

# COURS 1 & 2 – INTRODUCTION À LA CHIMIE ORGANIQUE



## ~ Introduction

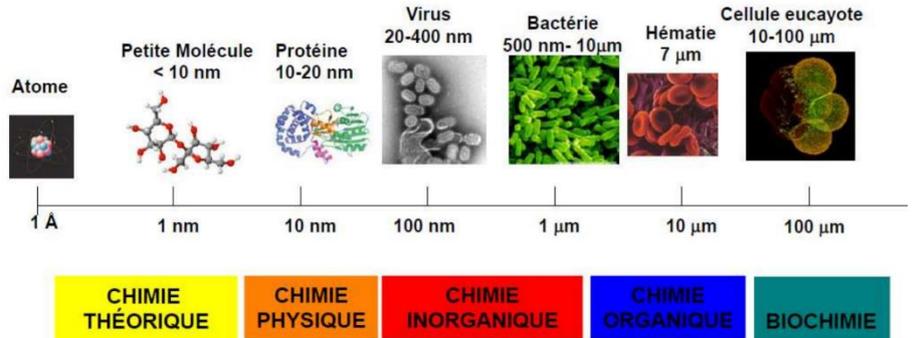
Définition de la chimie dans le Petit Robert : « **Science de la constitution des divers corps, de leur transformation et de leurs propriétés** ».

Ainsi, la chimie s'intéresse à la constitution/structure de la matière, à sa propriété et à sa réactivité.

Lorsqu'on regarde un peu plus en détail sur une échelle de dimensions, les molécules sont en bas de l'échelle de l'étude des structures, (de l'ordre du nanomètre). On est donc sur **des échelles très basses**, pour arriver à l'échelle de l'atome, (l'Angström).

→ La chimie peut être répartie en différentes disciplines : chimie **théorique**, chimie **physique**, chimie **inorganique**, chimie **organique**, **biochimie** (à l'interface avec les sciences de la vie).

→ Elle travaille en étroite collaboration avec de nombreuses autres disciplines : **physique, biologie, médecine, etc.**



**Précision sur la chimie organique maintenant** : elle a été introduite dans les années **1690** par Nicolas Lémery qui était le pharmacien du roi Louis XVI, qui a établi une différenciation entre substances organiques et minérales.

La chimie organique était celle des **composés issus d'organismes vivants** (≠ matière inorganique et métaux).

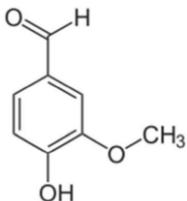
<sup>1</sup> H																	<sup>3</sup> He
<sup>3</sup> Li	<sup>4</sup> Be											<sup>5</sup> B	<sup>6</sup> C	<sup>7</sup> N	<sup>8</sup> O	<sup>9</sup> F	<sup>10</sup> Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	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

Petit à petit, cette définition s'est affinée et on s'est aperçu que les composés organiques (=issus du monde vivant) contenaient tous des **atomes de carbone**, ainsi que, les atomes **d'hydrogène (H)**, **d'azote (N)** **d'oxygène (O)**, **de phosphore (P)** et **de soufre (S)** en proportions importantes.

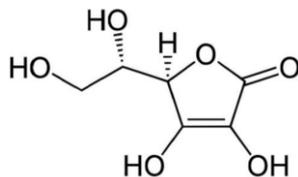
Tous ces atomes composent **98% de la masse totale de tout organisme vivant**. C'est pourquoi lorsqu'on parle de chimie organique, on parle très souvent de la **chimie du carbone** (et toute sa réactivité).

Les molécules organiques que nous allons étudier se retrouvent dans tous les secteurs de notre vie quotidienne : médicaments, molécules ingérées, molécules retrouvées dans des plantes, etc. Elles ont donc un **domaine d'utilisation très vaste**.

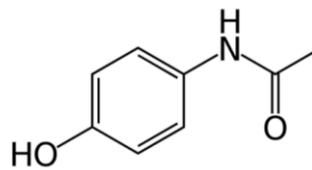
### Exemples de molécules organiques :



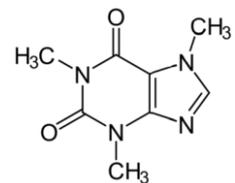
Vanilline (arôme le plus vendu au monde)



Vitamine C



Paracétamol

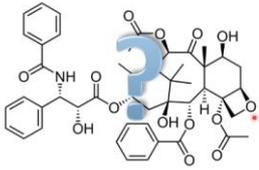


Caféine

### En biologie :

→ Les **protéines** sont composées de séquences peptidiques, elles-mêmes composées d'acides aminés qui sont des petites molécules organiques.

→ Les chromosomes, structure essentielle à la vie, sont composés d'**ADN**, lui-même composé de petites bases qui sont des molécules organiques.



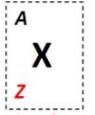
Il est essentiel de savoir représenter correctement une molécule. Mais pour ça, il est important de connaître leur **structure**, leur **géométrie** et les **règles spécifiques à chaque mode de représentation** pour mieux appréhender par la suite la structure et la propriété de ces molécules.

## A- Structure de l'atome

Les éléments du tableau périodique sont caractérisés par deux nombres principaux :

- Le **nombre de masse A**
- Le **numéro atomique Z**, qui permet de classer les éléments dans le tableau périodique

Nombre de masse



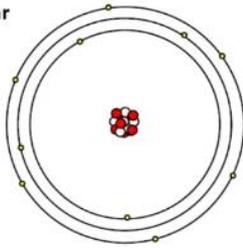
Numéro atomique

Le **numéro atomique définit l'élément**.

Le nombre de masse, lui, est la **somme du numéro atomique (Z) et du nombre de neutrons (N)** →  $A = Z + N$

Pseudo-modèle de Bohr

- Neutron n
- Proton p
- Electron e



Dans une représentation très simplifiée d'un atome (pseudo-modèle de Bohr), on voit qu'un atome est constitué d'un **noyau, lui-même constitué de neutrons et de protons, autour duquel vont graviter les électrons**.

