

## Représentations planes et nomenclature en chimie organique. Isoméries de constitution.



### A. Représentations planes des molécules organiques

#### 1. Formule brute

##### Définition :

La formule brute d'une molécule donne la nature et le nombre, des atomes constituant la molécule.

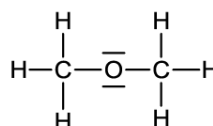
Une formule brute peut convenir à plusieurs molécules. Par exemple  $C_2H_6O$ , peut correspondre au méthoxyméthane et à l'éthanol. Elle n'indique pas la nature des groupes caractéristiques ni leur position.

#### 2. Formule développée

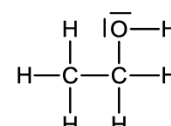
##### Définition :

La formule développée représente tous les atomes, toutes les liaisons et les doublets non liants des atomes de la molécule.

Méthoxyméthane :



Éthanol :

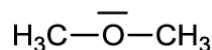


#### 3. Formule semi-développée

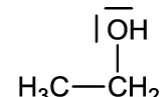
##### Définition :

La formule semi-développée est une simplification de la formule développée. Les liaisons associant les atomes d'hydrogène au reste de la molécule ne sont plus représentées.

Méthoxyméthane :



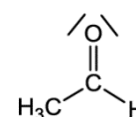
Éthanol :



Certains groupes caractéristiques pourront être condensés :

- Groupe carboxylique :  $-\text{COOH}$
- Groupe carbonyle de la classe fonctionnelle aldéhyde :  $-\text{CHO}$
- Groupe phényle :  $-\text{C}_6\text{H}_5$  ou Ph

Exception : l'hydrogène du groupement aldéhyde peut être représenté avec sa liaison.



#### 4. Représentation topologique

##### Conventions :

- On retire tous les atomes de carbones ainsi que les atomes d'hydrogène portés par les carbones.
- Il ne reste que les hétéroatomes ainsi que les atomes d'hydrogène qu'ils portent.
- Liaisons C-C : lignes brisées (la plupart du temps en « zig-zag »).
- Les hydrogènes liés aux carbones sont implicites.

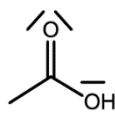
Méthoxyméthane :



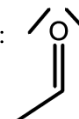
Éthanol :



Acide éthanoïque :



Éthanal :



Attention à ne pas oublier d'atomes d'hydrogène lors du passage de la représentation topologique à la représentation semi-développée, surtout lorsque la molécule possède des liaisons multiples.

Une astuce : rappelez-vous que s'il n'y a pas de charge sur un atome de carbone, il participe forcément à 4 liaisons.

## B. Nomenclature

Pour se comprendre entre eux, et nommer de manière identique les molécules, les chimistes ont besoin de règles communes. L'U.I.C.P.A. (Union Internationale de Chimie Pure et Appliquée, I.U.P.A.C en anglais), propose une nomenclature dont vous devez connaître les règles élémentaires.

Au cours de l'année nous verrons également des noms usuels pour certains composés (dans un magasin de bricolage, on achète de l'acétone, et pas de la propanone...).

Avant de pouvoir nommer une molécule, il convient de déterminer quelles en sont les différentes parties.

### a) La chaîne principale

Elle définit l'enchaînement de base (et le nom fondamental) qui est toujours associé à un nombre d'atomes de carbone bien défini. Les noms dérivés de cette chaîne principale proviennent de l'addition d'un (ou de plusieurs) préfixe(s) et/ou d'un suffixe.

### b) Les substituants

Tout atome ou groupe d'atomes qui remplace l'hydrogène dans un composé fondamental. Ils sont mentionnés en préfixe.

### c) Le groupe caractéristique (ou groupe fonctionnel)

Il correspond à un atome ou un groupe d'atomes introduit dans la chaîne principale autrement que par une liaison carbone-carbone. Il est généralement indiqué par un suffixe. Lorsque la molécule est polyfonctionnelle, un seul groupe fonctionnel est groupe principal car il existe un ordre de priorité des fonctions. Pour chaque fonction on définit donc deux désignations.

## I- Quelques notions d'écriture

### 1. Les termes multiplicatifs

Un substituant ou un groupe caractéristique présent plusieurs fois sur une chaîne principale est précédé d'un terme multiplicatif : di, tri, tétra, penta, hexa, hepta, octa, nona...

