

Activité S1.13 : Les molécules organiques : définitions et représentations

Quelques définitions

Formule brute : une formule brute correspond à la stœchiométrie des atomes d'une molécule $C_nH_mN_yO_x$; elle est insuffisante pour caractériser un produit.

Analyse élémentaire (ou centésimale) : on détermine la formule brute d'une molécule organique en faisant une analyse élémentaire qui fournit les pourcentages massiques des différents éléments.

Par définition : $\% C = \frac{n \times M(C)}{M(\text{totale})} \times 100$ ou $M(\text{totale})$ est la masse molaire de la molécule.

Exemple :

le cholestérol $C_{27}H_{46}O$ ($M = 386 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$) 83,9% de C 11,9% de H et 4,2% de O.

activité 13.1 Analyse centésimale

Le glucose est un sucre contenant l'élément carbone, l'élément hydrogène et l'élément oxygène.

Une analyse centésimale conduit aux pourcentages en masse suivants :

C : 40,0 % ; H : 6,7 % ; O : 53,3 %

Sachant que la masse molaire du glucose est de $180 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$, déterminez la formule brute du glucose.

Insaturation

Définition

On appelle insaturation **une double liaison ou un cycle** ; cela correspond à la perte de deux liaisons simples pour former la double liaison ou pour fermer la chaîne linéaire, le composé est dit **insaturé**.

Une liaison triple représente deux insaturations.

Détermination du nombre d'insaturations d'un hydrocarbure C_xH_y

Pour trouver le nombre d'insaturations d'un hydrocarbure à partir de sa formule brute, il faut la comparer à celle du composé équivalent **saturé** (sans insaturation) ; par exemple pour un hydrocarbure C_xH_y c'est l'alcane C_xH_{2x+2} au même nombre de carbone qui sert de référence.

Pour avoir le nombre d'insaturations, on calcule la différence entre les deux nombres d'hydrogène et on divise par 2 : $n_{\text{ins}} = \frac{2x+2-y}{2}$ où x est le nombre de carbone et y le nombre d'hydrogène.

Exemple :

le composé C_6H_{10} est à comparer à l'alcane C_6H_{14} soit $n_{\text{ins}} = \frac{(2 \times 6 + 2 - 10)}{2} = \frac{14 - 10}{2} = 2$

Détermination du nombre d'insaturations d'une molécule organique avec des hétéroatomes

Pour les hétéroatomes (atomes autre que C et H) présents dans la formule brute, il faut faire une distinction en fonction de leur valence :

- les atomes monovalents comme les halogènes (-F, -Cl, -Br, -I) comptent comme des atomes d'hydrogènes => $n(-X)$;
- les atomes divalents, comme l'oxygène, doivent être associés à un atome d'hydrogène pour former un équivalent de substituant -OH (hydroxy) => $n(-OH)$;
- les atomes trivalents, comme l'azote, doivent être associés à deux atomes d'hydrogène pour former un équivalent de substituant -NH₂ (amino) => $n(-NH_2)$;
- le nombre d'atome d'hydrogène correspond à ceux qui n'ont pas été associé à des atomes divalent ou trivalent => $n(-H)$.

On décompte enfin l'ensemble des substituants : $y = n(-H) + n(-X) + n(-OH) + n(-NH_2)$

Pour avoir le nombre d'insaturations on calcule alors : $n_{\text{ins}} = \frac{2x + 2 - y}{2}$ où x est le nombre de carbone, y le nombre de substituants.

Exemple :

le composé C₆H₁₃ClN₂O est équivalent à C₆H₈Cl(NH₂)₂(OH) soit y = 12 et on obtient :

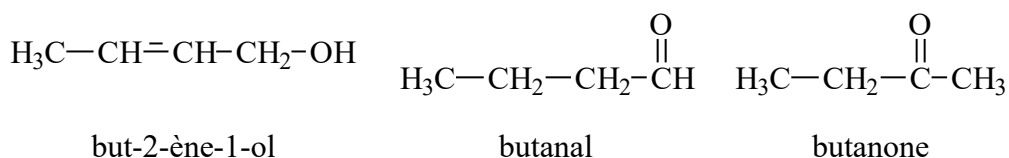
$$n_{\text{ins}} = \frac{(2 \times 6 + 2 - 12)}{2} = 1$$

Structure : la structure d'un composé organique de formule brute donnée, définit la nature et l'ordre des liaisons qui relient les atomes entre eux. On parle aussi de squelette.

