

Fiche 1 : Introduction, type de représentation, nomenclature

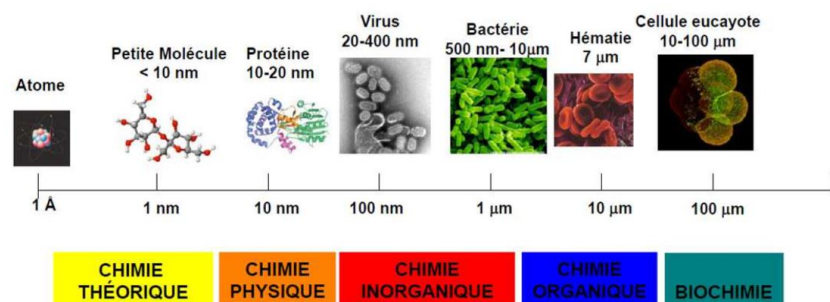
Tutorat 2018-2019

Reprends diapo1 1 à 28. Cours 1 du Professeur Azoulay.

INTRODUCTION

La Chimie, définition ?

C'est la "science de la constitution des divers corps, de leur transformation et de leurs propriétés" Petit Robert
Il existe de nombreuses sous disciplines en interaction avec les autres sciences : physique, biologie, médecine.



On est à l'échelle du nm pour les molécules et de l'angstrom pour les atomes.

Le domaine d'action de la chimie organique va commencer avec l'échelle des protéines.

Qu'est-ce que la chimie ORGANIQUE ?

- La différenciation entre substances "organiques" et "minérales" : 1690 N.Lémery
- Initialement définie comme la chimie des composés issus d'organismes vivants
- Caractéristique essentielle différenciant les composés organiques :
- Les composés organiques issus du vivant contiennent tous l'élément carbone ainsi qu'en proportions importantes: H,N,O,P,S

¹ H																	² He
³ Li	⁴ Be											⁵ B	⁶ C	⁷ N	⁸ O	⁹ F	¹⁰ Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo

■ composent 98% de la masse totale de tout organisme vivant

La chimie organique est la chimie des composés du carbone d'origine naturelle ou de synthèse.

Les molécules organiques sont des molécules du quotidien : paracétamol, vitamine C, caféine, vaniline.

La représentation correcte d'une molécule implique : la connaissance de la structure et les géométries de l'atome de carbone et la connaissance des règles spécifiques à chaque mode de représentation.

LA STRUCTURE DU CARBONE

Les différents états de l'atome de carbone et leur géométrie

Les **molécules** sont constituées par des **atomes**, eux-mêmes construits grâce à un **noyau** (fait de nucléons) ainsi que des **électrons** gravitant tout autour dans des orbitales atomiques.

Le Carbone : rappel

Nombre de masse

12

C

6

Numéro atomique



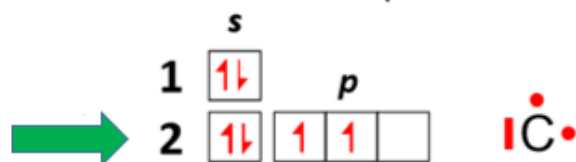
Pseudo-modèle de Bohr

Une **orbitale atomique** est une région de l'espace où la probabilité de trouver l'électron est importante.

L'atome de carbone est constitué de 6 électrons qui gravitent autour du noyau. Le numéro atomique est égal aux nombres d'électrons.

(Regardez bien les diapositives, pour la compréhension +++)

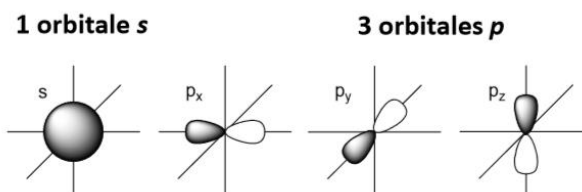
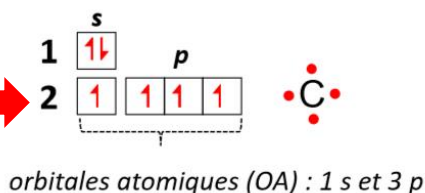
Configuration électronique à l'état fondamental : $1s^2 2s^2 2p^2$



Les petites flèches dans les cases représentent les 6 électrons qui viennent se placer selon cette configuration électronique à l'état fondamental (non-excité) du carbone qui est $1s^2 2s^2 2p^2$ (cf cours de chimie générale).