Les électrons (chargés -) sont 1000 fois plus légers que les protons (chargés +) ou les neutrons (non chargés).

⇒ **L'essentiel de la masse se trouve dans le noyau.**

Dans un atome, l'électron va être défini par une **combinaison de 4 nombres quantiques : n, l, m et s +++** (les 3 premiers étant **toujours des entiers**).

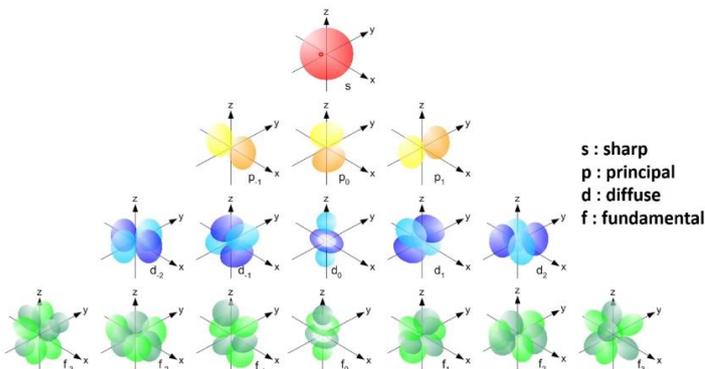
- **Le nombre n ou nombre quantique principal** : il va définir la période de l'élément. Il adopte des **valeurs entières de 1 à 10** (en vrai ça peut aller jusqu'à l'infini théoriquement mais bon le prof dit 10 parce qu'on ira jamais plus haut que 10)
- **Le nombre l ou nombre quantique secondaire** : il va définir le type d'orbitale, sa forme, il adopte lui aussi des **valeurs entières qui vont de 0 à n-1**
- **Le nombre m ou nombre quantique magnétique** : il adopte des **valeurs allant de -l à +l, toujours en nombres entiers**
- **Le nombre s ou nombre quantique de spin** : il va décrire le sens de rotation des électrons et adopter **deux valeurs non entières, +1/2 ou -1/2**.

### Récap' :

Nbre quantique	Concepts associés			Valeur
n	Couche	Période	Energie	n=1, 2, 3...etc
l	Sous-couche	Type d'orbitale	Forme	$0 \leq l \leq n-1$
m	Case quantique	Orbitale	Direction	$-l \leq m \leq +l$
s	spin	Sens de rotation		$\pm 1/2$

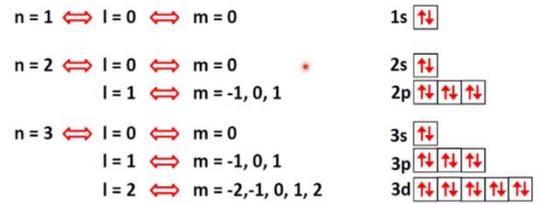
Les différents nombres quantiques vont permettre de définir des **orbitales atomiques (=zone dans laquelle on a une probabilité de présence des électrons qui est non nulle)** dans lesquelles se retrouvent les électrons.

La forme et la direction des orbitales permet de **minimiser les répulsions entre les électrons** de même énergie. Ainsi, les électrons ne gravitent pas autour du noyau de façon circulaire mais se retrouvent dans une surface avec des formes différentes.



Comme on l'a vu, un électron est défini par une combinaison de **4 nombres quantiques : n, l, m et s.**

- Ainsi, pour **n = 1**, nous n'avons **qu'une possibilité** : l = 0 et m = 0.
- En revanche, pour **n = 2** par exemple, **l peut prendre la valeur 0 ou la valeur 1, et donc m pourra prendre trois valeurs : -1, 0 et 1.**
- Et ainsi de suite, comme décrit dans le diagramme ci-contre.



Nous allons donc pouvoir **caractériser chaque électron de l'atome** grâce à ces nombres.

→ Dans le tableau périodique, les éléments sont rangés par leur numéro atomique mais qu'ils sont aussi regroupés en fonction de leur **structure électronique**. On peut donc distinguer un bloc s, un bloc p, un bloc d et un bloc f qui correspondent au **remplissage des couches électroniques** de ces éléments.

→ Cette structure électronique des éléments va être responsable des **propriétés des atomes** et va permettre de les classer **par familles**. (Exemple : la famille des alcalino-terreux qui vont partager la même structure électronique sur leur couche de valence)

## B- Comment appréhender la structure de ces atomes ?

Elle obéit à quelques règles essentielles : +++++

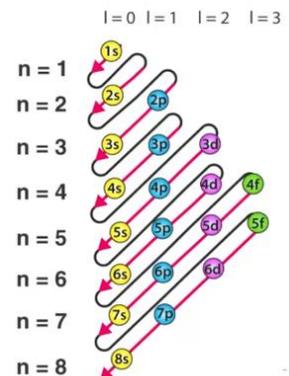
### 1. Principe d'exclusion de Pauli : « Dans un atome, deux électrons ne peuvent posséder les quatre mêmes nombres quantiques »

Cela signifie que les électrons vont se répartir dans l'ensemble des cases mais ils vont aussi se disposer de telle sorte à ce qu'ils n'aient pas tous les mêmes nombres. (On le verra en exemple par la suite)

### 2. Règle de Hund : « Les électrons se placent à raison de un par case quantique avant de s'apparier en doublet »

### 3. Remplissage des orbitales selon Klechkowski (n + l minimal)

Si l'on regarde la structuration et la disposition des orbitales, nous allons voir que pour disposer les électrons en fonction du niveau du tableau périodique (1, 2, 3, 4, 5, 6 et 7), et des types d'orbitales rencontrés (s, p, d et f), nous allons devoir **suivre ce mode de remplissage où l'on cherche toujours à remplir les cases selon le diagramme ci-contre : on remplira toujours l'orbitale 1s d'abord, suivie de l'orbitale 2s, puis 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, etc...**



### Exemple 1 : L'azote

A = 14 et Z = 7.

