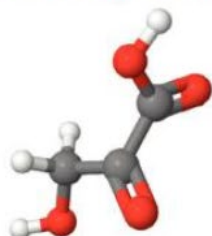


Vu
en 1^{re}

Molécule : modélisation, nom et groupes caractéristiques

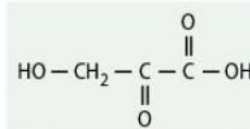
Modèle moléculaire



Formule brute



Formule semi-développée



Modélisation

MOLÉCULE

Exemple : acide 2-oxo-3-hydroxypropanoïque

Nom

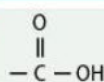
Familles
fonctionnelles

Nature et position
des groupes alkyles

Famille
fonctionnelle

Préfixe-Racine-Suffixe

Nombre d'atomes de carbone
dans la chaîne principale



Famille des acides carboxyliques



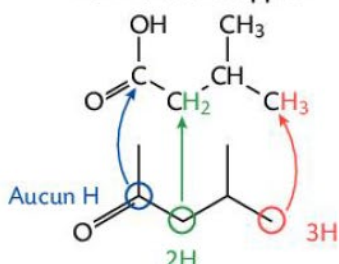
Famille des alcools



Famille des composés carbonylés
(aldéhydes ou cétones)

A Nombre d'atomes d'hydrogène

Formule développée



Formule topologique

B Familles fonctionnelles vues en classe de Première

Famille fonctionnelle et suffixe

Alcool	Acide carboxylique
-OH	-C(=O)OH
ol	oïque
Aldéhyde	Cétone
-C(=O)H	C-C(=O)C
al	one

> Dans un alcool, l'atome de carbone lié au groupe -OH doit former quatre liaisons simples. Pour les acides carboxyliques, le nom de la molécule commence par le mot acide.

C Règles de nomenclature

Le nom des molécules organiques est de la forme :

Nature et position du (ou des) groupe(s) alkyle(s) Famille fonctionnelle

Préfixe - Racine - Suffixe

Nombre d'atomes de carbone dans la chaîne principale

1 La structure des entités chimiques organiques

a. Formules topologiques

• L'écriture topologique est une représentation simple et rapide des molécules organiques :

- 1 Les atomes de carbone et les atomes d'hydrogène liés à ces atomes ne sont pas indiqués.
- 2 Les atomes d'hydrogène non liés à des atomes de carbone sont indiqués.
- 3 Un sommet correspond à un atome de carbone et aux atomes d'hydrogène qui sont liés à l'atome de carbone.
- 4 Un segment correspond à un doublet liant.
- 5 La chaîne carbonée est représentée en ligne brisée (« zigzag »).



• Le nombre d'atome(s) d'hydrogène lié(s) à chaque atome de carbone se retrouve facilement car ce dernier est entouré de quatre doublets liants (doc. A).

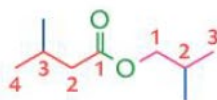
b. Familles fonctionnelles et nomenclature

- Pour nommer une espèce chimique, il faut suivre les règles récapitulées dans la **Fiche 8 p. 459**.
- Le suffixe du nom indique la famille fonctionnelle à laquelle appartient l'espèce chimique (tableau B et doc. C).

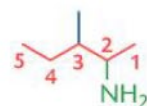
Famille fonctionnelle	Ester	Amine	Amide	Halogénoalcane	
Groupe caractéristique	-C(=O)O-C	-N-	-C(=O)N-	-F	-Cl
				-Br	-I
Suffixe ou préfixe	... oate de ... yle	amine*	amide*	fluoro ; chloro ; bromo ; iodo	

* Si l'atome d'azote, en plus d'être lié à la chaîne principale, est aussi lié à des groupes alkyles, le nom est précédé de la mention N-alkyl.

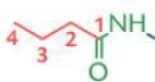
Exemples



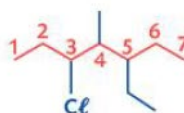
3-méthylbutanoate de 2-méthylpropyle



3-méthylpentan-2-amine

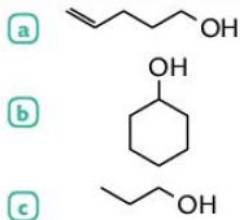


N-méthylbutanamide



3-chloro-5-éthyl-4-méthylheptane

D Squelettes carbonés



> Les squelettes carbonés du pent-4-én-1-ol (a) et celui du cyclohexanol (b) sont **insaturés**. Le squelette du propan-1-ol (c) est **saturé**.

c. Squelette carboné

- Le **squelette carboné** représente l'enchaînement des atomes de carbone constituant une molécule organique.
- Si une liaison multiple (double ou triple) ou un cycle est présent, le squelette est dit **insaturé**. Dans le cas contraire, il est dit **saturé** (doc. D).

d. Isomérisie de constitution

Deux espèces sont **isomères de constitution** si leurs molécules ont la même formule brute et des formules semi-développées différentes.