La chimie organique s'intéresse surtout aux électrons de valence (**flèche verte**) soit $2s^2 2p^2$, les couches internes nous intéressent peu car inaccessibles pour les réactions chimiques.

En théorie d'après les règles abordées en chimie générale, il y a 2 électrons sur l'orbitale 2s et 2 électrons sur l'orbitale 2p, d'où le fait que l'on obtienne un doublet non liant ainsi que deux électrons disponibles pour former des liaisons (regardez le C).

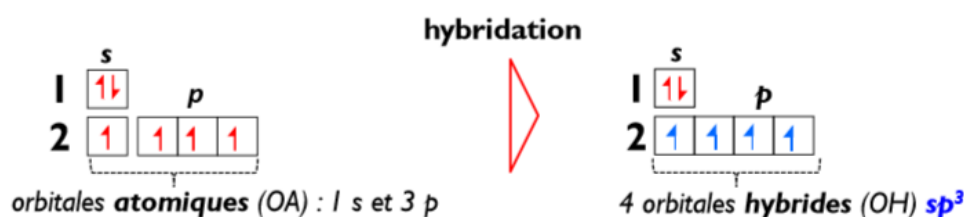


Cependant **en pratique** le carbone forme quatre liaisons d'énergie identique grâce à un passage en valence secondaire (regardez le C). Ce processus se traduit par le

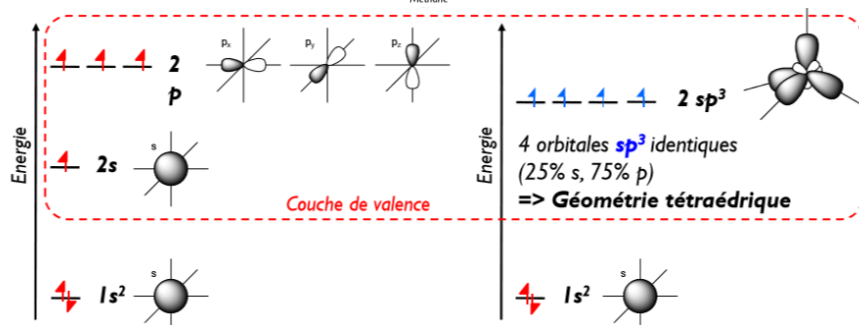
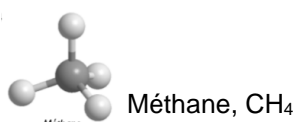
déplacement d'un des 2 électrons de l'**orbitale atomique** 2s à l'orbitale atomique 2p. (Regardez la différence entre ce que pointe la **flèche verte** et la **flèche rouge**).

Or les liaisons p et s sont d'énergie différente, il n'est donc pas possible d'avoir 3 liaisons p et 1 s. **Expérimentalement** on explique ce phénomène par la **réhybridation orbitale** : l'orbitale s et les 3 p vont fusionner pour donner des **orbitales hybrides** sp^3 , de même forme et de même énergie.

L'atome C peut avoir plusieurs états d'hybridation, cela va avoir son importance sur sa **géométrie spatiale** et sa **réactivité**. +++



Hybridation sp^3

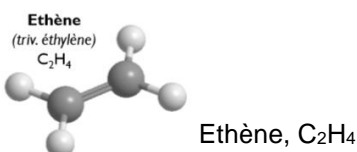


C'est l'**hybridation des alcanes**, elle est reliée à une **géométrie tétraédrique/ tétraèdre régulier ++** ($109,25^\circ$ au centre) avec une VSEPR de type **AX4**.

Elle résulte de la fusion des 3 orbitales p et de l'orbitale s et elle permet de former **4 liaisons σ (sigma)= simples ++**.

