent aux atomes de se lier entre eux.

Leurs orbital vont se combiner pour en former une nouvelle. On peut déduire qualitativement la forme que prendra la liaison dans l'espace en calculant une combinaison de fonctions d'onde d'orbitales atomiques.

Changement d'hybridation

Il existe un cas particulier où un atome change de structure VSEPR pour augmenter la stabilité de la molécule. Cela concerne les atomes

- sp^3
- Qui possède un doublet non liant

Et qui sont dans la situation suivante ($n \sigma \pi$) c'est-à-dire liés à un atome par une liaison simple et l'atome est lui-même lié par une liaison double.

L'atome passe alors de $sp^3 \rightarrow sp^2$ et le doublet non liant se transforme en liaison de type π sur la liaison simple.

Délocalisation électronique

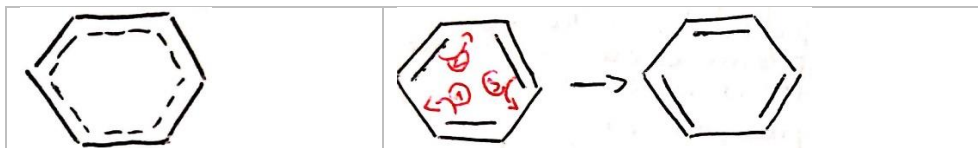
Dans certains cas, les électrons des liaisons π peuvent se délocaliser sur un groupe d'atomes c'est-à-dire que les électrons se mettent à passer d'un atome à un autre. C'est le cas lorsqu'il y a un enchainement de liaisons sont $\pi \sigma \pi$.

Remarque : les changements d'hybridation sont toujours concernés par cette situation.

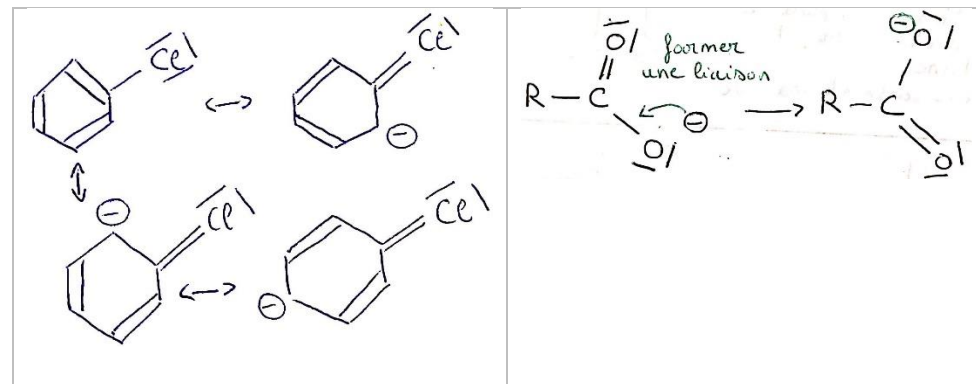
Mésomérie

La mésomérie est la superposition des états électroniques de la molécule. On la représente par des tirés.

Par exemple,



Quelques exemples plus complexes de mésomères :



Il existe une catégorie mésomère appelés aromatiques. Ceux sont des molécules qui possèdent une partie qui respecte les propriétés suivantes :

- Molécule cyclique (i.e. toutes les molécules dans le plan (sp^2))
- (Règle de Huckel) Il existe un N tel que le nombre d'électrons conjugués = $4N+2$ (par exemple : $6 = 4 \times 1 + 2$)

Les moments dipolaires (force)

À cause des différences d'électronégativité entre les atomes, les électrons ne se répartissent pas équitablement dans les liaisons. Les atomes très électronégatifs auront tendance attirer et à garder les électrons proches. C'est différence provoque des pôles de charge entre les atomes. On considère que cette différence n'est pas négligeable lorsque la différence d'électronégativité entre deux atomes est supérieure à 0,5.

Cette différence de charge se propage aux atomes voisins (jusqu'à 4). Cette propagation s'appelle l'effet inductif. On dit que l'effet inductif est attracteur (par opposition à l'effet donneur) lorsque le groupement est plus électronégatif que le carbone.

On note la charge δ^+ ou δ^- .

La somme des moments est équivalent à une force que l'on représente par une flèche orientée vers de la partie chargée négativement vers celle chargée positivement.

Remarque : Les dipôles sont à l'origine des liaisons d'hydrogènes.

Acide et base

Un acide est une molécule qui est capable de :

De Lewis	De Brönsted
Tendance à céder un proton.	Capter un capter des électrons.

Remarque : c'est deux définitions sont équivalentes.

Liaison forte liaison faible

Les interactions intermoléculaires

Des forces contradictoires agissent simultanément entre les molécules :

de Pauli (orbitale)	Électrostatique (charge)
---------------------	--------------------------

De Pauli, lorsque deux molécules se rapprochent, il apparaît une force répulsive liée au recouvrement de ces orbitales "pleines".

