

# 1 Structure et propriétés

## ► Formule topologique

La **formule topologique** est un mode de représentation simplifié des molécules organiques : on ne représente pas les atomes de carbone et d'hydrogène à l'exception de ceux liés à un hétéroatome (O, N, ...). Les **liaisons covalentes** sont représentées par des traits (FIG. 1).

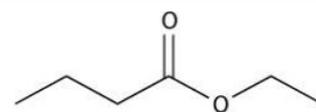


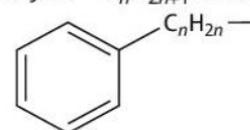
FIG. 1 Formule topologique du butanoate d'éthyle, un arôme à l'odeur fruitée d'ananas.

## ► Familles fonctionnelles

Les composés organiques peuvent être regroupés en différentes **familles** ou **fonctions chimiques** (FIG. 2) (FICHE MÉTHODE ► p. 550).

Formule	Nom de la famille	Exemple
	ester	$\text{H}_3\text{C}-\text{C}(=\text{O})-\text{O}-\text{CH}_3$ éthanoate de méthyle
	amine	$\text{H}_3\text{C}-\text{NH}_2$ méthanamine
	amide	$\text{H}_3\text{C}-\text{C}(=\text{O})-\text{NH}_2$ éthanamide
	halogénoalcane	$\text{H}_3\text{C}-\text{Br}$ bromure de méthyle

FIG. 2 Les familles de composés organiques. R, R' et R'' désignent l'atome H, des groupes alkyles  $-\text{C}_n\text{H}_{2n+1}$  ou encore :



et X est un halogène.

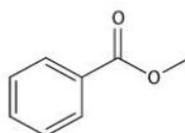
## ► Squelettes carbonés et isomérisation de constitution

Les atomes de carbone sont liés les uns aux autres pour former des squelettes carbonés qui peuvent être linéaires, ramifiés ou cycliques.

Un **squelette carboné** saturé ne possède que de simples liaisons C—C. Il est insaturé s'il compte au moins une liaison multiple (double ou triple) entre deux atomes de carbone.

### EXEMPLE

Le squelette carboné du benzoate de méthyle, utilisé dans l'industrie des parfums, est cyclique et insaturé.

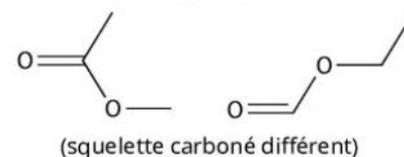


Des **isomères de constitution** sont des molécules de même formule brute, mais avec un enchaînement d'atomes différent : leurs formules développées ou semi-développées sont différentes (FIG. 3), donc leurs propriétés physiques, chimiques et biologiques sont différentes.

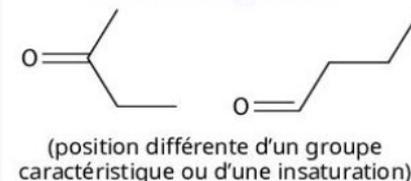
## ► Polymères

Les **polymères** sont des macromolécules, répétition d'un motif élémentaire : le monomère (FIG. 4).

### Isomères de chaînes



### Isomères de position



### Isomères de fonction

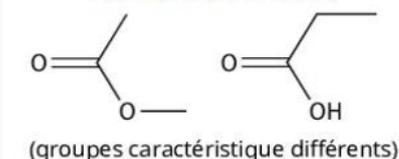


FIG. 3 Isomérisation de constitution.

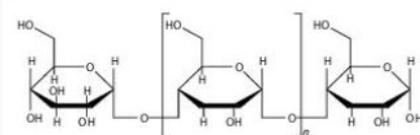


FIG. 4 L'amylose, dont le monomère est la molécule de glucose, est l'un des polymères naturels constitutifs de l'amidon.

## 2 Optimisation d'une synthèse

### ► Augmenter la vitesse de formation

■ Un des enjeux lors d'une synthèse chimique peut être d'augmenter la vitesse de formation du produit recherché, il conviendra alors d'agir sur les facteurs cinétiques :

- la température et la concentration des réactifs ;
- l'état de division des réactifs, la nature du solvant (FIG. 5) qui, en favorisant la rencontre entre les espèces qui réagissent, permettent également une diminution du temps de demi-réaction, donc de la durée de la transformation ;
- l'usage d'un catalyseur conduisant à la formation d'intermédiaires réactionnels plus réactifs.