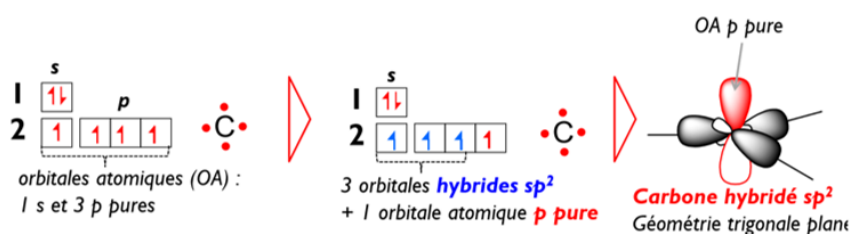
On a donc 4 **orbitales hybrides sp^3** identiques.

Hybridation sp^2



D'autres types d'hybridation sont nécessaires pour expliquer les différentes géométries observées dans les molécules organiques.

C'est l'**hybridation des alcènes**, elle est reliée à une **géométrie trigonale plane ++** (avec un angle au centre 120°) avec un groupe VSEPR **AX3**. La molécule est complètement **plate** avec cette hybridation ++. Nécessite **3 directions indifférenciées**. Elle permet de former **2 liaisons σ (sigma)= simples et 1 liaison double ++**.

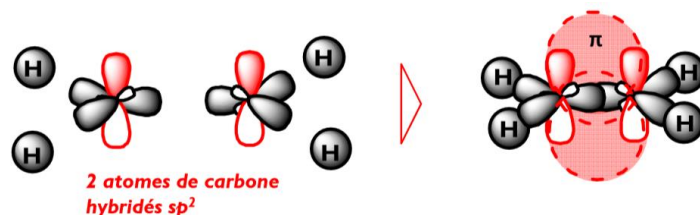


Elle résulte de la fusion de l'orbitale s avec 2 orbitales p, pour faire 3 orbitales **hybrides sp^2** .
-> ce qui forme 3 liaisons σ (sigma)

Ce qui laisse 1 orbitale **atomique p pure**.
-> 1 liaison π , servira dans la formation de double liaison

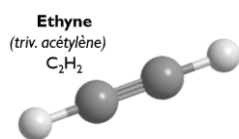
La liaison π va pouvoir former une double liaison par recouvrement latéral sur une liaison σ .

Pour une **double liaison** on a besoin d'une liaison σ (composé de 2 OH sp^2) et du recouvrement latéral par un système π (composé de 2 OA p pures).



La **double liaison** résulte de la somme de :

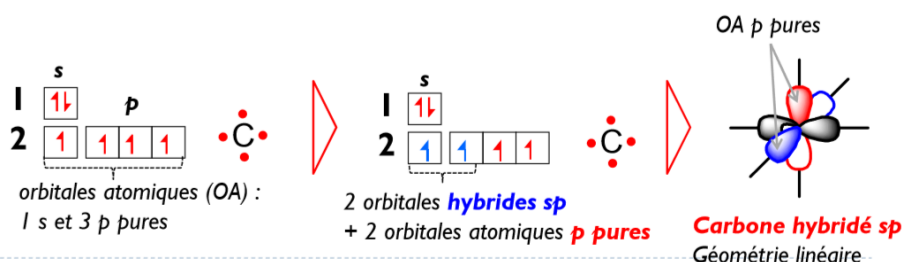
- 1 **liaison simple (s)** par recouvrement de 2 OH sp^2
- 1 **système π** par recouvrement latéral des 2 OA p pures



Ethyne, C_2H_2

Hybridation sp

C'est l'**hybridation des alcynes**, elle est reliée à une **géométrie linéaire++** avec un groupe VSEPR de type **AX2**. Nécessite 2 directions indifférenciées. Elle permet de former 1 liaisons σ (sigma)= simples et 1 liaison triple ++.

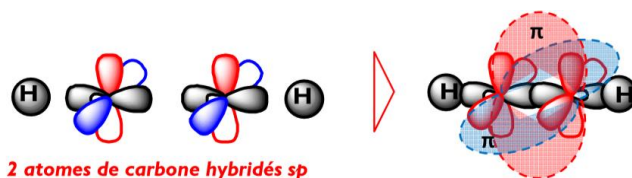


Elle résulte de la fusion de l'orbitale s avec 1 orbitale p, pour faire 2 orbitales **hybrides sp**. Ce qui forme 2 liaisons σ (sigma).

