a. Alcane et chaîne carbonée

Un alcane est une molécule formée uniquement d'atomes de carbone et d'hydrogène entre lesquels il n'existe que des liaisons simples.

Dans un alcane, chaque atome de carbone est tétravalent(doc. 1).
 Il forme 4 liaisons simples avec 4 atomes voisins différents. Chaque atome d'hydrogène forme une liaison avec l'atome de carbone voisin.

Le squelette carboné (appelé aussi chaîne carbonée) d'un alcane est le réseau des atomes de carbone de la molécule, entre lesquels toutes les liaisons covalentes sont simples. Les atomes d'hydrogène se placent sur ce squelette de telle sorte que chaque atome de carbone possède exactement 4 voisins (doc. 2).

 Les alcanes sont des hydrocarbures, formés seulement d'atomes de carbone et d'hydrogène, principaux constituants du pétrole(doc. 3).

b. Alcanes à chaîne linéaire

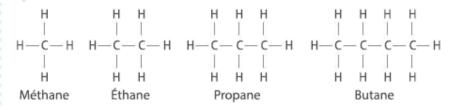
Un alcane à chaîne linéaire possède un squelette formé d'un nombre entier n d'atomes de carbone liés chacun à deux atomes de carbone, à l'exception des deux atomes de carbone de bout de chaîne.

- Plusieurs représentations de ce type de molécules sont possibles :
- formule développée avec les atomes d'hydrogène;
- formule *semi-développée* où on écrit, à côté de chaque atome de carbone, le nombre d'atomes d'hydrogène qui lui sont reliés.

La formule brute d'un alcane à chaîne linéaire est C_nH_{2n+2} . Le nom d'un alcane à chaîne linéaire est formé d'une racine qui désigne le nombre n d'atomes de carbone de la chaîne (doc. 4) et du suffixe -ane.

Exemples

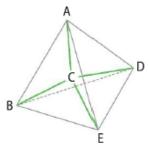
 Formules développées et noms des alcanes à 1, 2, 3 et 4 atomes de carbone :



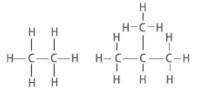
• Formule semi-développée de l'heptane, alcane à 7 atomes de carbone :

$$H_3C$$
— CH_2 — CH_2 — CH_2 — CH_2 — CH_3

• Une grande diversité de molécules est décrite par une chaîne carbonée principale linéaire, comme celle d'un alcane à chaîne linéaire, autour de laquelle certains atomes d'hydrogène sont remplacés par des groupes ne comportant que des atomes de carbone et d'hydrogène (1 c Alcanes à chaîne ramifiée) ou des groupes caractéristiques comportant au moins un atome d'oxygène (2 Dérivés d'alcanes).



Doc. 1 Carbone tétravalent C, lié aux atomes A, B, D et E, qui forment un tétraèdre.



Doc. 2 Exemples d'alcanes à 2 et 4 atomes de carbone.



Doc. 3 La séparation des hydrocarbures est réalisée dans ce type de tour (à gauche): après chauffage à 400 °C, on soutire les composés les plus légers en haut et les plus lourds en bas de la tour.

n = 1: méth-	n = 2 : éth-
n = 3 : prop-	n = 4 : but-
n = 5: pent-	n = 6: hex-
n = 7: hept-	n = 8 : oct-
n = 9: non-	n = 10 : déc-

Doc. 4 Racines indiquant le nombre d'atomes de carbone contenus dans une molécule.

c. Alcanes à chaîne ramifiée

Un alcane à chaîne ramifiée possède au moins un atome de carbone lié à trois ou quatre autres atomes de carbone.

Sa formule brute est, comme pour ceux à chaîne linéaire, C_nH_{2n+2} .

- Pour identifier un alcane à chaîne linéaire ramifiée sans ambiguïté, on cherche la chaîne carbonée la plus longue. Les atomes de cette chaîne sont numérotés (en bleu dans lesdoc. 6 et 7). Les ramifications sont appelées des groupes alkyles.
- Le nom d'un groupe alkyle est formé d'une racine qui désigne le nombre d'atomes de carbone et du suffixe -vle(doc. 5).
- Le nom d'un alcane à chaîne ramifiée est celui de l'alcane correspondant à la chaîne carbonée la plus longue, précédé de la liste des couples (numéro du carbone – nom du groupe alkyle, sans le e final), séparés par des tirets(doc. 6). Si un même groupe apparaît plusieurs fois, on lui adjoint un préfixe (di, tri, tétra, etc.) et on donne la liste des numéros des atomes de carbone qui le portent séparés par des virgules (doc. 7).

Exerci		

d. Alcanes à chaîne cyclique

Un alcane à chaîne cyclique non ramifiée est un alcane dont les atomes de carbone forment un cycle. Sa formule brute est C_nH_{2n} . Son nom est formé du préfixe cyclo- suivi du nom de l'alcane à n atomes de carbone.

Doc. 5 Groupes alkyles.