Exemple

	Formule brute	Formule semi-développée	Formule topologique
Acide propanoïque	$C_3H_6O_2$	$CH_3-CH_2-C(=O)OH$	
Éthanoate de méthyle	$C_3H_6O_2$	$CH_3-C(=O)O-CH_3$	

2 L'optimisation d'une synthèse

a. Augmentation de la vitesse de formation

Pour augmenter la vitesse de formation d'un produit, on peut :

- **chauffer** le milieu réactionnel avec un montage de chauffage à reflux ;
- utiliser un **catalyseur** ;
- augmenter la **concentration des réactifs** en solution.

b. Optimisation du rendement

Dans le cas où une réaction opposée limite une synthèse, on peut améliorer le rendement de cette dernière :

- en introduisant l'un des **réactifs en excès** ;
- en **éliminant** du milieu réactionnel un des **produits** de la réaction.

Exemple : Soient les réactions opposées dont l'équation est donnée ci-dessous.



Le milieu réactionnel est ici constitué d'un mélange d'espèces liquides miscibles ; dans ce cas le quotient de réaction s'écrit :

$$Q_r = \frac{n(HCO_2C_2H_5) \times n(H_2O)}{n(C_2H_5OH) \times n(HCO_2H)}$$

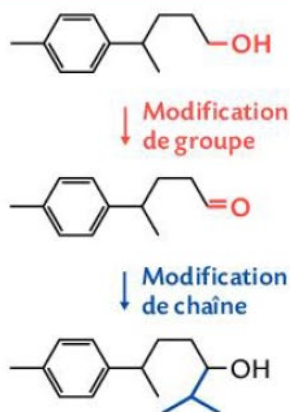
En distillant l'ester $HCO_2C_2H_5$ (doc. E) au fur et à mesure de sa formation, le quotient de réaction Q_r est toujours inférieur à la constante d'équilibre K : le système évolue de manière continue dans le sens direct de l'équation, et des rendements proches de 100 % sont alors obtenus.

E Températures d'ébullition

Formule brute	Température d'ébullition de l'espèce (°C)
C_2H_5OH	78,3
HCO_2H	118,1
$HCO_2C_2H_5$	54,3
H_2O	100,0

> Parmi les espèces du milieu réactionnel, c'est l'ester de formule $HCO_2C_2H_5$ qui a la plus faible température d'ébullition.

F Modification de groupe ou de chaîne



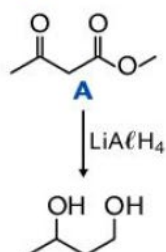
3 La stratégie de synthèse

a. Modification de groupe ou de chaîne

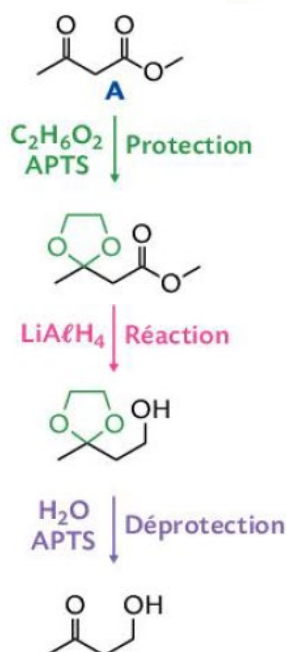
- La **chaîne carbonée** d'une molécule est **modifiée** s'il y a création ou rupture de liaison carbone-carbone. Dans le cas contraire, il y a **modification d'un ou plusieurs groupe(s)** caractéristique(s) (doc. F).

G Protection de fonction

- En présence de tétrahydroaluminat de lithium, les deux groupes fonctionnels de la molécule **A** sont transformés :



- Grâce à des étapes de protection et de déprotection, il est possible de transformer un seul des deux groupes caractéristiques de la molécule **A** :



- Lors d'une synthèse, si plusieurs groupes caractéristiques peuvent réagir lors d'une même réaction, il convient de protéger l'un des groupes par un groupe protecteur moins réactif (doc. **G**).