Ce qui laisse 2 orbitales **atomiques p pures**, capables de former des systèmes π .

Une triple liaison est donc formée d'1 liaison simple σ et de 2 systèmes π .

Attention les liaisons π et σ ne sont pas du tout équivalentes entre elles, ni en forme, ni en énergie, ni en propriétés ++

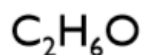


La **liaison triple** résulte de la somme de :

- 1 **liaison simple (s)** par recouvrement de 2 OH sp
- 2 **systèmes π** par recouvrement latéral de 2 paires d'OA p pures

Ces hybridations vont nous suivre tout au long du cours ; stéréochimies absolues ($C sp^3$) ou relatives ($C sp^2$).

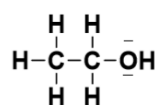
LES DIFFÉRENTS TYPES DE REPRÉSENTATION, exemple l'éthanol



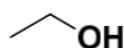
La **formule brute** : elle donne la composition élémentaire



La **formule semi-développée** : elle fait apparaître le squelette carboné et les fonctions chimiques



La **formule développée plane** : elle fait apparaître toutes les liaisons et on peut matérialiser les doublets non liants (= représentation de Lewis)



La **formule topologique** : le squelette carboné apparaît sous forme d'une ligne brisée, et seules les fonctions et les liaisons hydrogènes (=liaisons H) fonctionnelles sont matérialisés.

LA NOMENCLATURE

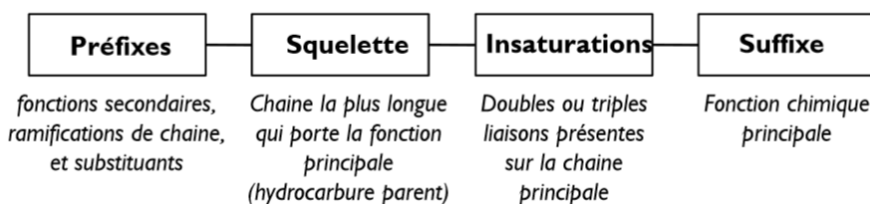


La nomenclature chimique donne un **nom rationnel** aux molécules. La **nomenclature des composés organiques** obéit à des règles qui permettent aux chimistes de nommer sans ambiguïté toute molécule. Elle est édictée et mise à jour périodiquement par l'**IUPAC** (International Union of Pure and Applied Chemistry) dans un souci d'améliorer la communication entre chimistes..

Il faut savoir nommer une molécule et dessiner une molécule selon la nomenclature.

Pour établir le nom d'une molécule, il faut :

1. Déterminer les **fonctions chimiques** et en déduire la fonction principale qui deviendra le suffixe de la molécule
2. Déterminer le squelette carboné, ses insaturations et ses ramifications
3. **Numéroter** fonctions chimiques secondaires, insaturations, substituants avec les **indices les plus petits possibles** (les classer selon l'ordre alphabétique et pas les indices)
4. On place les insaturations entre l'hydrure parent et le suffixe en remplaçant -an- par -en- ou -yn-
5. Etablir le nom final selon le schéma suivant en donnant les préfixes dans l'ordre alphabétique



Les fonctions chimiques

Fonction chimique (=groupe fonctionnel) : un ensemble de propriétés portées par un atome ou un groupe structuré d'atomes (acide, base..).