Doc. 6 Formule semi-développée du 3-éthyl-5-méthylheptane.

$$\begin{array}{c} \mathsf{CH_3} \\ | \\ \mathsf{H_3C} - \mathsf{C} - \mathsf{CH} - \mathsf{CH_3} \\ 2 | & 3 | & 4 \\ \mathsf{CH_3} & \mathsf{CH_3} \end{array}$$

Doc. 7 Formule semi-développée du 2,2,3-triméthylbutane.

Dérivés d'alcanes

Fiche 15 p. 441

a. Groupes caractéristiques

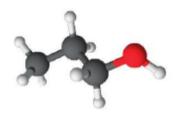
Un dérivé d'alcane est une molécule possédant le même squelette gu'un alcane mais dans laquelle un atome de carbone est lié à un atome autre que l'hydrogène. On dit que cet atome de carbone porte un groupe caractéristique. Les molécules portant le même groupe caractéristique forment une famille.

b. Alcools

Un alcool est un dérivé d'alcane dans lequel un atome d'hydrogène a été remplacé par un groupe hydroxyle -OH. Sa formule brute est $C_nH_{2n+2}O$. On la note aussi $C_nH_{2n+1}OH$.

Le nom d'un alcool est formé à partir de celui de l'alcane de la chaîne carbonée la plus longue portant le groupe hydroxyle. La racine correspondant à la chaîne carbonée est suivie de an-numéro du carbone qui porte OH-ol.

Remarque Dans un dérivé d'alcane, on numérote la chaîne carbonée principale de façon à avoir le groupe sur le carbone de numéro le plus petit possible.



Doc. 8 Représentation en trois dimensions de la molécule de propan-1-ol.

Exemple

Formule semi-développée du propan-1-ol (doc. 8):

c. Aldéhydes et cétones

Le groupe carbonyle C=0 est formé par un atome de carbone doublement lié à un atome d'oxygène et simplement lié à deux autres atomes.

Un aldéhyde est un dérivé d'alcane dans lequel le groupe carbonyle est sur un carbone de bout de chaîne. Sa formule brute est $C_nH_{2n}O$. Son nom est constitué de celui de l'alcane de la chaîne carbonée la plus longue portant le groupe carbonyle. Sa racine est suivie de -an et du suffixe -al.

Exemple

- Formule semi-développée
- du 2-méthylbutanal (doc. 9) :

$$H_3C$$
— CH_2 — CH — CH = O
 CH_3

Une **cétone** est un dérivé d'alcane dans lequel un carbone lié à deux autres atomes de carbone possède le groupe carbonyle. Elle comporte donc au moins trois atomes de carbone. Sa formule brute est $C_nH_{2n}O$. Son nom est constitué de celui de l'alcane de la chaîne carbonée la plus longue **portant le groupe carbonyle**. Sa racine est suivie de -an-numéro du carbone qui porte l'atome d'oxygène-one.

Exemple

- Formule semi-développée
- du 4-méthylpentan-2-one (doc. 10) :

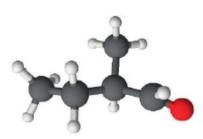
$$\begin{array}{c|c} \mathsf{H_3C} {\longleftarrow} \mathsf{CH} {\longleftarrow} \mathsf{CH_2} {\longleftarrow} \mathsf{C} {\longleftarrow} \mathsf{CH_3} \\ | & || \\ \mathsf{CH_3} & \mathsf{O} \end{array}$$



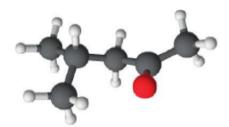
Un acide carboxylique est un dérivé d'alcane possédant un groupe carboxyle, c'est-à-dire un atome de carbone de bout de chaîne à la fois doublement lié à un atome d'oxygène (groupe carbonyle) et simplement lié à un groupe hydroxyle. Sa formule brute est $C_nH_{2n}O_2$. Son nom est constitué de celui de l'alcane de la chaîne carbonée la plus longue portant le groupe carboxyle. Sa racine est précédée du mot « acide » et suivie de -an et du suffixe -oïque.

Exemple

- Formule semi-développée
- de l'acide propanoïque (doc. 11) :



Doc. 9 Représentation en trois dimensions de la molécule de 2-méthylbutanal.



Doc. 10 Représentation en trois dimensions de la molécule de 4-méthylpentan-2-one.



Doc. 11 Représentation en trois dimensions de la molécule d'acide propanoïque.

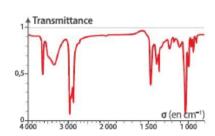
Remarque Les formules semi-développées ne représentent que les liaisons et ne reproduisent pas la géométrie de la molécule. La formule de l'acide propanoïque peut aussi être représentée ainsi:

3 Spectroscopie infrarouge

a. La spectroscopie infrarouge

On soumet un échantillon contenant une espèce chimique donnée à une radiation infrarouge de longueur d'onde λ comprise entre 800 nm et 25 000 nm et de nombre d'onde $\sigma = \frac{1}{\lambda}$. Pour certaines valeurs de σ , la radiation est absorbée et la transmittance est strictement inférieure à 1 ; pour les autres valeurs, cette radiation n'est pas absorbée et la transmittance vaut 1 (doc. 12).