Isomère : les isomères ont la même formule brute, mais ils diffèrent soit par la nature des liaisons, soit par l'ordre des liaisons, soit par la position des atomes dans l'espace.

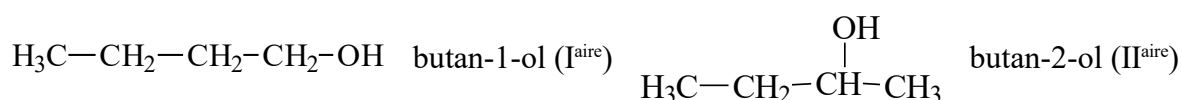
Isomère de fonction : les isomères de fonction ont la même formule brute, mais ils ont des fonctions chimiques différentes ; leurs propriétés physiques et chimiques sont différentes.

Exemple : C₄H₈O



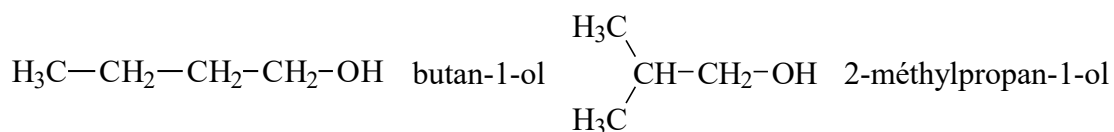
Isomère de position : les isomères de position ont la même formule brute et la même fonction chimique, mais elle est disposée de façon différente sur la chaîne carbonée ; leurs propriétés physiques et chimiques sont voisines, mais différentes.

Exemple : C₄H₁₀O



Isomère de chaîne : les isomères de chaîne ont la même formule brute et la même fonction chimique, mais leur chaîne carbonée est différente ; leurs propriétés physiques et chimiques sont voisines, mais différentes.

Exemple : $C_4H_{10}O$

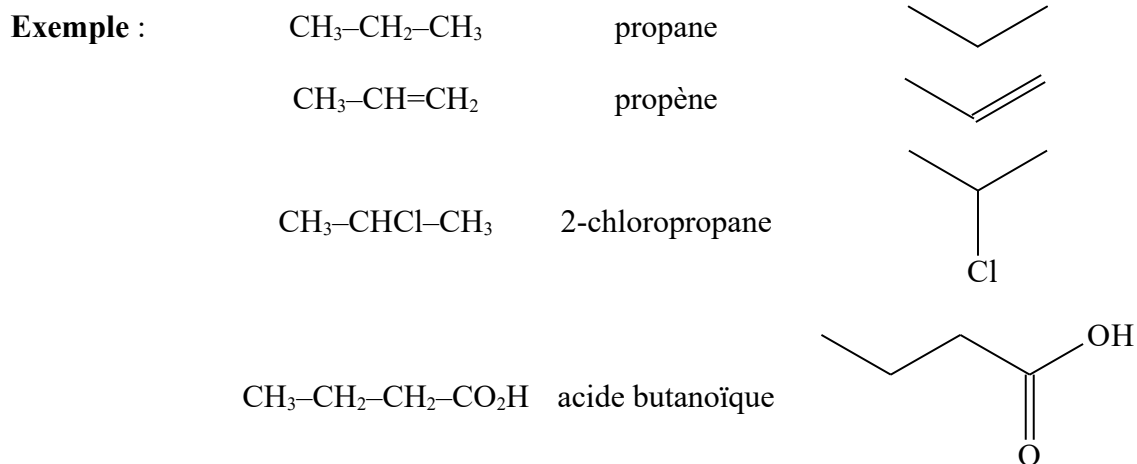


Isomère de configuration : les isomères de configuration ont la même formule développée, mais la disposition spatiale de leurs atomes est différente (sans tenir compte des rotations des liaisons simples ou des déformations des cycles).

Isomère de conformation : les isomères de conformation ont la même formule développée et la même configuration, mais la position relative de leurs liaisons, dû à des rotations des liaisons simples ou des déformations des cycles, est différente.