Classe	Formule	Préfixe	Suffixe
Acides carboxyliques	$\text{R}-\text{COOH}$	Carboxy-	Acide ...oïque Acide ...carboxylique
Acides sulfoniques	$\text{R}-\text{SO}_3\text{H}$	Sulfo-	Acide ...sulfonique
Sels d'acides	$\text{R}-\text{COO}^-\text{M}^+$	-	...oate de métal ...carboxylate de métal
Anhydrides d'acides	$\text{R}-\text{CO}-\text{O}-\text{CO}-\text{R}$	-	Anhydride ...oïque
Esters	$\text{R}-\text{CO}-\text{OR}'$	Alkoxy-carbonyl-	...oate d'alkyle ...carboxylate d'alkyle
Halogénures d'acyle	$\text{R}-\text{CO}-\text{X}$	Halogénocarbonyl-	Halogénure de ...oyle Halogénures de ...carbonyle
Amides	$\text{R}-\text{CONH}_2$ $\text{R}-\text{CONH}-\text{R}$ $\text{R}-\text{CON}(\text{R})_2$	Carbamoyl-	...amide ...carboxamide
Nitriles	$\text{R}-\text{C}\equiv\text{N}$	Cyano-	...nitrile ...carbonitrile
Aldéhydes (Thio-)	$\text{R}-\text{CHO}$	Formyl- ou Oxo-	-al ...carboxaldéhyde
Cétones (Thio-)	$\text{R}-\text{CO}-\text{R}'$	Oxo-	-one (-thione)
Alcools	$\text{R}-\text{OH}$	Hydroxy-	-ol
Phénols		Hydroxy-	-ol
Thiols	$\text{R}-\text{SH}$	Sulfanyl-	-thiol
Amines	$\text{R}-\text{NH}_2$ $\text{R}-\text{NH}-\text{R}'$ $\text{R}-\text{N}(\text{R}')_2$	Amino-	-amine (chaînes 2 ^{aires} en préfixes) : N-alkyl-
Imines	$\text{R}_2\text{C}=\text{NR}'$	Imino-	-imine
Ethers - (ép)oxydes	$\text{R}-\text{O}-\text{R}'$	Alkoxy- Époxy-	Éther (oxyde) de R et de R'
Sulfures (épi-)	$\text{R}-\text{S}-\text{R}'$	Alkylthio- (épi-thio-)	Sulfure de R et de R'
(Hydro)péroxydes	$\text{R}-\text{OOR}'$ $\text{R}-\text{OOH}$	(Hydro)péroxy-	(Hydro)péroxyde de R et de R'

Tableau à connaître +++

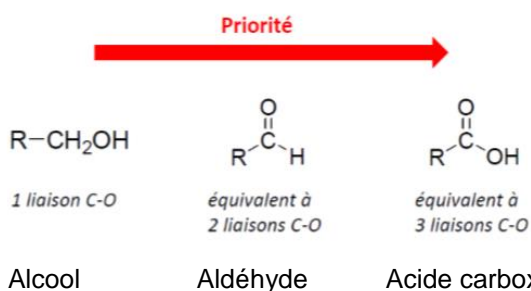
Les fonctions encadrées sont à connaître impérativement et à savoir nommer la molécule qui la porte.

La flèche rouge indique les fonctions du moins ou plus prioritaire.

Les halogènes sont toujours des substituants.

Les acides, esters et amides sont toujours en position 1 quand ils sont la fonction prioritaire de la molécule, parce qu'ils sont toujours en position terminale.




La classification des fonctions chimiques






Plus la fonction est oxygénée, plus elle est prioritaire. On peut relier cette règle empirique à l'état d'oxygénation du carbone voire à son hybridation $sp > sp^2 > sp^3$.

Les hydrocarbures

Ils sont importants à connaître car l'hydrocarbure parent va servir à nommer la chaîne principale d'une molécule. Quand la formule brute correspond à C_nH_{2n+2} on parle d'**hydrocarbure saturé** ou **alcane**.

Hydrocarbure	Formule	Préfixe
Méthane	CH_3-	Méthyl-
Ethane	CH_3CH_2-	Ethyl-
Propane		Propyl-
Butane		Butyl-
Pentane		Pentyl-
Hexane	C_6	hexyl-

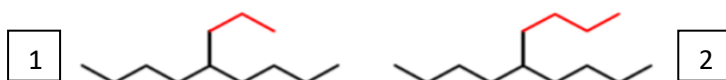
Hydrocarbure	Formule	Préfixe
Heptane	C_7	Heptyl-
Octane	C_8	Octyl-
Nonane	C_9	Nonyl-
Cyclohexane		Cyclohexyl-
Benzène		Phényl-
Naphatène		Naphtyl-

Ce tableau aussi ++

Molécule 1 est du 5-propylnonan
On a une chaîne carbonée de 9C substituée au 5ème C par un akyle de 3C.