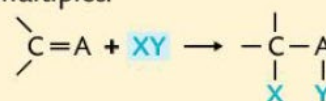
Lors d'une **protection de fonction**, un groupe caractéristique est transitoirement transformé en un autre groupe caractéristique moins réactif. Une réaction de déprotection doit exister pour régénérer le groupe caractéristique initial.

b. Catégories de réaction

- En chimie organique, on peut classer la plupart des réactions en quatre grandes catégories :

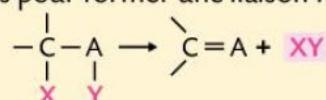
• Addition

Lors d'une **réaction d'addition**, des atomes ou des groupes d'atomes se lient à des atomes engagés dans des liaisons multiples.



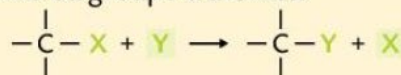
• Élimination

Lors d'une **réaction d'élimination**, des atomes ou groupes d'atomes, portés par des atomes adjacents, sont éliminés pour former une liaison multiple.



• Substitution

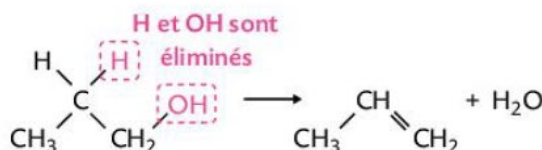
Lors d'une **réaction de substitution**, un atome ou un groupe d'atomes d'une molécule est remplacé par un autre atome ou groupe d'atomes.



• Acide-Base

Lors d'une **réaction acide-base**, un échange d'ion hydrogène H^+ se produit.

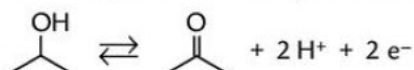
Exemple : La réaction dont l'équation est donnée ci-dessous est une réaction d'élimination.


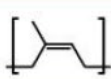
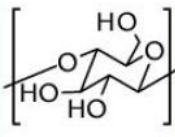


- Un classement complémentaire est parfois possible, certaines réactions peuvent être aussi qualifiées de réactions d'oxydation ou de réduction.

Lors d'une **réaction d'oxydoréduction** il se produit un échange d'électron(s).

Exemple : La réaction modélisant la transformation du propan-2-ol en propanone est une réaction d'oxydation. C'est aussi une réaction d'oxydation car elle peut être modélisée par la demi-équation électronique donnée ci-dessous.



Nom, utilisation et origine	Motif
Polychlorure de vinyle (PVC) Revêtements de sol, canalisations etc. Synthétique	
Cis-polyisoprène Caoutchouc Naturel (Latex)	
Cellulose Mouchoirs en papier Naturel (Paroi des cellules végétales)	

lycee.hachette-education.com/pc/tle



Stratégie de synthèse

VIDÉO DE COURS

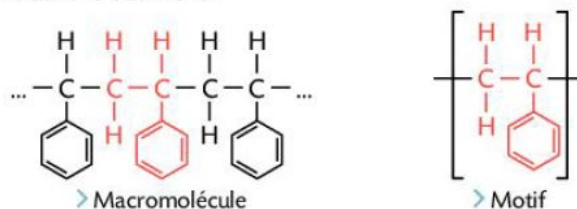
INFO

- On distingue le **réactif principal A** qui est le précurseur de la molécule cible du **réactif secondaire CH₃I**.
- Au-dessous et au-dessus de la flèche, des informations sont fournies : solvant, température, chauffage (noté Δ), catalyseur, durée de la réaction, etc.
- Dans l'écriture simplifiée, seule la formule de la **molécule cible** est indiquée (ici B). Le sous-produit de la réaction I⁻ n'est pas indiqué.

c. Réaction de polymérisation

Un **polymère** est un ensemble de **macromolécules**. Dans une macromolécule, une unité structurale appelée **motif** se répète un grand nombre de fois.

Exemple : Le polystyrène est un polymère synthétique utilisé par exemple comme isolant dans le bâtiment.



Une **réaction de polymérisation** permet d'obtenir les macromolécules constituant le polymère à partir d'un très grand nombre de molécules identiques appelées **monomères**.

Exemple : La réaction dont l'équation est donnée ci-dessous est une réaction de polymérisation. On peut aussi la qualifier de réaction d'addition.