### ► Améliorer le rendement

Le **rendement** d'une synthèse chimique est l'un des critères permettant d'apprécier son efficacité. Il est défini par :

$$\text{rendement (\%)} \rightarrow R = \frac{n_{\text{obtenue}}}{n_{\text{attendue}}} \times 100$$

quantité de matière de produit obtenue (en mol)

quantité de matière de produit attendue (en mol)

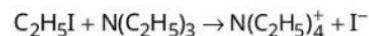
■ Le **choix d'un réactif** plutôt qu'un autre est susceptible d'influencer le rendement d'une synthèse, tout comme celui d'un **catalyseur** plus ou moins **sélectif** (FIG. 6).

■ Lors d'un équilibre chimique, le **quotient de réaction** dépend des concentrations des réactifs (A et B) et des produits (C et D), il s'écrit :

$$Q_r = \frac{[C]^c \cdot [D]^d}{[A]^a \cdot [B]^b}$$

■ Quelles que soient les conditions initiales, **un système tend toujours** vers un même état d'équilibre caractérisé par sa **constante d'équilibre K(T)** à une température donnée. Ainsi, modifier le quotient de réaction revient également à influencer le sens d'évolution d'un système chimique.

Conformément au critère d'évolution spontanée d'un système hors équilibre chimique, **l'introduction d'un excès d'un réactif** ou **l'élimination d'un produit** (FIG. 7) du milieu réactionnel conduit à **l'augmentation du rendement** d'une synthèse.



Solvant	Vitesse relative à 100 °C
Hexane	1
Benzène	80
Chlorobenzène	332
Acétone	530
Nitrobenzène	2 766

FIG. 5 Influence de la nature du solvant sur la vitesse de formation d'un produit.

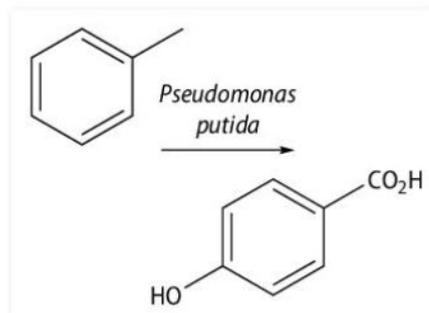


FIG. 6 L'action de *Pseudomonas putida*, un biocatalyseur, sur le toluène, conduit avec une sélectivité de 99 % à la production d'acide para-hydroxybenzoïque, monomère de la préparation des polyesters. C'est une alternative à la voie chimique énergivore et peu sélective.

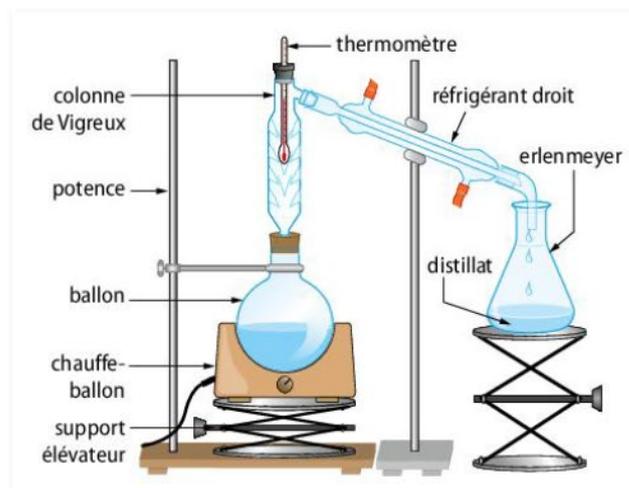


FIG. 7 Le montage de distillation permet d'éliminer un produit au cours de sa formation.

## 3 Stratégies de synthèse multi-étapes

### ► Modifier la structure d'une molécule

■ Lors d'une synthèse, la transformation d'une molécule peut concerner l'un de ses groupes caractéristiques et/ou sa chaîne carbonée. On peut classer les réactions à partir de l'examen de la nature des réactifs et des produits.

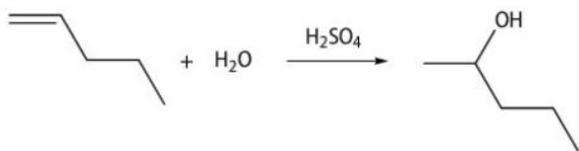
Lors d'une **réaction de substitution**, un atome ou un groupe d'atomes du réactif d'intérêt est **remplacé** par un autre atome ou groupe d'atomes.

