

Chapitre M1 : Représentation et nomenclature des molécules organiques

Table des matières

I	Représentations des molécules	2
I.1	La formule brute	2
I.2	La formule éclatée	2
I.3	La formule semi-développée	3
I.4	La formule topologique	3
I.5	La formule Cram-topologique	3
I.6	La représentation de Newman	4
II	Nomenclature des molécules organiques	5
II.1	Vocabulaire	5
II.2	Les fonctions chimiques	5
II.3	Les chaînes linéaires	7
II.4	Les groupes classiques	7
II.5	Nommer une molécule	7
II.6	Cas des cycles	8
II.7	Nommer les ions	8

Savoirs-faire

- Passer de la formule éclatée à la formule semi-développée et à la formule topologique
- Donner la représentation de Newman associée à une liaison chimique
- Identifier les fonctions chimiques usuelles
- Nommer une molécule à partir de sa formule topologique
- Donner la formule topologique à partir du nom d'une molécule

Introduction

La chimie se concentre en grande partie sur les molécules, des objets qu'il n'est pas possible d'observer directement. Il est donc important de pouvoir les représenter et les nommer afin de permettre la discussion. Il faudra savoir :

- 1) Passer d'une représentation à une autre.
- 2) A partir d'un nom dessiner une molécule.
- 3) A partir d'une molécule, donner son nom.

I Représentations des molécules

I.1 La formule brute

Définition: Formule brute

La formule brute est la donnée des atomes composants une molécule associés à leur nombre dans la molécule. Chaque atome est représenté par son symbole chimique. Le nombre de chaque atome est indiqué en indice. L'ensemble est ordonné par ordre alphabétique.

Remarques

- La formule brute ne donne que très peu d'information mais reste la formule la plus compacte.
- Il est possible d'ajouter des parenthèses afin de donner plus d'information sur la structure. Par exemple $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ au lieu de $\text{Ca}_3\text{P}_2\text{O}_8$.
- S'il y a une charge, elle est ajoutée en exposant à droite mais rien n'indique quel atome porte la charge.

Exemple

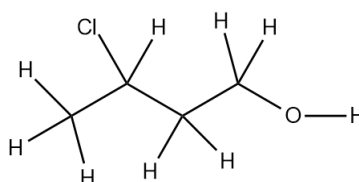
H_2O , CO_2 , C_6H_{10} , C_4H_{10} , $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$, HO^- , NH_4^+ .

I.2 La formule éclatée

Définition: Formule éclatée

La formule éclatée est la formule qui décrit les liaisons entre les atomes. Tous les atomes sont représentés par leur symbole chimique.

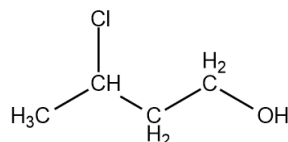
Exemple



I.3 La formule semi-développée

Définition: Formule semi-développée

La formule semi-développée est la représentation de la molécule dans laquelle les groupes d'atomes de carbone et d'hydrogènes sont regroupés chacun en une parenthèse. Les liaisons entre ces groupes sont implicitement des liaisons entre atomes de carbone.

Exemple

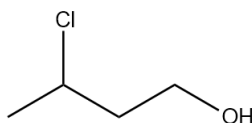
I.4 La formule topologique

Définition: Formule topologique

La formule topologique est la représentation de la molécule sous formes de traits représentant les liaisons chimiques. Deux traits consécutifs sont séparés par un angle d'environ 30°. Chaque angle signifie la présence d'un atome de carbone non représenté. Les atomes d'hydrogène sont implicitement portés par les atomes de carbone pour atteindre une valence de 4. Tout hétéroatome est représenté par son symbole chimique ou sa représentation de Lewis.