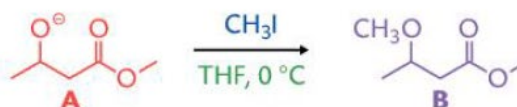


Les polymères peuvent être d'origine naturelle ou synthétique (tableau H).

d. Synthèse multi-étapes

- La **synthèse organique** consiste à produire une espèce chimique organique. Les molécules de cette espèce, dites **molécules cibles**, sont plus complexes que les molécules des réactifs appelés **précurseurs** de la molécule cible.
- Une équation est toujours ajustée mais en chimie organique, on utilise souvent une écriture simplifiée (INFO).

Exemple :



- Pour définir une stratégie de synthèse (ordre des étapes, mise en place d'éventuelles étapes de protection, etc.), le chimiste dispose de banques de réactions (voir la **Fiche 9 p. 460**).
- Pour comparer plusieurs synthèses d'une même espèce cible, un critère important est le **rendement global** de la synthèse qui doit être le plus élevé possible.
- D'autres critères sont aussi importants : écoresponsabilité, coût, durée, etc.

Une **synthèse écoresponsable** d'un produit permet de réduire au maximum l'empreinte environnementale en se proposant d'agir sur trois domaines :

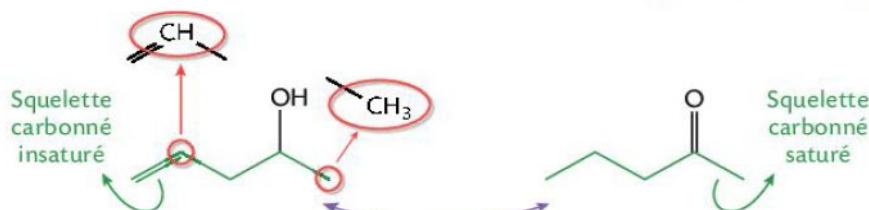
- les matières premières : en limitant les quantités, en préférant des espèces peu dangereuses, renouvelables, etc. ;
- les solvants : non toxiques, non polluants, en faible quantité voire sans solvant ;
- l'énergie : en limitant les dépenses, en utilisant des conditions douces (catalyseur, faibles températures, etc.).

L'essentiel



VIDÉO DE COURS
Stratégie de synthèse
QCM
Version interactive

1 La structure des entités chimiques organiques



Même formules brutes ($C_5H_{10}O$) et formules topologiques semi-développées différentes : **isomère de constitution**

Nom d'une espèce

Savoir utiliser
la **Fiche 8** p. 459

Famille fonctionnelle	Halogénoalcane	Alcool	Aldéhyde	Cétone	Acide carboxylique	Ester	Amine	Amide
Groupe caractéristique	$C-X$ avec $X = Cl, Br, I$	$\begin{array}{c} \\ -C-OH \\ \end{array}$	$\begin{array}{c} -C=O \\ \\ H \end{array}$	$\begin{array}{c} C-C=O \\ \\ C \end{array}$	$\begin{array}{c} -C=O \\ \\ OH \end{array}$	$\begin{array}{c} -C=O \\ \\ O-C \end{array}$	$\begin{array}{c} -N- \\ \end{array}$	$\begin{array}{c} -C=O \\ \\ -N- \end{array}$

2 L'optimisation d'une synthèse

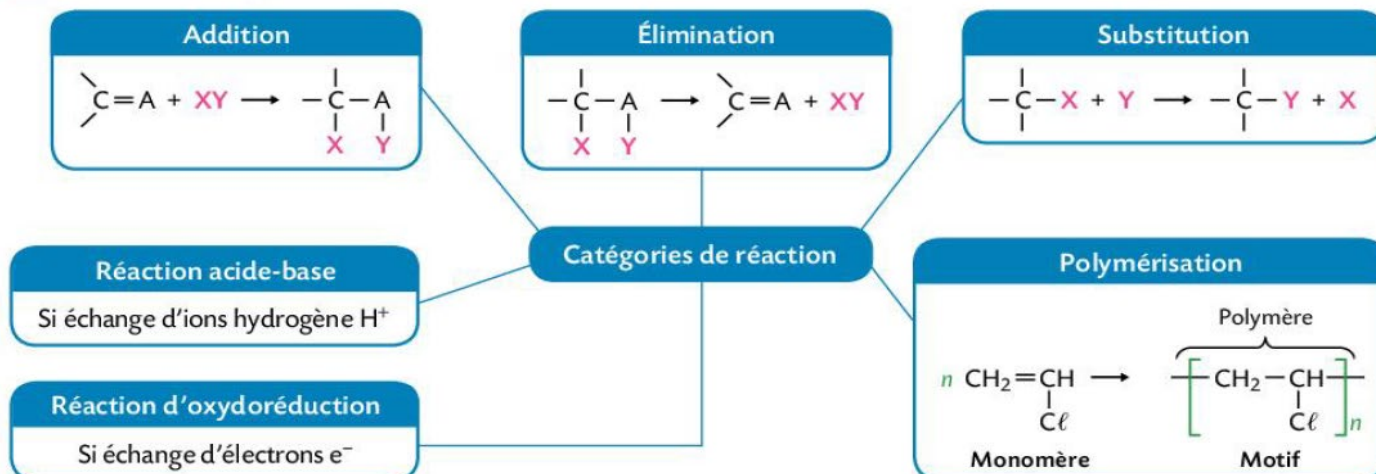
Augmentation de la vitesse de formation d'un produit