Nombre d'électrons à répartir : 7

Méthode pour les répartir : Les deux premiers électrons vont se répartir dans l'orbitale 1s, puis les deux suivants dans l'orbitale 2p, les 3 derniers seront répartis seul à seul dans chacune des 3 cases de l'orbitale 2p (règle de Hund).

⚠ On a bien dit que **chaque électron ne peut pas avoir les 4 mêmes nombres quantiques**. Lorsque deux électrons sont dans la même case, ils ont les mêmes nombres n, l et m, mais des nombres de spin (s) différents qui sont de  $+\frac{1}{2}$  ou  $-\frac{1}{2}$  !

On obtient la disposition suivante :



**Écriture** :  $1s^2 2s^2 2p^3$  (= 2 électrons dans l'orbitale 1s, 2 électrons dans l'orbitale 2s et 3 électrons dans l'orbitale 2p). Ce qui nous intéresse en chimie organique, c'est la **couche dite de valence ou couche extérieure**. C'est la **couche la plus externe ++** des électrons (≠ des couches de cœur qui ne réagissent pas et présentent moins d'intérêt en chimie organique).

**NB** : la couche externe correspond à la ligne avec le plus grand numéro, ici c'est la deuxième ligne pour l'azote.

On peut représenter cette couche externe de façon schématique, c'est ce qu'on appelle le modèle de Lewis.

### Modèle de Lewis

Dans notre atome d'azote, on a 3 électrons non appariés, c'est-à-dire qu'ils sont seuls dans chacune des cases orbitales. On a aussi deux électrons appariés formant un doublet. **On matérialise les doublets par des traits et les électrons célibataires par des points.**

Nous avons donc ici la représentation selon Lewis de l'atome d'azote. →  $\cdot \bar{\text{N}} \cdot$

⚠ Elle ne représente bien que la couche externe !

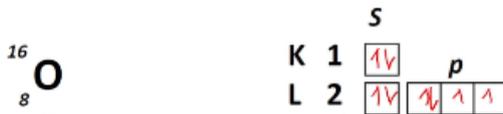
### Exemple 2 : L'oxygène

**A = 16** et **Z = 8**.

**Nombre d'électrons à répartir** : 8

**Méthode** : d'abord on met les deux premiers dans l'orbitale 1s, les deux suivants dans l'orbitale 2s. On remplit ensuite notre orbitale 2p avec les 4 électrons restants. Les 3 premiers électrons se répartissent d'abord dans chacune des cases, et le dernier va s'apparier avec l'un des électrons déjà présents.

On obtient donc ceci :



**Écriture** :  $1s^2 2s^2 2p^4$

**Modèle de Lewis** :  $|\bar{\text{O}} \cdot$

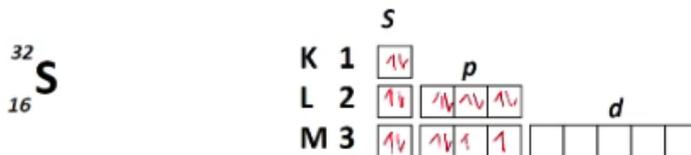
### Exemple 3 : Le soufre

**A = 32** et **Z = 16**.

**Nombre d'électrons à répartir** : 16

**Méthode** : Deux électrons dans la case 1s, deux dans la case 2s, puis 6 dans les 3 cases de l'orbitale 2p. Ensuite, deux dans l'orbitale 3s car c'est celle qui vient après l'orbitale 2p. Il reste maintenant 4 électrons : on en met d'abord un dans chaque case de l'orbitale 3p, puis on apparie le dernier avec l'un des trois précédents.

On se retrouve avec ce schéma-là :



**Écriture** :  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$ .

**Modèle de Lewis** :  $|\bar{\text{S}} \cdot$

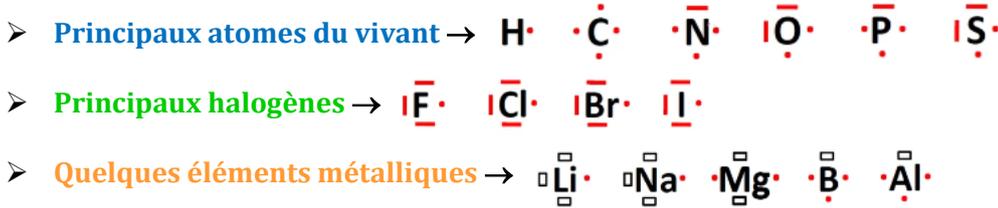
**NB** : Ici, la couche de valence correspond au **niveau 3**, et les couches de cœur aux niveaux 1 et 2 !

⚠ **Particularité de l'atome de soufre** : On voit sur le schéma ci-dessus qu'il possède des orbitales « d » vacantes. Elles permettront de faire des **valences supérieures** que nous verrons plus tard.

Le soufre a la même représentation de Lewis que l'oxygène. C'est logique, car **ils sont sur la même colonne du tableau périodique** !

⇒ **Tous les éléments d'une même colonne vont partager la même couche de valence ++**

Représentations des principaux éléments :



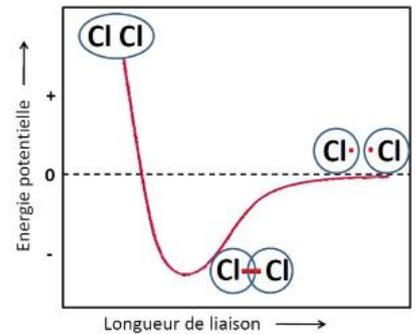
(Les petits rectangles sur les métaux correspondent à des cases vacantes qui représentent des orbitales inoccupées !)

Nous allons voir maintenant comment ces atomes **s'apparient pour former des molécules** grâce à leurs électrons de la couche de valence.