Remarques

- La formule topologique est la représentation la plus utilisée en chimie, il faut donc absolument la maîtriser.
- Lorsqu'il y a un hétéroatome, cela signifie l'absence d'atome de carbone.
- Cette représentation est particulièrement bien adaptée aux molécules organiques.
- Cette formule ne prend aucunement en compte la géométrie réelle de la molécule.

Exemple

✎ Pour s'entraîner: Exercice 3

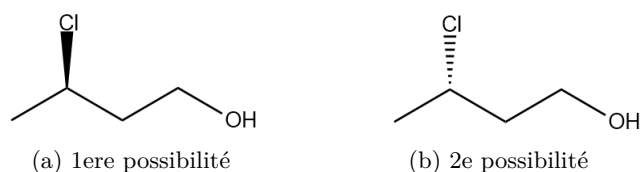
I.5 La formule Cram-topologique

Définition: Formule Cram-topologique

La formule Cram-topologique est une formule topologique dans laquelle on distingue la géométrie des molécules :

- Les liaisons dans le plan sont représentées par un trait : A—B
- Les liaisons vers l'avant du plan sont représentées par un triangle plein : A◀B
- Les liaisons vers l'arrière du plan sont représentées par des tirets : A◻B

Exemple

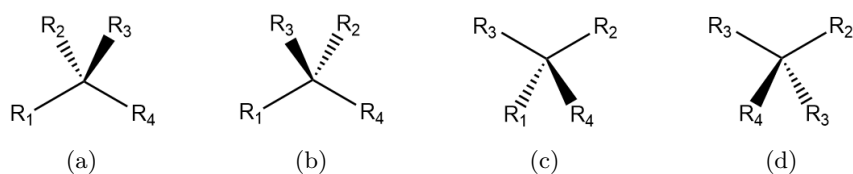


Remarque

Cette formule est faite pour donner une idée de la géométrie des molécules. Il faut en particulier respecter la géométrie tétraédrique autour des atomes de carbone possédant quatre substituants. Et plusieurs représentations apparemment différentes peuvent représenter la même molécule.

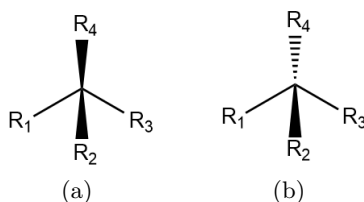
Exemple

Toutes les représentations ci-dessous sont acceptables et représentent la même molécule :



Remarque

Les représentations ci-dessous sont des horreurs à bannir ¹ :



✎ Pour s'entraîner: Exercice 3

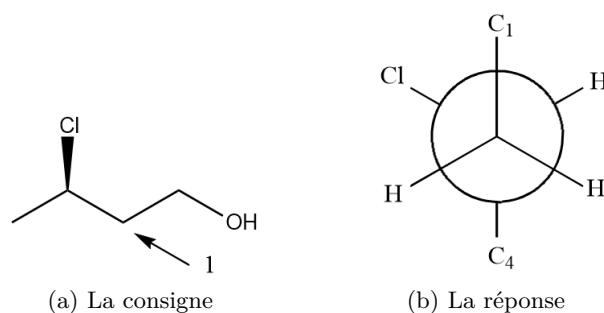
I.6 La représentation de Newman

Définition: Représentation de Newman

La représentation de Newman est la représentation des groupes situés autour d'une liaison C-C choisie vue depuis une des deux directions possibles. On dessine un (gros) cercle représentant les deux atomes de carbone alignés. Trois traits pleins jusqu'au centre du cercle, équitablement répartis, représentent les liaisons avec le carbone de l'avant. Pour les liaisons avec le carbone de l'arrière, on les représente par des traits pleins qui s'arrêtent sur le cercle du milieu. Les 6 groupes sont représentés avec la représentation voulue (formule brute, semi-développée etc...).

1. La liste est non exhaustive. L'expérience montre malheureusement votre grande imagination pour inventer des horreurs...