Le spectre infrarouge (IR en abrégé) d'un échantillon représente la transmittance en fonction du nombre d'onde σ , exprimé en cm¹. Les pics d'absorption sont dirigés vers le bas.



Doc. 12 Spectre infrarouge du 2-méthylpropan-1-ol.

b. Identification de groupes caractéristiques

Le nombre d'onde d'une radiation absorbée par une liaison donnée ne dépend que des atomes mis en jeu dans la liaison et de la multiplicité de cette liaison. Il ne dépend pas de la molécule qui contient cette liaison.

On peut donc regrouper les bandes d'absorption caractéristiques des liaisons dans une table (doc. 13). Celle-ci indique les valeurs minimale et maximale (séparées par des tirets) de nombres d'onde, entre lesquelles la bande est située, la largeur* de la bande et l'intensité* de l'absorption.

Remarque Au chapitre 17, on présente l'absorption d'une onde électromagnétique par un atome. Ici, c'est le système formé par les atomes et les doublets qui les lient qui absorbe

l'onde.

Type de liaison	σ (en cm ⁻¹)	Largeur de la bande	Intensité de la bande
C–H	2 900 - 3 100	Variable	Moyenne à forte
O–H (phase gazeuse)	vers 3 600	Fine	Forte
O–H (alcool, phase condensée)	3 200 - 3 550	Large	Forte
O-H (groupe carboxyle)	2 500 - 3 500	Large	Moyenne à forte
C=O (acide carboxylique)	1 700 - 1 730	Fine	Forte
C=O (aldéhyde)	1 720 - 1 740	Fine	Forte
C=O (cétone)	1 700 - 1 720	Fine	Forte

Doc. 13 Extrait de tables spectroscopiques.

L'étude des bandes d'absorption dans un spectre IR permet d'identifier les groupes caractéristiques présents dans la molécule.

C'est donc un outil intéressant de détermination des caractéristiques d'une molécule inconnue, mais qui ne permet pas sa détermination complète (nombre d'atomes de carbone, position des groupes).

Exemple

On donne ci-contre la formule semi-développée de l'acide butanoïque. H₃C — CH₂— CH₂— C

Sur son spectre IR (doc. 14), on peut observer :

- un pic intense autour de σ = 3 000 cm⁻¹ (b) caractéristique des liaisons C–H, confirmant que c'est un dérivé d'alcane;
- un pic intense autour de $\sigma=1\,700~cm^{-1}$ (c) caractéristique du groupe carbonyle C=O et un pic autour de $\sigma=3\,300~cm^{-1}$ (a) caractéristique du groupe hydroxyle –OH, confirmant ainsi la présence de la fonction carboxyle.
- Les alcools et les acides carboxyliques peuvent développer des liaisons hydrogène* entre l'atome d'oxygène du groupe hydroxyle d'une molécule et l'atome d'hydrogène de celui d'une autre molécule (doc. 15). Cette liaison n'est possible que si les molécules sont assez proches les unes des autres : c'est le cas en phase condensée (solide ou liquide) mais pas en phase gazeuse.

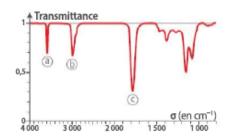
L'existence ou non de ces liaisons peut être lue sur le spectre IR : en phase gazeuse, la bande d'absorption de 0—H est fine et moyennement intense, alors qu'en phase condensée, elle est large et forte.

 Les spectres IR présentent de nombreux autres pics d'absorption que ceux des groupes caractéristiques. On ne les exploite pas, en général.

L'intervalle [200 cm⁻¹; 1 500 cm⁻¹] du spectre ne présente pratiquement pas de pics **caractéristiques d'une liaison donnée**, mais au contraire de très nombreux pics **spécifiques à une molécule donnée**. C'est pourquoi on appelle ces pics les *empreintes digitales* de la molécule.

Vocabulaire

- Largeur de la bande d'absorption: largeur de l'intervalle des nombres d'onde des radiations absorbées, on parle de pic lorsque la bande est étroite et pointue.
- Intensité d'absorption: plus la transmittance est proche de 0, plus l'intensité est grande.
- Liaison hydrogène : interaction électrostatique entre un atome fortement électronégatif (0, N) et un atome d'hydrogène de deux molécules distinctes.



Doc. 14 Spectre IR de l'acide butanoïque (en phase gazeuse).

$$\begin{array}{c} \operatorname{H_3C-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-O} \\ \operatorname{liaison} & \operatorname{H} \\ \operatorname{hydrog\`ene} \end{array}$$

$$\operatorname{H_3C-CH_2-CH_2-CH_2-O} \\ \operatorname{H_3C-H_2-CH_2-O} \\ \operatorname{H} \end{array}$$

Doc. 15 Liaison hydrogène entre deux molécules de butan-1-ol.

GROUPES CARACTÉRISTIQUES

