

Extrait du programme

Partie : Constitution et transformations de la matière.

 $\textbf{Sous-Partie}: \textbf{Propriét\'es physico-chimiques}, \textbf{synth\`eses et combustions d'esp\'eces chimiques organiques}.$

Chapitre : Structure des entités organiques.

Notions et contenus	Capacités exigibles
Formules brutes et semi- développées. Squelettes carbonés saturés, groupes caractéristiques et familles fonctionnelles.	Identifier, à partir d'une formule semi-développée, les groupes caractéristiques associés aux familles de composés : alcool, aldéhyde, cétone et acide carboxylique.
Lien entre le nom et la formule semi- développée.	Justifier le nom associé à la formule semi-développée de molécules simples possédant un seul groupe caractéristique et inversement. Exploiter, à partir de valeurs de référence, un spectre d'absorption in-
Identification des groupes caractéristiques par spectroscopie infrarouge.	frarouge. Utiliser des modèles moléculaires ou des logiciels pour visualiser la géo- métrie de molécules organiques.

Outils numériques



2. Géométrie des molécules : https://mirage.ticedu.fr/?p=2324

3. Spectroscopie infrarouge (appli spectre IR2) : $\verb|https://mirage.ticedu.fr/?p=2670|$

	Android	Apple
Géométrie des molécules		
Spectroscopie infrarouge		

4. Visualiser des molécules en ligne avec Scribmol: http://www.librairiedemolecules.education.fr/outils/scribmol/scrib.html



1 Familles de composés organiques

1.1 Formule brute et semi-développée

La <u>formule brute</u> d'une molécule donne simplement la composition atomique d'une molécule : le type et le nombre des atomes qui composent la molécule.

 $Exemple : C_3H_6O_2$

La <u>formule développée</u> permet d'identifier précisément toutes les liaisons covalentes au sein de la molécule. Cela permet entre autre de connaître l'enchaînement des atomes. *Exemple*:

$$\begin{array}{c|c} H & H \\ \hline \\ H & C & C \\ \hline \\ H & H \\ \end{array} \begin{array}{c} O \\ O \\ \end{array} \begin{array}{c} O \\ \end{array}$$

La <u>formule semi-développée</u> est une écriture un peu allégée de la formule développée dans laquelle on n'écrit pas les liaisons qui impliquent les atomes d'hydrogène. On sait que ces derniers forment toujours une seule liaison covalente et donc on peut toujours reconstituer leur liaison même si elle n'est pas explicitement dessinée.

Exemple:

$$CH_3$$
 — CH_2 — C

La formule de Lewis ajoute les doublets non liants à la formule développée. Cela permet entre autre de faciliter la prévision de la géométrie spatiale de la molécule.

1.2 Groupes caractéristiques et familles fonctionnelles

Certaines propriétés physico-chimiques des molécules dépendent de la présence en leur sein de certains groupes d'atomes particuliers. Ces groupes d'atomes sont appelés **groupes caractéristiques**, et des molécules qui possèdent les mêmes groupes caractéristiques appartiennent à la même **famille fonctionnelle**.

Groupes caractéristiques et familles fonctionnelles à connaître :

Nom du groupe	hydroxyle	carbonyle		carboxyle
Structure	— ОН	O		ОН
Nom de la famille	Alcool	Aldéhyde : C est lié	Cétone : C est lié	Acide carboxy-
		à au moins 1 H	à 2 autres C	lique



1.3 Nomenclature

Le nom d'une molécule permet d'identifier sa structure : chaîne carbonée + ramification + groupe caractéristique.

La nomenclature des molécules reposent ainsi sur 3 parties : préfixe + radical + suffixe.

- Le **préfixe** indique les **ramifications** avec leur position sur la chaîne principale.

 Remarque: La numérotation de la chaîne principale vise toujours à donner le plus petit indice possible au groupe caractéristique principal.
- Le radical décrit la chaîne carbonée principale (la plus longue possible).
- le **suffixe** précise la **famille fonctionnelle**.

Le radical reprend le nom de l'alcane (molécule composée uniquement d'atomes C et H reliés par des liaisons simples) qui dépend de la longueur de la chaîne (nombres d'atomes C) :

nombre C	1	2	3	4
nom	méthan-	éthan-	propan-	butan-

La suite se poursuit en grec : pentan, hexan, heptan, octan...