### 2. Les indices de position

Les indices précisant la position sur la chaîne principale sont placés immédiatement devant le(s) substituant(s) ou le groupe caractéristique auxquels ils se rapportent et sont reliés par des tirets placés de part et d'autre (sauf l'indice en tête du nom qui ne possède qu'un tiret).

*Ex : 1-bromo-3-chloropentan-2-ol*

Un même substituant ou groupe caractéristique présent plusieurs fois est nommé en indiquant successivement :

- les numéros des carbones de la chaîne principale le portant par des indices successifs séparés par des virgules,
- un tiret après le dernier indice suivi du terme multiplicatif adéquat. *ex : 2,2,3-trichloropentane*

### 3. Elision des voyelles

La voyelle "e" doit être éliminée dans les cas suivants :

- à la fin du nom fondamental s'il est suivi d'un suffixe commençant lui-même par une voyelle. *ex : pentan-2-ol* mais on écrira *pentane-1,2-diol*. La désinence "èn" devient "én" lorsqu'elle est devant un suffixe commençant par une voyelle autre que "e". *ex : pent-3-én-1-ol, mais pent-3-ène-1,2-diol*

- à la fin de tout substituant, et ceci indépendamment de ce qui le suit. La voyelle "a" des termes multiplicatifs est éliminée quand elle est suivie d'un suffixe ou d'une terminaison commençant par "a" ou "o".

## II- Nomenclature des alcanes

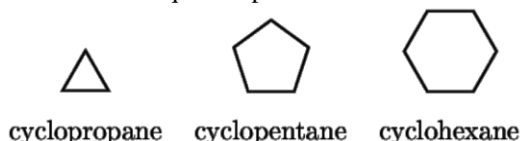
### 1. Alcanes linéaires ou acycliques

Le nom des alcanes linéaires dépend uniquement du nombre d'atomes de carbone de la molécule et dérive de l'usage, de racines grecques ou latines suivant les cas et avec comme suffixe « ane ».

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

### 2. Alcanes monocycliques

Leur nom dépend du nombre d'atomes de carbone dans le cycle. L'alcane monocyclique comportant n atomes de carbone se nomme en rajoutant le préfixe cyclo au nom de l'alcane linéaire qui comporte le même nombre d'atomes de carbone.



### 3. Les groupes alkyles simples

Quand un groupe univalent (ou radical) dérive d'un hydrocarbure saturé par enlèvement d'un hydrogène, le nom du groupe s'obtient en remplaçant la terminaison "ane" de l'hydrocarbure par "yle". Ces groupes sont appelés ALKYLES.

*Ex : groupe éthyle  $-CH_2-CH_3$*

#### 4. Alcanes ramifiés : nomenclature substitutive en alkylalcane

Un alcane ramifié est un alcane dont on a substitué un atome d'hydrogène par un groupe alkyle.

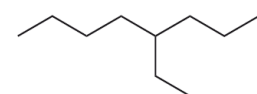
##### Alcanes avec une seule ramification

Méthode de recherche du nom :

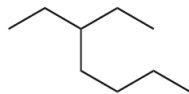
1. Rechercher la chaîne linéaire contenant la chaîne carbonée la plus longue. Le nom de la molécule a alors pour suffixe le nom de l'alcane linéaire correspondant.
2. Cette chaîne est numérotée par carbone en partant d'une extrémité, de façon à ce que la ramification soit portée par le carbone de plus bas numéro.

On nomme alors la molécule ainsi :

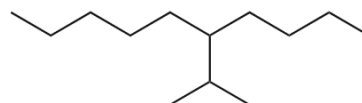
- le numéro du carbone porteur de la ramification,
- un tiret,
- le nom du groupe alkyle (sans -e) suivi du nom de l'alcane, le tout sans espace.



4-éthyl-octane



3-éthyl-heptane



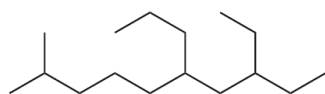
5-isopropyl-décane

##### Alcanes linéaires avec plusieurs ramifications simples

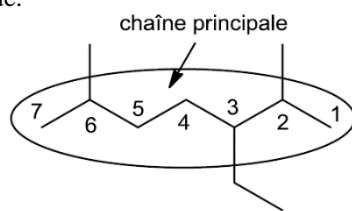
Méthode de recherche du nom :

1. Comme précédemment, on numérote les carbones de la chaîne la plus longue. La numérotation qui doit être choisie est celle qui attribue le plus petit numéro au premier groupe alkyle rencontré.
2. Les substituants sont classés par ordre alphabétique.
3. On nomme alors la molécule en attribuant le numéro du substituant au groupe alkyle correspondant : on le place avant le nom de ce groupe, et on sépare un chiffre d'une lettre par un tiret. On termine à nouveau par le nom de l'alcane de même nombre d'atomes que la chaîne la plus longue.