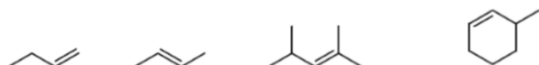
Molécule 2 est du 5-butylnonan
On a une chaîne carbonée de 9C substituée au 5ème C par un akyle de 4C.

La ramification de chaîne (ou radical alkyl)



Les insaturations alcènes et alcynes

Double liaison entre 2 atomes de carbone ⇒ **alcène**

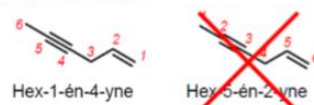


Triple liaison entre 2 atomes de carbone ⇒ **alcyne**



Les insaturations correspondent aux doubles ou triples liaisons rencontrées dans le squelette carboné de la molécule. Une double liaison est un alcène, une triple un alcyne. On mettra alors respectivement -èn- ou -yn- entre le nom de la chaîne carbonée et le suffixe.

La **double liaison est prioritaire** sur la triple liaison !

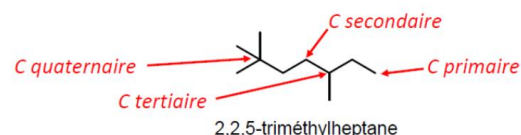


Attention en cas de double et triple liaison, il faut donner le plus petit numéro à la double liaison, même si le nom final de la molécule fini bien par -en yn

Le vocabulaire associé à la nomenclature

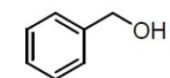
Classe du C :

- Un C est dit **nullaire** s'il n'est lié à aucun groupement alkyle (ex: méthane)
- Un C est dit **primaire** s'il est lié à un autre groupement alkyle
- Un C est dit **secondaire** s'il est lié à deux autres groupements alkyles
- Un C est dit **terciaire** s'il est lié à trois autres groupements alkyles

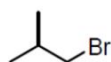


Idem pour les amines : sa classe est fonction du nombre d'alkyles qui lui sont accrochés (ex: substitué par un alkyle, on a une amine primaire)

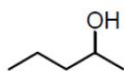
Halogènes et alcools : leur classe correspond à la classe du C qui les porte (un alcool primaire sera porté par un C primaire)



alcool benzylique*



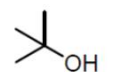
1-bromo-2-méthylpropane

Alcool/halogénure
primaire

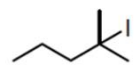
butan-2-ol



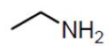
2-chloropropane

Alcool/halogénure
secondaire

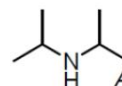
terbutanol*



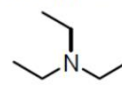
2-iodo-2-méthylpentane

Alcool/halogénure
tertiaire

éthanamine

Amine *primaire*

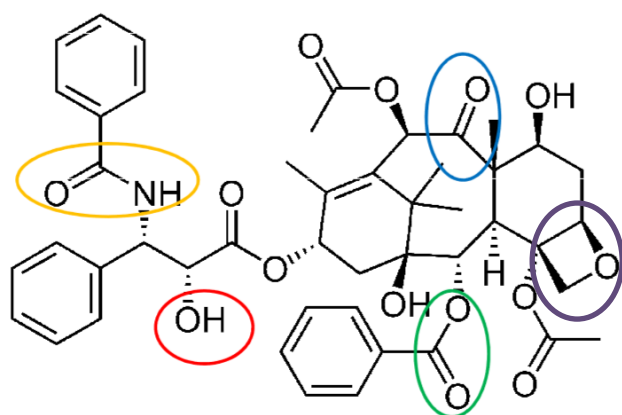
diisopropylamine*

Amine *secondaire*

Triéthylamine*

Amine *tertiaire*

Savoir identifier les fonctions



Fonction jaune : AMIDE

Fonction rouge : ALCOOL

Fonction bleue : CETONE

Fonction verte : ESTER

Fonction violette : ETHER

(Désolée pour les daltoniens.. ;)

Taxol (paclitaxel)
anticancéreux

Dernière petite question pour la route ! Comment se prénomme cette molécule ?



Et bien c'est un cyclopentane ! Faut pas se laisser distraire par la belle brune