Voici les suffixes des groupes familles à connaître :

famille	alcool	aldéhyde	cétone	acide carboxylique
nom	-ol	-al		acide · · · -oïque

1.4 Quelques exemples

 $\underline{\text{M\'ethanol}}: 1 \text{ C} + \text{groupe hydroxyle}:$

$$CH_3$$
 — OH

<u>Éthanal</u>: 2 C + groupe carbonyle avec le C fonctionnel lié à 1 H:

Propanone : 3 C + groupe carbonyle avec le C fonctionnel lié à 2 C :

$$\begin{array}{c} O \\ \parallel \\ CH_3 \longrightarrow C \longrightarrow CH_3 \end{array}$$

Acide butanoïque : 4 C + gr. carboxyle :

$$CH_3$$
 — CH_2 — CH_2 — CH_2 — CH_2 — CH_2 — CH_2

 $\underline{\text{Pentan-1-ol}}: 5 \text{ C} + \text{gr. hydroxyle sur le 1er C}:$

$$\operatorname{CH}_3$$
 — CH_2 — CH_2 — CH_2 — OH

 $\underline{\text{Pentan-2-ol}}: 5 \text{ C} + \text{gr. hydroxyle sur le 2ème C}:$

$$\begin{array}{c} OH \\ | \\ CH_3 \longrightarrow CH_2 \longrightarrow CH_2 \longrightarrow CH \longrightarrow CH_3 \end{array}$$



 $\underline{\text{Pentan-3-ol}}: 5 \text{ C} + \text{gr. hydroxyle sur le 3ème C}:$

$$\begin{array}{c} \text{OH} \\ \\ | \\ \text{CH}_3 \longrightarrow \text{CH}_2 \longrightarrow \text{CH} \longrightarrow \text{CH}_2 \longrightarrow \text{CH}_3 \end{array}$$

Acide 2-méthylbutanoïque : ramification d'un radical méthyle en C2 (2ème C) :

$$CH_3$$
 — CH_2 — CH — CH_3 — CH

Acide 3-méthylbutanoïque : ramification d'un radical méthyle en C3 (3ème C) :

$$\operatorname{CH}_3$$
 $-\operatorname{CH}_2$ $-\operatorname{CH}_2$ $-\operatorname{CH}_2$ $-\operatorname{CH}_3$

4-éthyl-5,6-diméthyloctan-2-one : ramification 2 radicaux méthyle en C5/C6 + éthyle en C4 :

4-propyl-6,6-diméthyloctanal : ramification 2 radicaux méthyle en C6 + propyle en C4 :

$$\begin{array}{c|c} CH_3 & CH_2 - CH_2 - CH_3 \\ & & \\ CH_3 - CH_2 - C$$

2 Analyse par spectroscopie infrarouge

2.1 Principe de la spectroscopie infrarouge

De la même manière que la spectroscopie UV-visible étudie l'absorption des molécules dans le domaine UV-visible, la spectroscopie infrarouge est une technique d'analyse qui consiste à mesurer absorbance d'une molécule dans le domaine infrarouge.

Par habitude, un spectre infrarouge présente en réalité la **transmittance** (exprimée en %) en ordonnées en fonction du **nombre d'onde** (exprimé en cm⁻¹) en abscisse. La transmittance est une grandeur complémentaire de l'absorbance : si une molécule n'absorbe pas, elle transmet! Le nombre d'onde, noté σ , est l'inverse de la longueur d'onde : $\sigma = \frac{1}{\lambda}$.

Lorsque la molécule absorbe une onde dans une plage de nombres d'onde, on observe donc une bande d'absorption vers le bas (faible transmittance).



2.2 Analyse spectrale

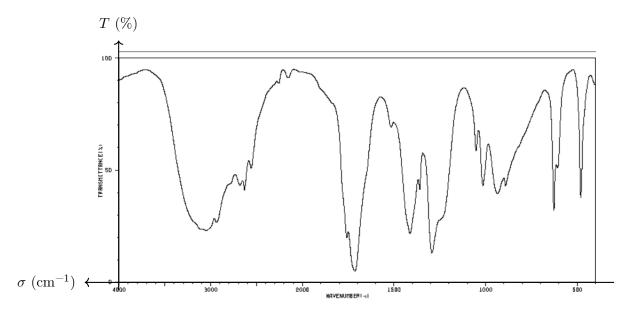
L'absorption des ondes dans le domaine infrarouge résulte de modes de vibration des liaisons covalentes qui peuvent être excitées par l'énergie apportée par l'onde. Chaque type de liaison (ex : C-H, C=O, O-H...) absorbe dans une plage spécifique de nombres d'onde.

On observe alors sur un spectre infrarouge des bandes d'absorption qui sont chacune spécifique d'un type de liaison. On peut donc analyser (partiellement) la nature des liaisons présentes dans une molécule à partir de son spectre infrarouge.

Cette technique peut être utilisée à des fins d'analyse pure, ou de dosage, ou de suivi de l'évolution de la transformation chimique au cours d'une synthèse.

2.3 Exemple

On donne ci-dessous le spectre infrarouge de l'acide éthanoïque (issu de la banque SDBS) :



On peut observer une bande d'absorption vers $1700~\rm cm^{-1}$ caractéristique de la liaison C=O, et une bande large entre $2600~\rm et~3200~\rm cm^{-1}$ caractéristique de la liaison O-H d'un groupe carboxyle.