Électrostatique : Il y a attraction entre le nuage électronique d'une molécule et le noyau de l'autre molécule. Mais les noyaux des deux molécules se repoussent, tout comme les nuages électroniques.

Cela se traduit par une attraction à moyenne distance et une répulsion à courte distance.

Nomenclature et stéréochimie

On cherche la chaîne carbonée qui porte :

1. Fonction prioritaire

Puis la chaîne carbonée qui maximise :

1. Le plus grand nombre d'insaturations
2. La plus longue en nombre de carbones
3. Le nombre de substituants

La numérotation des substituants de la chaîne principale se fait en minimisant la suite des numéros des positions.

Remarque : Il faut compter le carbone de la fonction dans la chaîne principale.

Nomenclature des hydrocarbures

Type de chaîne carbonée

Liaison de type	Substituant Ramification (préfixe)	Chaîne principale (suffixe)
Simple	-yl	-ane
Double	-ényle	-ène
Triple	-ynyle	-yne

Remarque : on parle d'hydrocarbure insaturé lorsqu'il y a carbone avec une double ou triple liaison.

Pour les cycles, on écrit : cyclo-

Préfixes multiplicatifs

Lorsqu'il y a plusieurs groupements du même type on utilise un préfixe multiplicatif.

2 (di-)	3 (tri-)	4 (tétra-)
---------	----------	------------

Exemple : 2,3 diméthyl = en position 2 et 3 il y a un groupement méthyl.

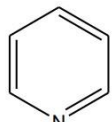
Nombre d'atomes de carbone

1 Méth-	2 Éth-	3 Pro-	4 But-	5 Pent-
6 Hex-	7 Hept-	8 Oct-	9 Non-	10 Dec-

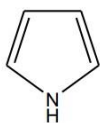
Cycles insaturés à connaître



benzene



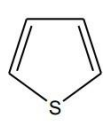
pyridine



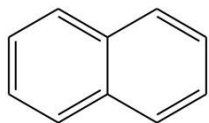
pyrrole



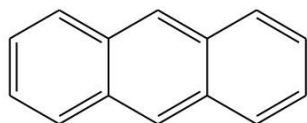
furane



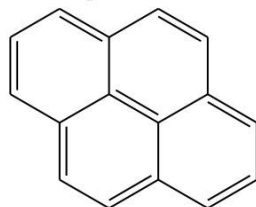
thiophene



naphthalene



anthracene



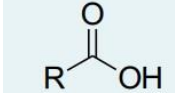
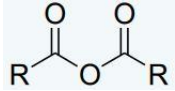
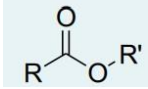
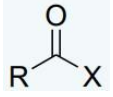
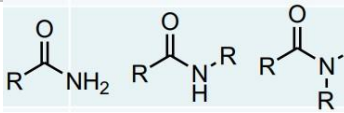
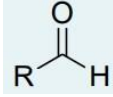
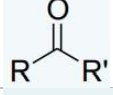
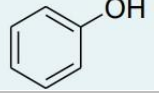
pyrene

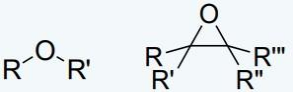
Substituants insaturés à connaître (5)

Radical			
Noms (symbole)	Vinyl	Allyl	Phényl (ph)

Radical			
Noms	Tolyl (tol)	Benzyl (bn)	

Fonction à connaître de la plus prioritaire à la moins

Fonction	Formule	Préfixe	Suffixe
Acide carboxylique		Carboxy	Acide...oïque * (Acide ...carboxylique)
Anhydrides d'acides			Anhydride R-oïque R'-oïque
Esters		Alkoxycarbonyl	R-oate de R'-yle* (R-carboxylate de R'-yle)
Halogénures d'acyle		Halogénocarboxyl	« Halogén »ur e de ...oyle* (Halogénure de carbonyle)
Amides		Carbamoyl	...amide* (carboxamide)
Nitriles	$R-C\equiv N$	cyano	...nitrile* (carbonitrile)
Aldéhydes		Formyl	...al* (carbaldéhyde)
Cétones		Oxo	...one*
Alcools/phénols	$R-OH$ 	Hydroxyl	...ol
Thiols	$R-SH$	Sulfanyl	...thiol
Amines	$R-NH_2$ $R-NH-R'$ $R-NR_2$	amino	...amine (Chaines 2aires en

			préfixe N-alkyl)
Éther/Époxydes		Oxy/Alkoxy	R1-oxy-R2 Plus petit groupe = alkoxy)
* l'atome de carbone est inclus dans le nom de l'hydrocarbure parent.			

R > R' sauf s'il y a un ordre dans la fonction.