### C- Formation des liaisons

Lorsque l'on a 2 atomes célibataires, ils vont potentiellement se rapprocher pour partager et **mettre en commun leurs électrons afin de stabiliser la structure électronique** et d'obtenir une **couche de valence complète**, beaucoup plus stable.

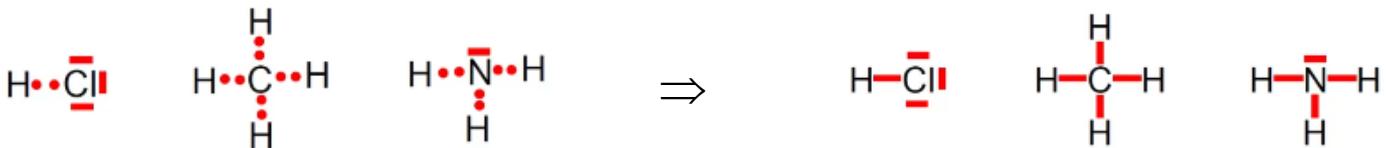
**Liaison** : mise en commun des électrons de valence de deux atomes et **compromis entre forces de répulsion et d'attraction**. **Distance idéale** où l'édifice moléculaire est énergétiquement stabilisé, ce qui correspond à la valeur de la longueur de la liaison (en **Angström Å**)



#### ⇒ Comment ces atomes vont s'apparier entre eux ?

Ils vont mettre en commun leurs électrons célibataires et il y aura **autant de liaisons qu'il y a d'électrons célibataires ++**

- **Exemple 1** : si on regarde la combinaison entre un atome d'hydrogène et un atome de chlore, on va former la molécule HCl, avec une seule liaison qui correspond à la mise en commun de l'unique électron célibataire de chaque atome.
- **Exemple 2** : le carbone, ayant 4 électrons célibataires, pourra se lier à 4 atomes différents et former 4 liaisons.

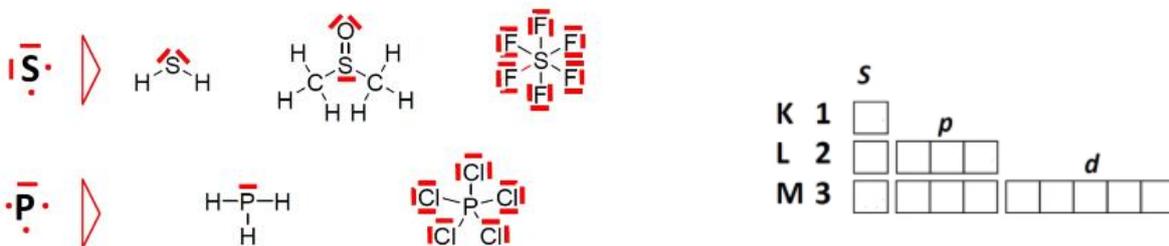


Cette mise en commun d'électrons va permettre à chaque atome (dont le numéro atomique est supérieur à 4) d'atteindre une **couche de valence complète** qui va correspondre à **8 électrons sur la couche périphérique**.

C'est ce qu'on appelle **la règle de l'octet** = les atomes caractérisés par **Z > 4** tendent à posséder **8 électrons sur leur couche périphérique afin d'acquérir un état stable**.

La règle de l'octet est partagée par un grand nombre d'atomes mais **elle n'est pas toujours vraie** : certains atomes ne la respectent pas obligatoirement → **phénomène d'hypervalence ++** où ils vont avoir sur leur couche de valence un nombre d'électrons largement **supérieur à 8**.

Ce phénomène est rendu possible par le fait que certains atomes (exemples : soufre ou phosphore) sont des éléments de la **3<sup>e</sup> période** et possèdent des **orbitales « d » vacantes**. Celles-ci leur permettent de faire un nombre de liaisons supérieur à ceux de la 2<sup>e</sup> période qui ne peuvent faire au maximum que 4 liaisons.



Si on regarde le soufre (cf. page précédente), il **peut respecter la règle de l'octet** et faire 4 liaisons, mais il peut aussi faire un nombre de liaisons plus important en utilisant les orbitales « d » vacantes. Par exemple, sur la molécule du milieu, il fait 4 liaisons et possède un doublet non-liant, ce qui lui fait un total de **10 électrons** sur sa couche de valence. Sur la molécule la plus à droite, l'atome fait 6 liaisons, ce qui fait un total de **12 électrons** sur sa couche de valence.

## D- Géométrie spatiale : méthode VSEPR

Les molécules qu'on a vu et représenté jusqu'à présent sous forme plane, sont en réalité des **édifices tridimensionnels ++** c'est-à-dire qu'elles adoptent dans l'espace **une structure en 3D bien particulière**.

Plusieurs modèles existent pour expliquer et représenter la structure des molécules dans l'espace. L'un des plus célèbres est ce que l'on appelle la **théorie VSEPR ++** (= « Valence Shell Electron Pair Repulsion »).

Cette théorie, développée par Ronald J. Gillespie, explique la structure tridimensionnelle optimale pour pouvoir avoir le **minimum d'énergie** et donc le minimum d'interactions sur la base d'une **minimisation des répulsions électroniques des atomes sur la couche de valence**.

Cette méthode va chercher à associer la structure tridimensionnelle qui permettra de limiter au maximum la répulsion entre **tous les électrons** autour d'un atome. Elle prend donc en compte les **liaisons** de l'atome mais aussi les **doublets non-liants**, qui vont être considérés comme des électrons pouvant interférer avec ceux des liaisons.