Formules topologiques

- On représente les liaisons C–C par des segments sans noter les symboles chimiques ;
- on indique les liaisons avec les hétéroatomes (atomes différents de C et H) ;
- on représente les liaisons multiples (= et ≡) ;
- on ne représente pas les liaisons C–H.



activité 13.2 Formules topologiques

Dessinez en formule topologique, l'ensemble des molécules prises comme exemple d'isomère.

activité 13.3 Isomérisation de chaîne

Après avoir calculé le nombre d'insaturation dessinez tous les isomères de chaînes pour :

a°) Les alcanes de formules brutes C_6H_{14} ;

b°) Les **cycloalcanes** (cycles carbonés à 5, 4 ou 3 atomes de carbone) de formules brutes C_5H_{10} .

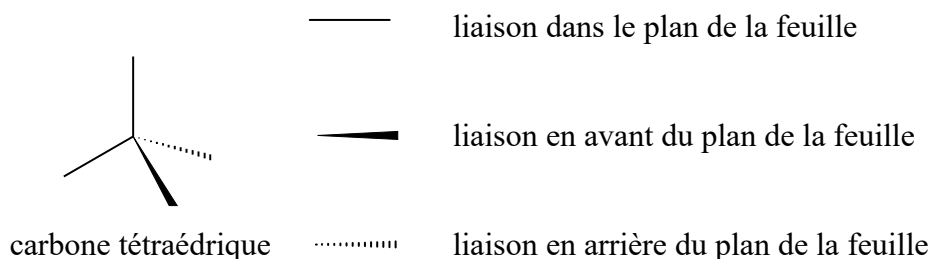
activité 13.4 Isomérisie de fonction ou de position

Après avoir calculé le nombre d'insaturation dessinez toutes les formules topologiques associées aux formules brutes :

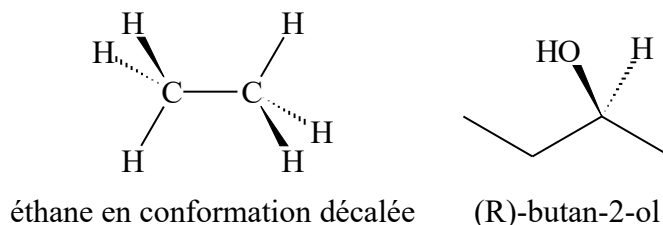
a°) $C_4H_{10}O$;

b°) C_4H_9N : **cycloalcanes uniquement** (cycles carbonés à 3 ou 4 atomes de carbone sans azote).

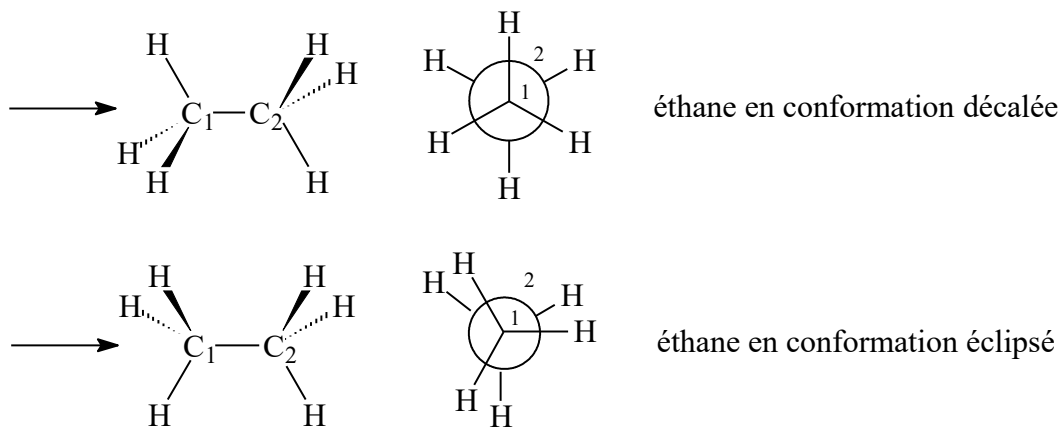
Représentation projective de CRAM



Exemples :



Représentation projective de NEWMAN (la flèche représente le sens d'observation)



activité 13.5 Projection de NEWMAN

Par rapport à laquelle de ses liaisons la molécule suivante a-t-elle été représentée selon la convention de NEWMAN ? Représentez-la en convention de CRAM.