La position des groupes portés par les atomes d'azotes est indiqués par un N- (exemple 1 : N-méthyl ; exemple 2 : N,N diméthyl)

Fonction chimique atomes ou groupements d'atomes qui contiennent des hétéroatomes X (F, Cl, Br, I), N, O, P, S. Ils sont indiqués « nom+o »

Isomérisation

Isomère deux molécules qui ont la même formule brute

Il existe deux types d'isomère

Constitution	Stéréoisomère
Enchaînement des atomes différents	Représentation spatiale différente

Isomère de constitution

Il existe trois types d'isomérisation de constitution :

Fonction	Squelette	Position des groupements fonctionnels
----------	-----------	---------------------------------------

Tautomérie (isomérisation de fonction) passage d'un hydrogène et apparition d'une liaison C=C.

Stéréoisomère

Deux types de stéréoisomères :

Conformation	Configuration
--------------	---------------

Il s'agit de la même molécule mais représentée différemment à cause des rotations possibles autour des liaisons simples.

Molécule différente notamment le cas lorsque les doubles liaisons bloquent les rotations.

Conformation

Comme il y a plusieurs conformations possibles pour une même molécule. Il est important de pouvoir déterminer celles qui sont les plus stables c'est-à-dire qui minimisent la répulsion électronique entre les atomes.

Pour les molécules avec des cycles, il existe deux positions :

Équatoriale

Horizontale

Les groupements les plus énergétiques se situent en position horizontale

Configuration

Les stéréoisomères de configuration n'ont pas la même configuration spatiale. Elles sont en fait deux molécules différentes. Pour pouvoir les distinguer lors du nommage, on utilise des stéréodescripteurs.

Il faut pouvoir les caractériser, on a besoin de préciser :

Les liaisons doubles

Les carbones asymétriques

Les règles de Cahn Ingold Prelog (CIP) de priorité des groupes atomiques :

- L'atome de numéro atomique le plus grand à la priorité.
- Les liaisons multiples sont considérées comme une redondance de l'atome.

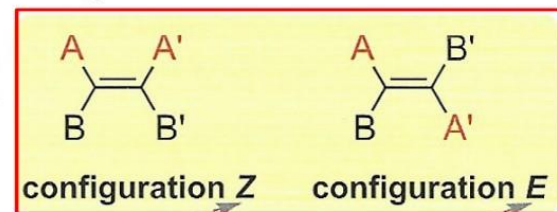
Les doubles liaisons

Stéréodescripteur : Z/E

Double liaison avec les priorités sur les groupes A et A'

si $A > B$ et $A' > B'$ selon les règles CIP

– Configurations autour d'une double liaison :

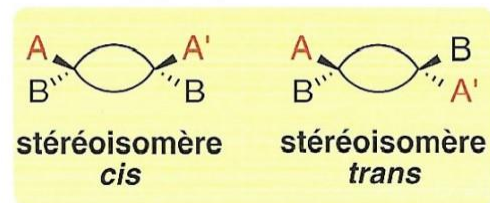


Zusammen =
ensemble en allemand

Entgegen =
opposé en allemand

Pour les cycles, on parle de liaisons cis/trans

– Composés cycliques : si $A > B$ et $A' > B'$



Carbone C*

Stéréoisomérisation R/S

Il a deux positions spatiales différentes non superposables :

R (restus)

S (sinister)

Méthode pour déterminer le type de position spatiale :

1. Classer les substituants selon CIP
2. Projection de Newman en représentant le groupe de plus faible priorité derrière.
3. Si $a \rightarrow b \rightarrow c$ alors ils sont Rectus sinon Sinister

Chirale

Lorsque deux molécules sont symétriques par rapport à un plan et qu'elles ne peuvent pas se superposer.

Une molécule peut être chirale si elle :

Possède	Ne possède pas
Un carbone asymétrique Plusieurs C* sans plan de symétrie	De plan de symétrie

Énantiomère	Diastéréoisomère
Une configuration des C* opposée	Des différences dans la configuration Z/E ou cis/trans

Énantiomère

Deux énantiomères ont toujours :

- Une configuration absolue des C* (R devient S et vice versa).
- Propriétés physico-chimiques identiques (températures de fusion, d'ébullition, densité, polarité, solubilité, ...).
- Pouvoirs rotatoires spécifiques de signe opposés.
- Propriétés biologiques différentes (odeur, goût, activité thérapeutique, toxicité, ...).

Homochiralité une seule forme est présente chez les êtres vivants.

Diastéréoisomère

Épimères deux molécules qui ne diffèrent que par un C*.

Représentation des molécules

	Type de formule	
	Brute	
	Développé plane	Représentation de tous les atomes

	Lewis	Développé + doublet non liant
		Squelette carboné + formule semi développé
	Topologique	Squelette carboné sous la forme de ligne
	Cram	
	Newman	
	Fischer	

Remarque : La représentation de Fischer particulièrement utilisée en biochimie pour les sucres et les acides alpha aminée.

Une molécule possède au maximum 2^n stéréoisomères.