Exemple



✎ Pour s'entraîner: Exercice 3

II Nomenclature des molécules organiques

II.1 Vocabulaire

Définitions

- Un hétéroatome est un atome autre que le carbone et l'hydrogène.
- Une fonction chimique est un atome ou groupe d'atomes ayant des propriétés physico-chimiques particulières.
- La fonction principale est la fonction de plus grande priorité.
- La chaîne principale est la chaîne carbonée contenant la fonction principale et, en cas de ramification, la fonction secondaire de plus grande priorité.
- Une ramification est une chaîne carbonée secondaire, c'est à dire autre que la chaîne principale.

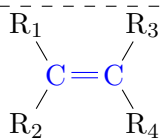
II.2 Les fonctions chimiques

Définition: Les fonctions chimiques

Fonction	Atomes	Suffixe	Préfixe	Priorité
Acide carboxylique		Acide [R+1]-oïque	X	1
Anhydride d'acide		Anhydride [R+1]-oïque [R'+1]-oïque	X	2
Ester		[R+1]-oate de [R']-yle	X	3

Halogénure d'acide ou d'acyle	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{R}-\text{C}-\text{X} \end{array}$	Halogénure de [R+1]-oyle	X	4
Amide	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{R}-\text{C}-\text{N} \begin{array}{l} \nearrow \text{R}' \\ \searrow \text{R}'' \end{array} \end{array}$	N-[R']-N-[R'']-[R+1]amide	X	5
Nitrile	$\text{R}-\text{C}\equiv\text{N}$	[R]-nitrile	-cyano-	6
Aldehyde	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{R}-\text{C}-\text{H} \end{array}$	[R+1]-al	-oxo-	7
Cetone	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{R}-\text{C}-\text{R}' \end{array}$	[R+1,R']-one	-oxo-	8
Alcool	$\text{R}-\text{OH}$	[R]-ol	-hydroxy-	9
Phénol	$\text{R}-\text{Ph}-\text{OH}$	[R]-phenol	-hydroxyphenyl-	10
Amine	$\begin{array}{c} \text{R}' \\ \nearrow \\ \text{R}-\text{N} \\ \searrow \\ \text{R}'' \end{array}$	N-[R']-N-[R'']-[R]amine	-amino-	11
Etheroxyde	$\text{R}-\text{O}-\text{R}'$	[R]-oxy-[R']	-[R]oxy-	12
Halogène	$\text{R}-\text{X}$	Halogéno-[R]	-halogéno-	13
Nitro	$\text{R}-\text{NO}_2$	Nitro-[R]	-nitro-	14
Alcyne	$\text{R}_1-\text{C}\equiv\text{C}-\text{R}_2$	-yne-	X	X

Alcène



-ène-

X

X

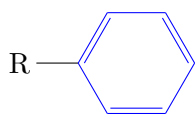
Remarque

Les fonctions alcyne et alcène ne participent pas à l'ordre de priorité et sont nommées à part.

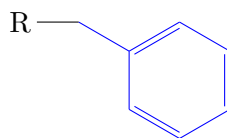
II.3 Les chaînes linéaires**Définition: Chaines linéaires**

Une chaîne linéaire est un enchainement de carbones liés par des liaisons simples. On les nomme selon le nombre de carbone comme suit :

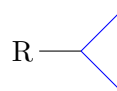
Nombre de carbone	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Suffixe	meth-	eth-	prop-	but-	pent-	hex-	hept-	oct-	non-	dec-

II.4 Les groupes classiques**Définition**

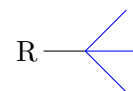
(a) Le groupe phényle -Ph



(b) Le groupe benzyle -Bn



(c) Le groupe isopropyle -iPr



(d) Le groupe tertibutyle -tBu

II.5 Nommer une molécule

Méthode: Nommer une molécule

- 1) Identifier la fonction principale d'après l'ordre de priorité. Déterminer le suffixe associé.
- 2) On identifie la chaîne principale et le suffixe associé à la chaîne carbonée.
- 3) On numérote la chaîne principale de telle sorte à placer la fonction principale avec la numérotation la plus faible. Si plusieurs choix sont possibles, on minimise la numérotation sur la fonction secondaire la plus prioritaire.
- 4) On identifie les fonctions secondaires, leur préfixe et leur numérotation.
- 5) On identifie les ramifications avec leur nom et leur numérotation. On ajoute le suffixe -yl- car c'est une ramification.