La géométrie spatiale de ces molécules est décrite selon le système **AX<sub>m</sub>E<sub>n</sub>** :

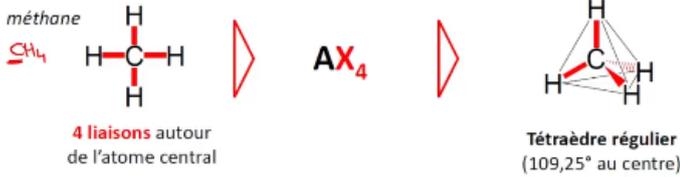
- **A est l'atome central** dont on veut connaître la géométrie
- **m est le nombre d'atomes impliqués dans une liaison** avec l'atome central
- **n est le nombre de doublets non-liants**

→ **Chaque combinaison de m et n définira une structure tridimensionnelle** qui minimisera l'énergie. Ces structures sont résumées dans le tableau suivant :

m + n	0 doublet non-liant (n=0)		1 doublet non-liant (n=1)		2 doublets non-liants (n=2)		3 doublets non-liants (n=3)		4 doublets non-liants (n=4)	
2										
3										
4										
5										
6										

**Exemples :**

**1) Méthane (CH<sub>4</sub>)**



Si on considère le carbone comme atome central, on voit qu'il fait **4 liaisons**, on a une structure de type **AX<sub>4</sub>** et elle correspond à un **tétraèdre régulier** où le carbone est au centre du tétraèdre et les atomes sont situés aux points. On a un angle de **109,25°** entre les liaisons. (le prof dit parfois 109,25 et parfois 109, c'est pareil)

**2) Dioxyde de carbone (CO<sub>2</sub>)**

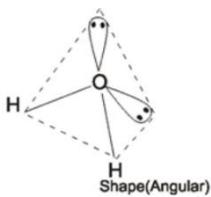
On s'intéresse toujours à l'atome de carbone comme atome central. Cette molécule va avoir une structure de type **AX<sub>2</sub>**, c'est-à-dire que le carbone a uniquement **2 atomes dans sa périphérie**.



Elle correspond à une structure **linéaire** (et donc **plane**++) qui se représente ainsi :



**3) Eau (H<sub>2</sub>O)**



Il s'agit d'une molécule simple et essentielle à la vie. Cette fois-ci on va s'intéresser non plus au carbone mais à l'oxygène. Autour de cet oxygène il va y avoir **2 atomes d'hydrogène qui forment des liaisons**, par contre il ne faut pas oublier que l'oxygène possède **deux doublets non-liants**, et donc on aura une formule de type **AX<sub>2</sub>E<sub>2</sub>**. Si on se réfère au tableau précédent, la structure AX<sub>2</sub>E<sub>2</sub> correspond à une forme **courbée**, avec les deux doublets non-liants qui occupent chacun une partie du tétraèdre.

**4) Ammoniac (NH<sub>3</sub>)**

L'atome central sera l'**azote**. Il possède a 3 électrons célibataires et un doublet non-liant. La structure VSEPR sera donc **AX<sub>3</sub>E** (car **l'atome fait 3 liaisons et possède un doublet**). C'est donc une structure **pyramidale à base triangulaire** car pour minimiser les interactions, l'atome d'azote sera au centre d'un tétraèdre et chacune des hydrogènes va être sur la base avec le doublet non-liant qui est au sommet.



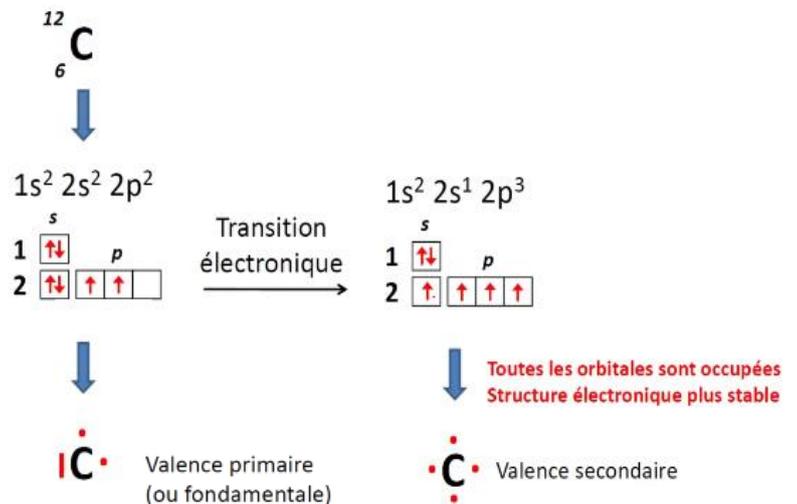
**E- Structure du carbone**

**A = 12** et **Z = 6**.

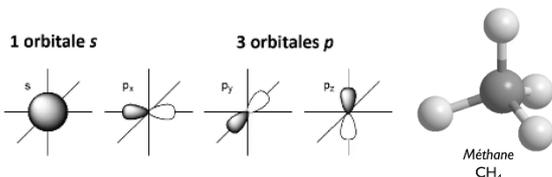
Cela correspond donc à une structure **1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup> 2p<sup>2</sup>**, et donc on aurait un modèle de Lewis avec **un doublet non liant** formé par les deux électrons de l'orbitale 2s, et **deux électrons seuls** dans l'orbitale 2p.

On appelle ça la **valence primaire** du carbone. Cependant, les observations faites sur le carbone étaient en désaccord avec cette structure-là.

Pour l'expliquer, c'est simple : dans le cas du carbone, on observe un effet de **transition électronique** qui va faire en sorte que **tous les électrons de la couche 2 vont se répartir seul à seul sur l'ensemble des orbitales**. On aura donc un seul électron dans la couche 2s et 3 électrons non appariés dans la couche 2p.



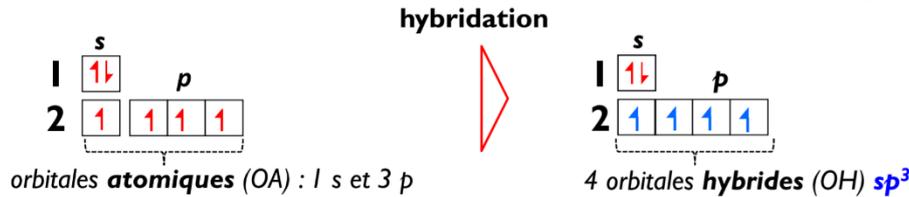
**Toutes les cases seront occupées pour avoir une structure plus stable !**



Si on regarde par exemple la molécule de méthane, les 4 liaisons sont **indifférenciées, identiques** (on n'arrive pas à distinguer une liaison provenant d'électrons s par rapport à une liaison provenant d'électrons p, les 4 liaisons sont les mêmes...)