- Chauffer le milieu réactionnel.
- Utiliser un catalyseur.
- Augmenter la concentration des réactifs en solution.

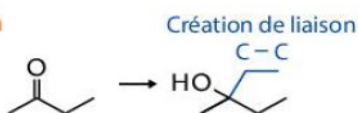
Optimisation du rendement

- Introduire un réactif en excès.
- Éliminer un produit de la réaction au fur et à mesure de sa formation.

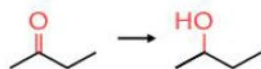
3 La stratégie de synthèse



• **Modification de chaîne**



• **Modification de groupe**



• **Protection / déprotection** de fonction :

- transformer temporairement un groupe caractéristique en un autre moins réactif ;
- une réaction de déprotection doit exister.

• Pour établir la **stratégie de synthèse** d'une espèce, savoir utiliser la **Fiche 9** p. 460.

• Critères de **comparaison de deux synthèses** :

rendement, écoresponsabilité (matière première, solvants, énergie, vitesse de formation, etc.).

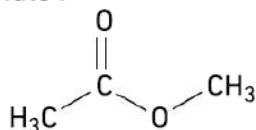
A

B

C

Famille fonctionnelle et structure d'une molécule

- 9 On considère une molécule de formule :



C'est une formule topologique.

La molécule possède un groupe amide.

La molécule appartient à la famille des esters.

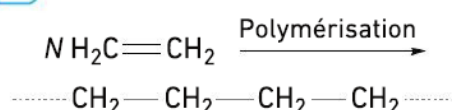
- 10 Le nom de la molécule de l'exercice 9 est :

éthanoate de méthyle.

méthanoate d'éthyle.

propanoate.

- 11 Soit la réaction :

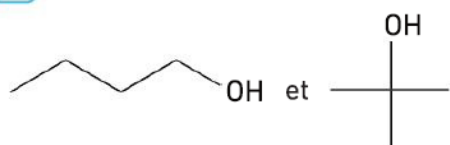


Le monomère est : $\text{CH}_2=\text{CH}_2$

Le motif est : $\text{---CH}_2\text{---}$

Le motif est : $\text{---CH}_2\text{---CH}_2\text{---}$

- 12 Les molécules



sont isomères de constitution de squelette.

sont isomères de constitution de fonction.

sont isomères de position de groupe.

Optimisation d'une étape de synthèse

Pour les exercices 13 à 15, la synthèse d'un produit est obtenue par une réaction équilibrée.

- 13 L'ajout d'un catalyseur permet :

d'augmenter le rendement.

de diminuer la vitesse de formation des produits.

d'augmenter la vitesse de formation des produits.

- 14 Pour augmenter le rendement de la synthèse d'un produit, on peut :

l'extraire du milieu réactionnel.

extraire un des réactifs.

extraire un autre produit.

- 15 L'ajout d'un réactif en excès :

augmente le rendement.

n'a aucun effet utile.

modifie la vitesse de réaction.

Stratégie de synthèse

- 16 Une réaction d'élimination :

peut s'écrire $\text{A} \rightarrow \text{B} + \text{C}$.

forme une liaison multiple.

peut s'écrire $\text{A} + \text{B} \rightarrow \text{C} + \text{D}$.

- 17 Par une suite de transformations, on obtient la 2-méthylpentan-3-one à partir du pentan-3-ol.

C'est une modification de groupe caractéristique.

Les deux molécules sont isomères de constitution.