Le nom final est formé de :

- 1) La suite des préfixes de fonctions secondaires et ramifications, dans l'ordre alphabétique, avec leur position juste avant chaque préfixe.
- 2) Le suffixe de la chaîne principale.
- 3) Le suffixe -en- (si alcène), -yn- (si alcyne) ou -an- (sinon) selon la présence ou non de fonction alcène et alcyne. Préciser alors leur numérotation le cas échéant.
- 4) Le suffixe de la fonction principale, avec la position le cas échéant.

Remarques

- Quand une seule numérotation est possible, il n'est pas nécessaire de la préciser : butanone ou butanal par exemple.
- Les positions se notent avec un tiret avant et après.
- Si la position est un atome d'azote, on la note N.
- En cas de répétition d'un même groupement ou fonction, on utilise les préfixes di-, tri-, tétra-.
- En cas de ramification de ramification, on utilise des parenthèses.
- S'il est besoin de numéroter des ramifications secondaires, on ajoute une nouvelle numérotation avec des ' : 1', 2', 3'...
- **La remarque la plus importante :** Il sera toujours possible de faire des molécules aux noms absolument impossibles à trouver. On attend de vous d'être capables de nommer avec rigueur la plupart des molécules utilisées en chimie organique. Le but n'est donc pas de chercher les cas "pathologiques".

✎ Pour s'entraîner: Exercices 1 et 2

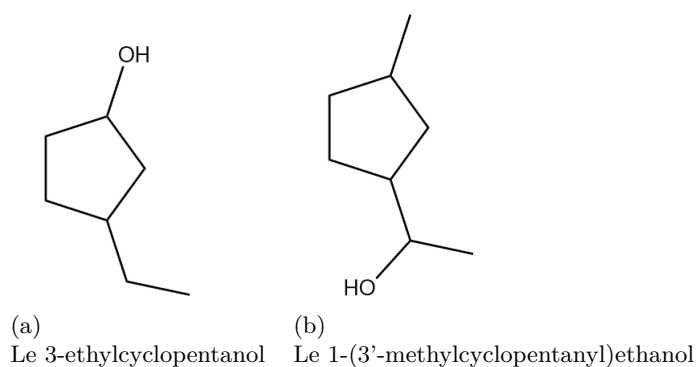
II.6 Cas des cycles**Propriétés**

- Si la fonction principale est sur le cycle, alors la chaîne principale est le cycle uniquement, sans aucun ajout ou retrait de carbone.
- Si la fonction principale n'est pas sur le cycle, alors aucun atome du cycle n'est compté dans la chaîne principale. Le cycle en entier est une ramification.

Propriété

Pour nommer un cycle, on utilise le préfixe cyclo- avant le suffixe de la chaîne.

Exemple



✎ Pour s'entraîner: Exercices 1 et 2

II.7 Nommer les ions

Les noms des ions sont des dérivés des noms des molécules. Ils possèdent une nomenclature particulière non au programme. On retiendra qu'on ajoute un suffixe selon la charge :

Ions négatifs : Suffixe en *-ate*, *-ure* ou *-ite*.

Ions positifs : Suffixe en *-ium* ou pas de suffixe du tout.

Exemple

On parle de l'ion chlorure Cl^- , de l'anion éthanolate EtO^- pour les ions négatifs. Pour les ions positifs on parle de l'ion fer II Fe^{2+} ou encore de l'ion hydroxonium H_3O^+ .