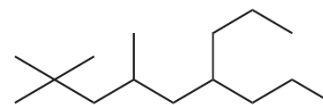
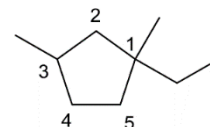
3-éthyl-2,6-diméthylheptane



8-éthyl-2-méthyl-6-propyl-décane



1-éthyl-1,3-diméthylcyclopentane



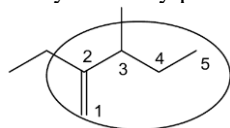
2,2,4-triméthyl-6-propyl-nonane

### III- Nomenclature des hydrocarbures acycliques insaturés

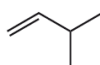
Le nom générique des hydrocarbures acycliques non saturés est **alcènes** s'ils comportent une double liaison  $C=C$ , et **alcynes** s'ils comportent une triple liaison  $C\equiv C$ .

Leur nom se forme à partir de l'alcane qui possède le même squelette carboné, en remplaçant la terminaison -ane par la terminaison -ène ou -yne. La chaîne principale est la chaîne la plus longue contenant la double (ou triple) liaison. La position de la double (ou triple) liaison dans la chaîne principale est indiquée par un numéro, placé avant la terminaison -ène (ou -yne), donnant le numéro du premier carbone non saturé rencontré lorsqu'on suit le sens de numérotage de la chaîne. L'insaturation est prioritaire sur les préfixes. La triple liaison (liaison  $CC$  trivalente) est prioritaire devant la double liaison (divalente).

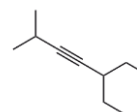
2-éthyl-3-méthylpent-1-ène :



3-méthylbutène :



5-éthyl-2-méthylhept-3-yne :



Un hydrocarbure insaturé avec une réactivité très particulière possède un nom qui lui est propre : **le benzène**.



### IV- Principes généraux de nomenclature des fonctions

On détermine la chaîne principale en fonction des critères successifs suivants. Elle doit contenir :

1. le groupe caractéristique
2. le maximum d'insaturations
3. la chaîne hydrocarbonée la plus longue
4. un nombre maximal de substituants désignés par des préfixes. Le nom du composé se forme de la manière suivante :

Préfixes	Chaîne principale	Suffixes d'insaturations	Suffixe de la fonction prioritaire
A	B	C	D

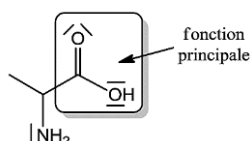
Le sens de numérotage de la chaîne doit, dans les choix successifs qui peuvent se présenter, affecter par priorité décroissante l'indice de position le plus petit à D (s'il y a lieu), puis à C (s'il y a lieu) et enfin à A.

Les fonctions sont répertoriées dans le tableau suivant. Elles y sont classées par ordre de priorité décroissante.

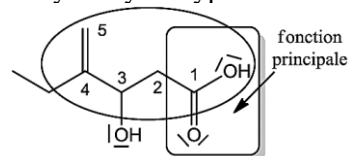
Remarque : dans les dérivés halogénés des hydrocarbures (R-X), l'hétéroatome est toujours considéré comme un substituant et apparaît donc en préfixe dans le nom de la molécule.