**EXEMPLE**



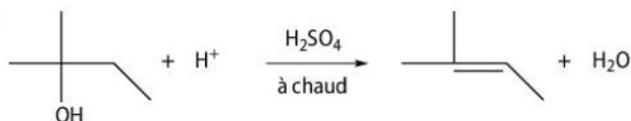
Une **réaction d'addition** implique généralement une molécule contenant au moins une **insaturation** dans sa chaîne carbonée : le produit obtenu contient tous les atomes de tous les réactifs.

**EXEMPLE**



Lors d'une **réaction d'élimination**, le réactif d'intérêt cède des atomes portés par des carbones adjacents et il apparaît une **insaturation** dans sa chaîne **ou** une **cyclisation** de celle-ci.

**EXEMPLE**



■ Selon le type de réactif utilisé pour réagir avec un composé organique, on pourra également distinguer les réactions d'oxydo-réduction, des réactions acide-base.

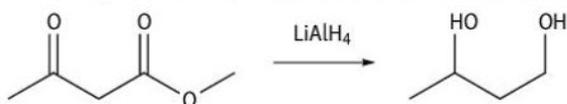
■ Une synthèse peut également conduire à la formation d'un polymère : on parle alors de **polymérisation** (FIG. 8).

► **Protection et déprotection de fonction**

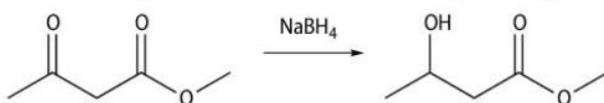
■ Un réactif est dit **chimiosélectif** s'il ne réagit qu'avec un groupe caractéristique.

**EXEMPLE**

• Le réducteur  $\text{LiAlH}_4$  réduit indifféremment les cétones et les esters en alcool :



• Le réducteur  $\text{NaBH}_4$  réduit les cétones en alcool, sans agir sur les esters :



Ce réducteur est chimiosélectif.

Lorsqu'une molécule possède plusieurs groupes fonctionnels et en l'absence de réactif chimiosélectif, il est nécessaire, au cours d'une synthèse, de **protéger les fonctions** que l'on ne souhaite pas modifier (FIG. 9).

Une étape de déprotection est alors nécessaire après la réaction.

► **Synthèses écoresponsables**

■ La réalisation des synthèses écoresponsables de composés organiques implique la recherche de réactifs, solvants, catalyseurs et protocoles minimisant les apports d'énergie et les déchets, et augmentant la vitesse, la sélectivité et le rendement. C'est le sens de la « chimie verte » théorisée dans les années 1990 (FIG. 10).

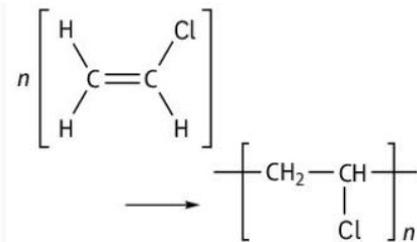


FIG. 8 Synthèse du polychlorure de vinyle (PVC) par polymérisation.

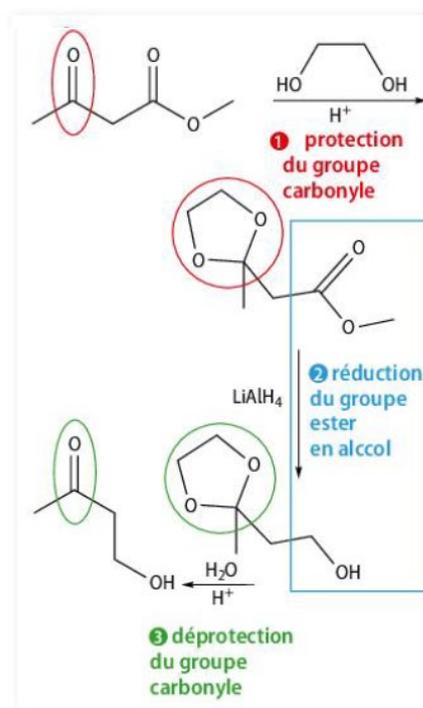


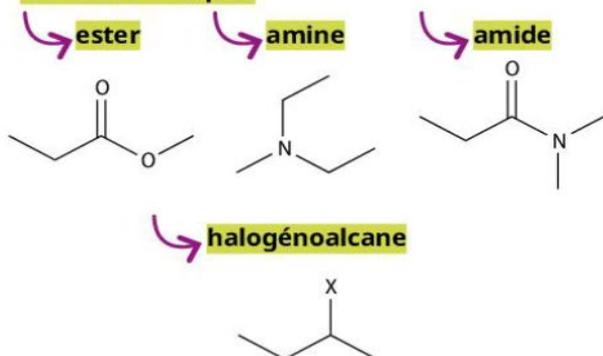
FIG. 9 Utilisation d'un groupe protecteur, puis déprotection.