## 1) Hybridation $sp^3$

La représentation avec une orbitale s et 3 orbitales p n'est pas correcte : pour expliquer ça, on a introduit le phénomène d'**hybridation**. Dans le cas du carbone, lorsqu'il va former des liaisons, nous n'avons plus affaire à des orbitales atomiques de nature différente (s et p) mais à **quatre orbitales hybrides dites  $sp^3$ , qui deviennent strictement identiques**. Elles résultent de la **fusion entre l'orbitale s et les 3 orbitales p**.

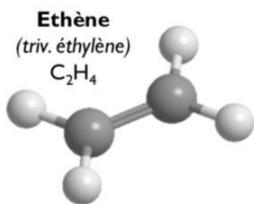


La **couche interne** (ou couche de cœur), elle, **n'évolue pas**.

Les orbitales  $sp^3$  vont permettre de former des **liaisons simples de type sigma ( $\sigma$ )**, c'est-à-dire que l'atome de carbone fait une seule liaison avec l'atome voisin ( $\neq$  liaisons doubles ou triples).

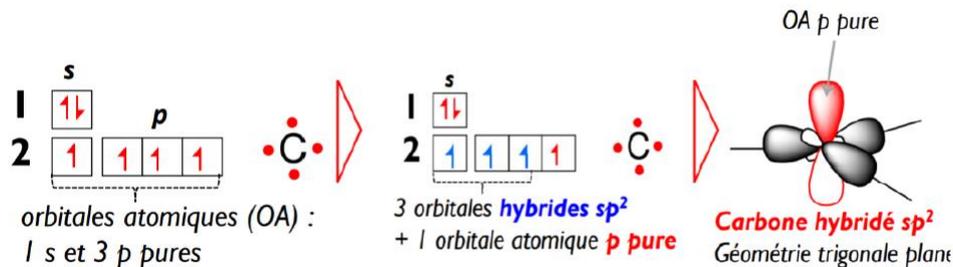
*Mais le carbone ne fait pas que des liaisons simples...*

## 2) Hybridation $sp^2$



Molécule d'**éthène** : comporte une **liaison double** et des liaisons simples. Elle a une structure VSEPR de type  **$AX_3$**  ce qui implique une géométrie **trigonale plane** avec un angle de  **$120^\circ$**  entre chaque liaison. On a donc **3 directions indifférenciées**.

Les 4 orbitales atomiques vont former **3 orbitales hybrides  $sp^2$**  (qui représentent les 3 liaisons qui s'établissent dans le plan, toujours avec un grand et un petit lobe) et **1 orbitale p pure** (qui va former la **double liaison**, qui reste identique à sa structure de départ).



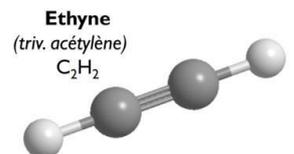
On a notre atome de carbone hybridé de **type  $sp^2$**  qui va former **2 liaisons avec les atomes d'hydrogène** et il va y avoir une mise en commun d'électrons pour former la **double liaison** entre les 2 carbones. Cette dernière se fait au travers des **orbitales p pures**.

On va donc avoir une double liaison qui résulte de la somme d'une **liaison simple** formée par recouvrement des 2 orbitales  $sp^2$  (1 pour chaque carbone) et d'une autre liaison formée dans **1 système  $\pi$**  par **recouvrement latéral des 2 orbitales p pures**.

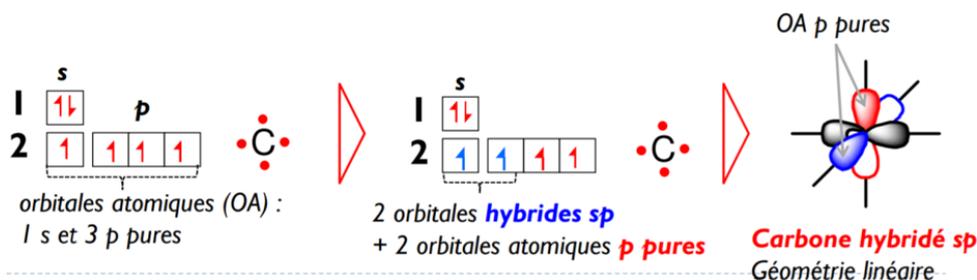
Donc  $\rightarrow$  **Double liaison** = **1 liaison simple  $\sigma$**  et **1 liaison d'un système  $\pi$** .

## 3) Hybridation $sp$

Molécule d'**éthyne** : comporte une **liaison triple** et des liaisons simples. Elle a une structure VSEPR de type  **$AX_2$**  ce qui implique une géométrie **linéaire** avec un angle de  **$180^\circ$**  entre chaque liaison. On n'a donc plus que **2 directions indifférenciées**.



Les 4 orbitales atomiques vont former **2 orbitales hybrides  $sp$**  (qui forment les liaisons simples), et **2 orbitales p pures** (qui vont permettre la création de **la triple liaison** par 2 systèmes pi différents).