C'est une modification de chaîne.

- 18 Pour modifier un seul groupe caractéristique choisi lors d'une réaction, on peut :

effectuer une substitution.

choisir un catalyseur spécifique.

effectuer une protection, déprotection.

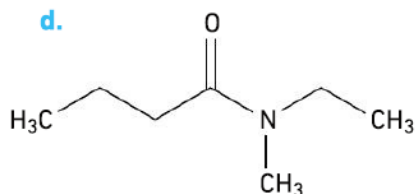
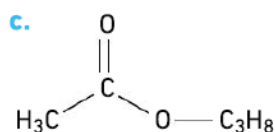
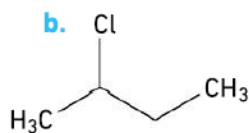
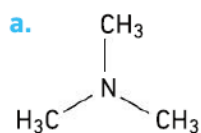
- 19 Une synthèse écoresponsable privilégie :

l'abondance des produits.

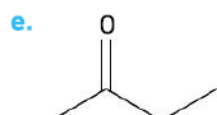
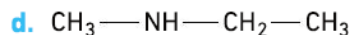
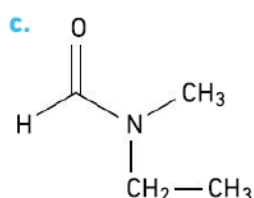
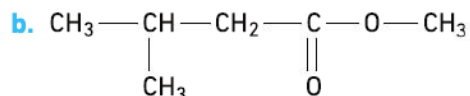
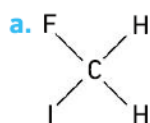
le bas coût des réactifs.

l'utilisation de catalyseurs.

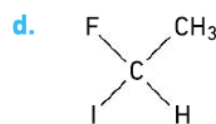
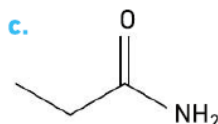
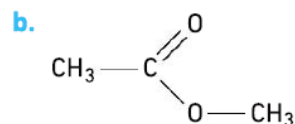
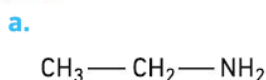
23 Pour chaque molécule ci-dessous, recopier la formule semi-développée, entourer les groupes caractéristiques et en déduire à quelle famille fonctionnelle elles appartiennent.



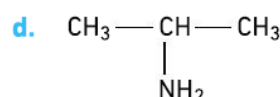
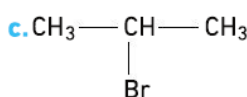
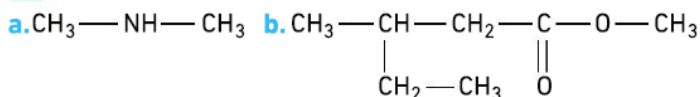
24 Identifier la famille fonctionnelle à laquelle appartiennent les molécules suivantes.



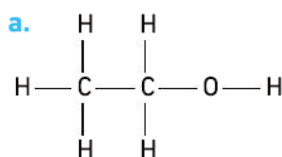
25 Nommer les molécules suivantes.



26 Nommer les molécules suivantes.

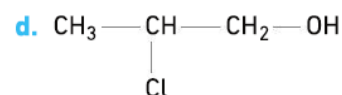


27 Donner les formules topologiques des molécules suivantes.



b. 2-méthylpropane

c. Éthanoate de méthyle



21 Synthèse d'un arôme de fraise

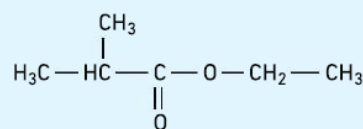
L'industrie alimentaire propose de nombreux produits sentant la fraise, mais, pour des raisons économiques, beaucoup ne contiennent pas de fraise. L'odeur de fraise est aussi celle d'une molécule notée Y (doc. 1) pouvant être synthétisée. L'équation de la réaction de synthèse de Y sera notée de façon simplifiée :



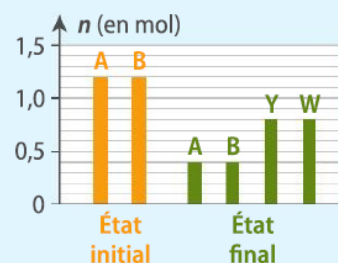
On réalise les deux mélanges ci-dessous que l'on chauffe ensuite à reflux jusqu'à l'état final d'équilibre de la réaction (doc. 2).