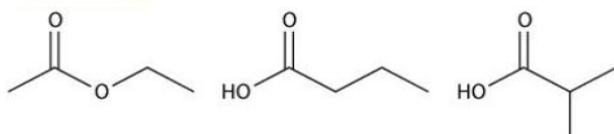
FIG. 10 Quelques principes de la chimie verte.

## 1 Structure et propriétés

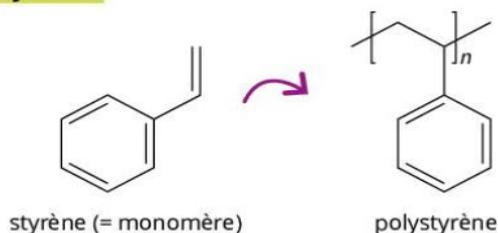
### Formules topologiques des familles chimiques



### Isomères de constitution

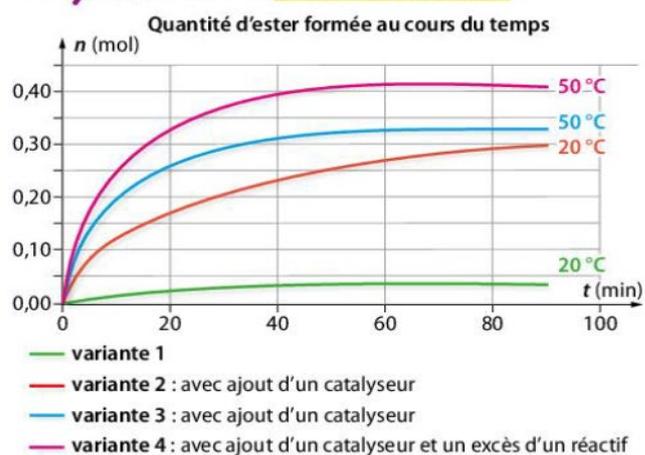


### Polymères

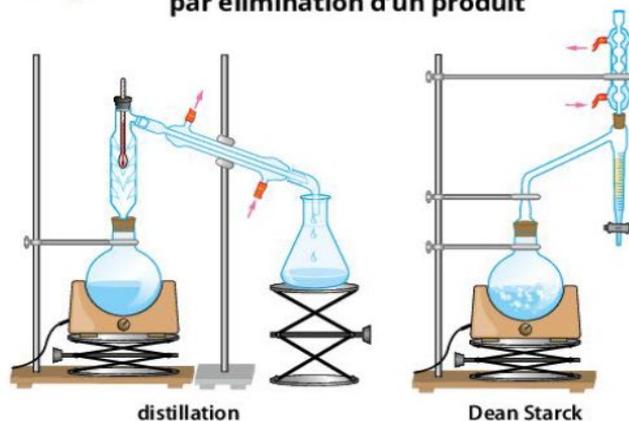


## 2 Optimisation d'une synthèse

### Augmenter la vitesse de réaction



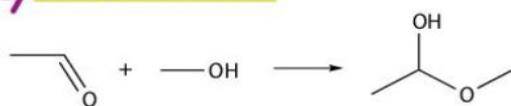
### Augmenter le rendement de la synthèse par élimination d'un produit



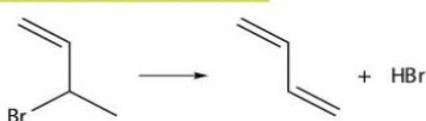
## 3 Stratégies pour une synthèse multi-étapes

### Modification de la structure d'une molécule

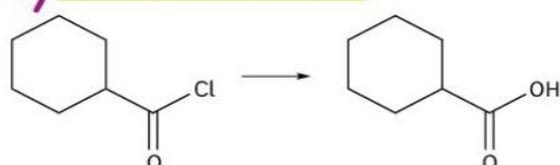
#### réaction d'addition



#### réaction d'élimination



#### réaction de substitution



### Protection / déprotection

#### de la fonction alcool par le DiHydroPyranne