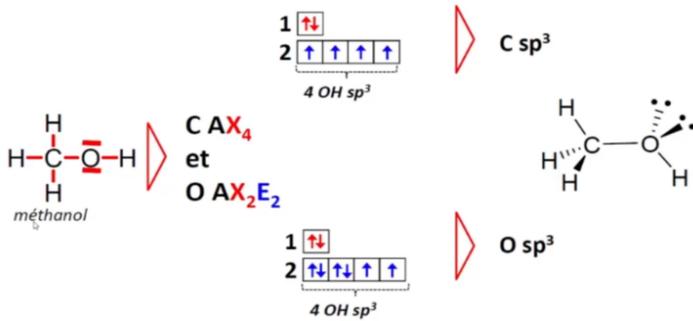
On a notre atome de carbone hybridé de type  $sp$  qui va former 1 liaison avec un atome d'hydrogène et il va y avoir une mise en commun d'électrons pour former la **triple liaison** entre les 2 carbones.

On va donc avoir une triple liaison qui résulte de la somme d'une **liaison simple** par recouvrement de l'orbitale  $sp$  et d'une autre liaison formée dans **2 systèmes  $\pi$**  par **recouvrement latéral des 2 paires d'orbitales p pures**.

Donc → **Triple liaison = 1 liaison simple  $\sigma$  et 2 liaisons d'un système  $\pi$** .

#### 4) Hétéroatomes

Jusqu'à présent, on a étudié l'atome de carbone qui formait des liaisons avec des atomes d'hydrogène. Évidemment, les molécules sont beaucoup plus complexes et comportent des **hétéroatomes** (O, N, S par exemple).



#### Molécule de Méthanol :

La structure va dépendre de l'atome que l'on considère.

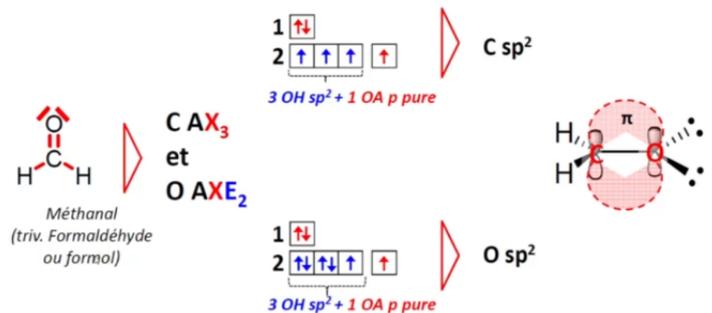
- Atome de **carbone** de type  **$AX_4$**
- Atome d'**oxygène** de type  **$AX_2E_2$**

Dans chacun des cas, on va avoir des liaisons simples et une **hybridation de type  $sp^3$** . On va réorganiser les orbitales pour qu'elles aient le même niveau d'énergie et puissent se répartir dans l'espace de façon la plus **homogène** possible. Elles ont donc besoin d'avoir les **mêmes formes**.

Molécule de Méthanal = formaldéhyde = formol :

- Atome de **carbone** de type  **$AX_3$**  → **hybridation  $sp^2$** . On a 3 orbitales hybridées  $sp^2$  et une orbitale p pure.
- Atome d'**oxygène** de type  **$AXE_2$**  → **hybridation  $sp^2$**  aussi. On a aussi 3 orbitales hybridées  $sp^2$  et une orbitale p pure.

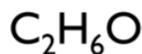
On va donc avoir la double liaison  $C=O$  composée d'une part par le **partage de 2 orbitales  $sp^2$**  (1 pour chaque carbone toujours) et d'autre part par la mise en commun des électrons avec les orbitales p pures. **Les doublets non-liants seront dans les orbitales  $sp^2$** .



### F- Représentations des molécules

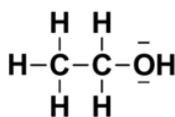
Une molécule simple comme l'éthanol peut être représentée sur le papier de plusieurs façons :

#### La formule brute



Elle donne la **composition élémentaire** de la molécule.

#### La formule développée plane



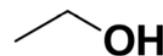
Elle fait apparaître **toutes les liaisons**, et on peut matérialiser les doublets non liants comme ici sur l'atome d'oxygène (=représentation de Lewis).

#### La formule semi-développée



Elle fait apparaître le **squelette carboné** et les **fonctions chimiques**.

#### La formule topologique



Le squelette carboné apparaît sous forme d'une **ligne brisée**, et seules les liaisons hydrogènes (=liaisons H) **fonctionnelles** sont matérialisées.

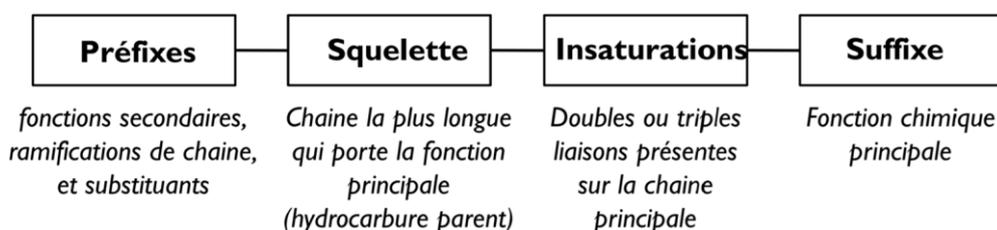
## G- Nomenclature

La nomenclature chimique donne un **nom rationnel** aux molécules, **partagé par tout le monde**. Elle obéit à des règles communes qui permettent aux chimistes de nommer sans ambiguïté toute molécule. Elle est éditée et mise à jour par l'**IUPAC** (International Union of Pure and Applied Chemistry) afin d'améliorer la **communication entre chimistes**.

### 1) Établir le nom d'une molécule

Pour nommer une molécule selon l'IUPAC, il faut :

- Déterminer les fonctions chimiques de la molécule afin d'en déduire la **fonction principale**
- Déterminer la **chaîne carbonée la plus longue**, ses **insaturations** et ses **ramifications**
- **Numéroter** des fonctions chimiques secondaires, insaturations et substituants avec les **indices les plus petits possibles**
- **Établir le nom final** selon le schéma suivant et en donnant les **préfixes par ordre alphabétique**



Il existe aujourd'hui de nombreux **logiciels** qui permettent de nommer des molécules complexes.