Espèces introduites	Mélange 1	Mélange 2
A	1,20 mol	2,40 mol
B	1,20 mol	1,20 mol
Acide sulfurique concentré	4 gouttes	4 gouttes

- Nommer la molécule Y (doc. 1).
- Calculer le rendement η_1 de la transformation 1 (doc. 2).
- Quand l'équilibre du système 2 est atteint, un dosage montre qu'il reste 1,4 mol de A. Calculer la quantité de matière de Y formé. Calculer le rendement η_2 . Comparer η_1 et η_2 et commenter.



Doc. 1 Formule semi-développée de Y.



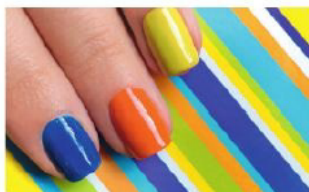
Doc. 2 Quantités de matière des réactifs et produits dans l'état initial et dans l'état final du mélange 1.

42 Synthèse d'un solvant

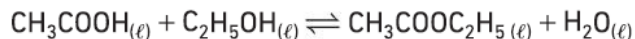
BAC

Effectuer un calcul • Justifier un protocole

L'éthanoate d'éthyle est un liquide utilisé comme solvant pour les vernis à ongles et certaines colles, en raison de sa faible nocivité et de sa volatilité importante.



La synthèse de l'acétate d'éthyle s'écrit :



Protocole

Étape 1

Dans un ballon, introduire un mélange de 0,10 mol d'acide éthanoïque et 0,10 mol d'éthanol. Ajouter 0,5 mL d'acide sulfurique concentré et des grains de pierre ponce. Chauffer à reflux pendant 30 min.

Étape 2

Refroidir le mélange réactionnel, le verser dans une ampoule à décanter contenant environ 50 mL d'eau salée. Agiter en dégazant régulièrement puis éliminer la phase aqueuse.

Étape 3

Ajouter à la phase organique 60 mL d'hydrogénocarbonate de sodium ($\text{Na}^+_{(aq)}$, $\text{HCO}_3^-_{(aq)}$) à $1 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ ($\text{HCO}_3^-_{(aq)}$ est la base conjuguée de l'acide H_2O , $\text{CO}_{2(g)}$). Décanter, éliminer la phase aqueuse et recueillir la phase organique dans un bécher. Sécher cette phase avec du chlorure de calcium anhydre puis filtrer. Recueillir le filtrat. Cette synthèse réalisée au laboratoire a permis d'obtenir un volume de filtrat égal à 5,9 mL.

Données

	Acide éthanoïque	Éthanol	Éthanoate d'éthyle
Masse molaire (en $\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$)	60,0	46,1	88,1
Masse volumique (en $\text{g} \cdot \text{mL}^{-1}$)	1,05	0,789	0,925
Solubilité dans l'eau	Très grande	Très grande	$87 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$ à 20°C
Solubilité dans l'eau salée	Très grande	Très grande	Presque nulle

- Identifier les groupes caractéristiques et les familles fonctionnelles des molécules organiques.
- Nommer les trois étapes du protocole.
- Justifier le choix dans ce protocole des conditions opératoires suivantes : chauffage à reflux, ajout d'acide sulfurique concentré, mélange avec de l'eau salée, ajout d'une solution aqueuse d'hydrogénocarbonate de sodium.
- Déterminer la valeur du rendement de la synthèse.

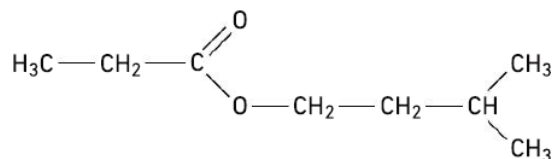
Adapté du sujet de Bac Pondichéry, 2014.

43 Arôme d'abricot

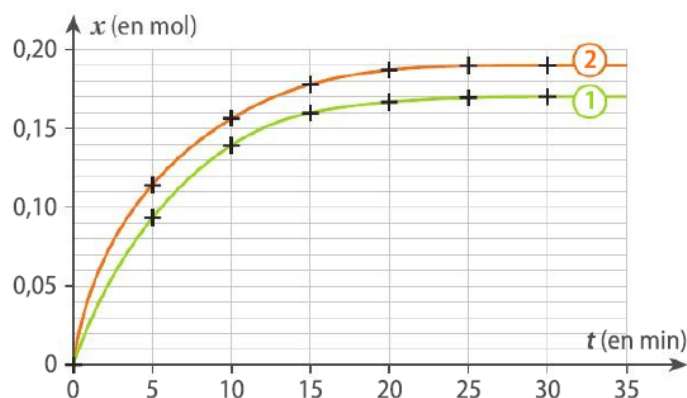
BAC

Exploiter un énoncé • Justifier un protocole

Un laborantin dispose d'acide propanoïque, de 2-méthylbutan-1-ol, d'anhydride propanoïque et d'acide sulfurique pour synthétiser l'arôme d'abricot (propanoate d'isoamyle) de formule :