Classe ORDONNEE Nom générique	Formule	Suffixe	Préfixe Nom de groupe
acides carboxyliques	$\text{R}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{OH}$	<b>oïque</b> nom : <b>acide alcanoïque</b>	$\text{---}\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{OH}$ carboxy-
sels d'acide	$\text{R}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{O}^-$	<b>oate</b> nom : <b>alcanoate</b>	$\text{---}\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{O}^-$ carboxylato-
esters	$\text{R}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{O}-\text{R}'$	<b>alcanoate d'alkyle</b> R R'	$\text{---}\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{O}-\text{R}'$ alkyloxycarbonyl-
chlorures d'acyle	$\text{R}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{Cl}$	<b>oyle</b> nom : <b>chlorure d'alcanoyle</b>	$\text{---}\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{Cl}$ chloroformyl-
amides	$\text{R}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{NR}_1\text{R}_2$	<b>Amide</b> nom : <b>(N,N-R<sub>1</sub>R<sub>2</sub>) alcanamide</b> R	$\text{---}\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{NR}_1\text{R}_2$ R <sub>1</sub> R <sub>2</sub> -carbamoyl-
nitriles	$\text{R}-\text{C}\equiv\text{N}$	<b>alcanenitrile</b>	$\text{N}\equiv\text{C}-$ <b>cyano-</b>
aldéhydes	$\text{H}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{R}$	<b>al</b>	$\text{H}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-$ formyl-
cétones	$\text{R}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{R}'$	<b>one</b>	$\text{O}=\text{C}$ <b>oxo-</b> (le carbone fait partie de la chaîne principale)
alcools (et phénols)	$\text{R}-\text{OH}$	<b>ol</b>	HO- <b>hydroxy-</b>
thiols	$\text{R}-\text{SH}$	<b>thiol</b>	H-S- mercapto-
sels des alcools	$\text{R}-\text{O}^-$	<b>olate</b> nom : <b>alcanolate</b>	
éthers-oxydes	$\text{R}-\text{O}-\text{R}'$	nom : <b>alcoyalcane</b>	R-O- <b>alcoxy-</b>
amines	$\text{R}-\text{NR}_1\text{R}_2$	<b>Amine</b> nom : <b>(N-R<sub>1</sub>,N-R<sub>2</sub>)R- amine</b>	-NR <sub>1</sub> R <sub>2</sub> : R <sub>1</sub> R <sub>2</sub> amino-

Acide 2-aminopropanoïque



Acide 4-éthyl-3-hydroxypent-4-énoïque

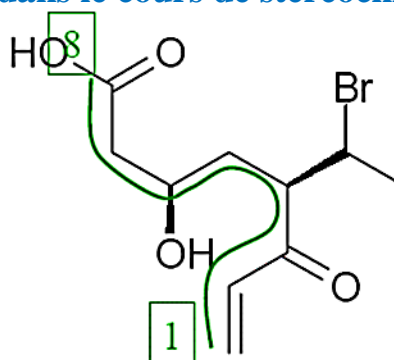


## BILAN (les nomenclatures R et S seront vues dans le cours de stéréochimie)

Un peu de nomenclature complexe

La fonction principale : l'acide

*acide alcénoïque*



1 - choisir la chaîne la plus longue

acide **octénoïque**

2 - numéroté les fonctions de la chaîne

L'acide est prioritaire : **1**

2 - les substituants :

Hydroxy, (1-bromoéthyl), oxo

3 - numéroté les substituants sur la chaîne :

un seul choix possible : 3, 5, 6

4 - écrire le nom avec les substituants dans l'ordre alphabétique

5-(1-bromoéthyl)-3-hydroxy-6-oxo

Acide (3R, 6R) 5-(1-bromoéthyl)-3-hydroxy-6-oxooct-7-énoïque

### C. Notion d'isomérisation

#### Définitions :

**Isomères :** Des isomères sont des molécules ayant la même formule brute mais qui diffèrent soit :

- par l'ordre et/ou la nature des liaisons (isomères de constitution),
- par la disposition des atomes dans l'espace (stéréoisomère)

**Isomères de constitution :** Deux isomères de constitution possèdent la même formule brute mais leur formule développée diffère. Ils diffèrent par l'ordre et/ou la nature des liaisons.

Des isomères de constitution ont des propriétés physico-chimiques différentes.

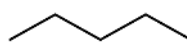
#### 1. Isomère de chaîne

##### Définition :

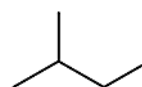
L'**isomérisation de chaîne** est une isomérisation de constitution pour laquelle l'enchaînement des atomes de carbone diffère.

Exemples : C<sub>5</sub>H<sub>12</sub>

pentane



2-méthylbutane

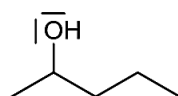


#### 2. Isomérisation de position

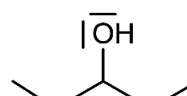
##### Définition :

L'**isomérisation de position** est une isomérisation de constitution pour laquelle le groupe caractéristique, identique, n'a pas la même position dans les molécules isomères.

pentan-2-ol



pentan-3-ol



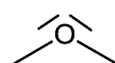
#### 3. Isomérisation de fonction

##### Définition :

L'**isomérisation de fonction** est une isomérisation de constitution pour laquelle les molécules isomères ne possèdent pas le même groupe caractéristique.

Exemples : C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>O

méthoxyméthane



éthanol