### 2) Fonctions chimiques

Classe	Formule	Préfixe	Suffixe
<b>Acides carboxyliques</b>		Carboxy-	Acide ...oïque Acide ...carboxylique
Acides sulfoniques		Sulfo-	Acide ...sulfonique
Sels d'acides		-	...oate de métal ...carboxylate de métal
Anhydrides d'acides		-	Anhydride ...oïque
<b>Esters</b>		Alkoxy-carbonyl-	...oate d'alkyle ...carboxylate d'alkyle
Halogénures d'acyle		Halogénocarbonyl-	Halogénure de ...oyle Halogénures de ...carbonyle
<b>Amides</b>		Carbamoyl-	...amide ...carboxamide
Nitriles	$R-C\equiv N$	Cyano-	...nitrile ...carbonitrile
Aldéhydes (Thio-)		Formyl- ou Oxo-	-al ...carboxaldéhyde
Cétones (Thio-)		Oxo-	-one (-thione)
<b>Alcools</b>	$R-OH$	Hydroxy-	-ol
Phénols		Hydroxy-	-ol
<b>Thiols</b>	$R-SH$	Sulfanyl-	-thiol
<b>Amines</b>		Amino-	-amine (chaînes 2 <sup>aires</sup> en préfixes) : N-alkyl-
Imines		Imino-	-imine
Ethers - (ép)oxydes		Alkoxy- Époxy-	Éther (oxyde) de R et de R'
Sulfures (épi-)		Alkylthio- (épi)thio-	Sulfure de R et de R'
(Hydro)péroxydes	$R-OOR'$ $R-OOH$	(Hydro)péroxy-	(Hydro)péroxyde de R et de R'

Une **fonction chimique** est un **ensemble de propriétés portées par un atome ou un groupe structuré d'atomes** (= groupe fonctionnel).

Dans le tableau ci-dessus, les fonctions chimiques sont classées par **ordre décroissant de priorité**. Cette ordre de priorité va permettre de **déterminer la fonction principale** qui va permettre de nommer la molécule.

Il est important de retenir la priorité des molécules. D'ailleurs de manière générale, **plus la fonction est oxygénée, plus elle est prioritaire**. Par exemple, les esters et les amides sont prioritaires sur les alcools et les amines mais pas sur les acides carboxyliques.

### 3) Hydrocarbures

Pour nommer la chaîne carbonée principale on va chercher systématiquement à connaître la **chaîne la plus longue**. En fonction du nombre du nombre d'atomes de carbone, on va avoir soit le **nom** de l'hydrocarbure parent s'il fait office de **chaîne principale**, soit le **préfixe** s'il est en **substituant**.

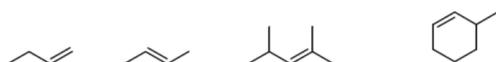
Hydrocarbure	Formule	Préfixe	Hydrocarbure	Formule	Préfixe
Méthane	CH <sub>3</sub> -	Méthyl-	Heptane	C7	Heptyl-
Ethane	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> -	Ethyl-	Octane	C8	Octyl-
Propane		Propyl-	Nonane	C9	Nonyl-
Butane		Butyl-	Cyclohexane		Cyclohexyl-
Pentane		Pentyl-	Benzene		Phényl-
Hexane	C6	hexyl-	Naphatène		Naphtyl-

De la même façon, dans le tableau précédent sur les fonctions chimiques, on aura une façon différente de nommer la fonction selon si elle est **secondaire (préfixe) ou principale (suffixe)**.

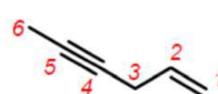
### 4) Insaturations

Les **double liaisons** forment des **alcènes** et les **triples liaisons** forment des **alcynes**.

Double liaison entre 2 atomes de carbone  $\Rightarrow$  **alcène**



Triple liaison entre 2 atomes de carbone  $\Rightarrow$  **alcyne**



Hex-1-én-4-yne



~~Hex-5-én-2-yne~~

Pour la numérotation, il faut noter que **la double liaison est prioritaire sur la triple liaison** ! Ainsi, lorsqu'on va chercher à attribuer les numéros aux substituants, on donnera toujours **l'indice le plus bas à la double liaison plutôt qu'à la triple**.

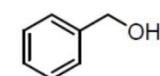
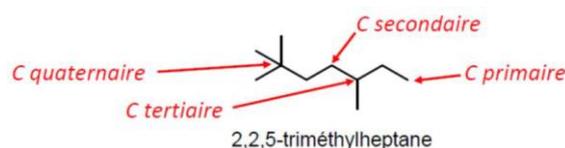
### 5) Vocabulaire associé

La **classe du carbone** va être déterminée par ses substitutions :

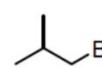
- un carbone lié à **0** carbone  $\rightarrow$  carbone **nullaire**
- un carbone lié à **1 seul autre** carbone  $\rightarrow$  carbone **primaire**
- un carbone lié à **2 autres** carbones  $\rightarrow$  carbone **secondaire**
- un carbone lié à **3 autres** carbones  $\rightarrow$  carbone **tertiaire**
- un carbone lié à **4 autres** carbones  $\rightarrow$  carbone **quaternaire**

La **classe des halogénures ou des alcools** est fonction du nombre de liaisons de l'atome de carbone qui porte le dérivé halogéné avec d'autres atomes de carbone (= **classe du carbone auquel ils sont liés**).

En ce qui concerne la classe des **amines**, leur classe est déterminée par leur substitution avec des atomes de carbone.

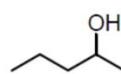


alcool benzylique\*



1-bromo-2-méthylpropane

Alcool/halogénure  
**primaire**

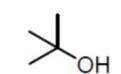


butan-2-ol

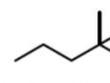


2-chloropropane

Alcool/halogénure  
**secondaire**



terbutanol\*



2-iodo-2-méthylpentane

Alcool/halogénure  
**tertiaire**