- Donner la formule topologique du 2-méthylbutan-1-ol.
- Le laborantin réalise deux synthèses à partir des mélanges réactionnels suivants :
 - Synthèse ① : 2-méthylbutan-1-ol, excès d'acide propanoïque, présence d'acide sulfurique ;
 - Synthèse ② : 2-méthylbutan-1-ol, anhydride propanoïque.
 Il effectue le suivi cinétique de l'avancement dans les deux synthèses au cours du temps.



- Quel est le rôle de l'acide sulfurique dans la synthèse ① ?
- Quel est l'intérêt d'utiliser un excès d'acide propanoïque dans la synthèse ① ?
- Quelle synthèse a le meilleur rendement ?
- Quelle synthèse permet d'obtenir le plus rapidement un avancement de 0,15 mol ?
- Identifier deux avantages liés à l'utilisation de l'anhydride propanoïque.

Adapté du sujet de Bac Antilles, septembre 2007.

51 Résolution de problème La meilleure recette

L'industrie alimentaire met sur le marché de nombreux produits contenant du méthanoate d'éthyle, un arôme artificiel leur procurant l'odeur de rhum sans qu'ils contiennent d'alcool.

Doc. 1 Synthèse d'un ester par la réaction dite de Fischer

La réaction de Fischer consiste à synthétiser un ester et de l'eau à partir d'un alcool et d'un acide carboxylique : $\text{RCOOH} + \text{R}'\text{OH} \rightleftharpoons \text{RCOOR}' + \text{H}_2\text{O}$
 Cette réaction est très lente en l'absence d'un catalyseur, non totale et « athermique » (c'est-à-dire qu'elle ne produit ni ne consomme aucune énergie thermique).



Protocole 1

On chauffe à reflux un mélange d'éthanol et d'acide méthanoïque, en présence d'acide sulfurique, jusqu'à l'état final d'équilibre. On obtient, après purification du produit, un rendement $\eta_1 = 67\%$.

Protocole 2

Dans un ballon contenant 0,30 mol d'éthanol, 4 gouttes d'acide sulfurique pur (H_2SO_4) et des grains de pierre ponce, on ajoute 2,02 mol d'acide méthanoïque. On chauffe à reflux. Lorsque l'équilibre est atteint, un dosage montre qu'il reste 1,73 mol d'acide méthanoïque.

Protocole 3

Dans un ballon contenant 0,30 mol d'éthanol, 4 gouttes de solution d'acide sulfurique pur (H_2SO_4) et des grains de pierre ponce, on ajoute 0,30 mol d'acide méthanoïque. Le ballon est surmonté d'une colonne à distiller et d'un réfrigérant, pour récupérer le distillat.

En tête de colonne, un thermomètre permet de suivre la température qui monte jusqu'à 55°C environ et se stabilise pendant un certain temps. Lorsque la température monte à nouveau, on arrête le chauffage. Le volume de distillat recueilli dans l'erlenmeyer est de 23,4 mL.

PROBLÈME

Quel protocole de synthèse est le meilleur pour obtenir le méthanoate d'éthyle ?

Données

	Éthanol	Acide méthanoïque	Méthanoate d'éthyle	Eau
Masse molaire M (en $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$)	46	46	74	18
Température d'ébullition (en $^\circ\text{C}$)	78	101	55	100
Masse volumique ρ (en $\text{g}\cdot\text{mL}^{-1}$)	0,789	1,22	0,918	1,00

DES CLÉS POUR RÉUSSIR

1. S'approprier le problème

Le meilleur protocole est d'abord celui dont le rendement est le plus grand.

2. Analyser le problème

On doit déterminer le rendement de chaque protocole.

3. Réaliser les calculs et les raisonnements

- Le rendement η_3 est égal au rapport entre l'avancement final et l'avancement maximal.

4. Communiquer

5. Valider

Expliquer comment les paramètres expérimentaux modifient le rendement d'une synthèse.

