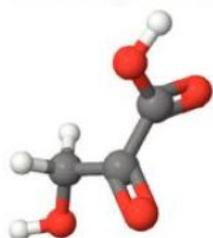


Vu
en 1^{re}

Molécule : modélisation, nom et groupes caractéristiques

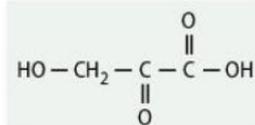
Modèle moléculaire



Formule brute



Formule semi-développée



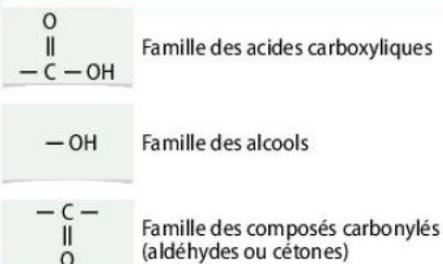
Modélisation

MOLÉCULE

Exemple : acide 2-oxo-3-hydroxypropanoïque

Nom

Familles
fonctionnelles



Nature et position
des groupes alkyles

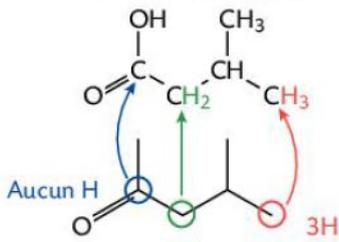
Famille
fonctionnelle

Préfixe-Racine-Suffixe

Nombre d'atomes de carbone
dans la chaîne principale

A Nombre d'atomes d'hydrogène

Formule développée



Formule topologique

B Familles fonctionnelles vues en classe de Première

Famille fonctionnelle et suffixe

Alcool	Acide carboxylique
-OH	
ol	oïque
Aldéhyde	Cétone
al	one

> Dans un alcool, l'atome de carbone lié au groupe -OH doit former quatre liaisons simples. Pour les acides carboxyliques, le nom de la molécule commence par le mot acide.

C Règles de nomenclature

Le nom des molécules organiques est de la forme :

Nature et position du (ou des) groupe(s) alkyle(s) Famille fonctionnelle

Préfixe - Racine - Suffixe

Nombre d'atomes de carbone dans la chaîne principale

1 La structure des entités chimiques organiques

a. Formules topologiques

• L'écriture topologique est une représentation simple et rapide des molécules organiques :

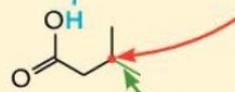
❶ Les atomes de carbone et les atomes d'hydrogène liés à ces atomes ne sont pas indiqués.

❷ Les atomes d'hydrogène non liés à des atomes de carbone sont indiqués.

❸ Un sommet correspond à un atome de carbone et aux atomes d'hydrogène qui sont liés à l'atome de carbone.

❹ Un segment correspond à un doublet liant.

❺ La chaîne carbonée est représentée en ligne brisée (« zigzag »).



• Le nombre d'atome(s) d'hydrogène lié(s) à chaque atome de carbone se retrouve facilement car ce dernier est entouré de quatre doublets liants (doc. A).

b. Familles fonctionnelles et nomenclature

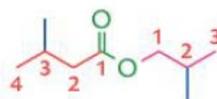
• Pour nommer une espèce chimique, il faut suivre les règles récapitulées dans la Fiche 8 p. 459.

• Le suffixe du nom indique la famille fonctionnelle à laquelle appartient l'espèce chimique (tableau B et doc. C).

Famille fonctionnelle	Ester	Amine	Amide	Halogénoalcane	
Groupe caractéristique				-F	-Cl
				-Br	-I
Suffixe ou préfixe	... oate de ... yle	amine*	amide*	fluoro ; chloro ; bromo ; iodo	

* Si l'atome d'azote, en plus d'être lié à la chaîne principale, est aussi lié à des groupes alkyles, le nom est précédé de la mention N-alkyl.

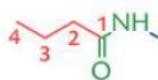
Exemples



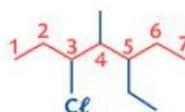
3-méthylbutanoate de 2-méthylpropyle



3-méthylpentan-2-amine

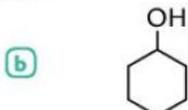


N-méthylbutanamide



3-chloro-5-éthyl-4-méthylheptane

D Squelettes carbonés



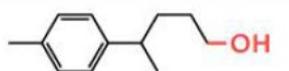
> Les squelettes carbonés du pent-4-én-1-ol (a) et celui du cyclohexanol (b) sont **insaturés**. Le squelette du propan-1-ol (c) est **saturé**.

E Températures d'ébullition

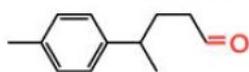
Formule brute	Température d'ébullition de l'espèce (°C)
C ₂ H ₅ OH	78,3
HCO ₂ H	118,1
HCO ₂ C ₂ H ₅	54,3
H ₂ O	100,0

> Parmi les espèces du milieu réactionnel, c'est l'ester de formule HCO₂C₂H₅ qui a la plus faible température d'ébullition.

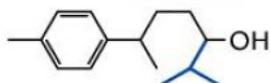
F Modification de groupe ou de chaîne



↓ Modification de groupe



↓ Modification de chaîne



c. Squelette carboné

- Le **squelette carboné** représente l'enchaînement des atomes de carbone constituant une molécule organique.
- Si une liaison multiple (double ou triple) ou un cycle est présent, le squelette est dit **insaturé**. Dans le cas contraire, il est dit **saturé** (doc. D).

d. Isomérisie de constitution

Deux espèces sont **isomères de constitution** si leurs molécules ont la même formule brute et des formules semi-développées différentes.

Exemple

	Formule brute	Formule semi-développée	Formule topologique
Acide propanoïque	C ₃ H ₆ O ₂		
Éthanoate de méthyle	C ₃ H ₆ O ₂		

2 L'optimisation d'une synthèse

a. Augmentation de la vitesse de formation

Pour augmenter la vitesse de formation d'un produit, on peut :

- **chauffer** le milieu réactionnel avec un montage de chauffage à reflux ;
- utiliser un **catalyseur** ;
- augmenter la **concentration des réactifs** en solution.

b. Optimisation du rendement

Dans le cas où une réaction opposée limite une synthèse, on peut améliorer le rendement de cette dernière :

- en introduisant l'un des **réactifs en excès** ;
- en **éliminant** du milieu réactionnel un des **produits** de la réaction.

Exemple : Soient les réactions opposées dont l'équation est donnée ci-dessous.



Le milieu réactionnel est ici constitué d'un mélange d'espèces liquides miscibles ; dans ce cas le quotient de réaction s'écrit :

$$Q_r = \frac{n(\text{HCO}_2\text{C}_2\text{H}_5) \times n(\text{H}_2\text{O})}{n(\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}) \times n(\text{HCO}_2\text{H})}$$

En distillant l'ester HCO₂C₂H₅ (doc. E) au fur et à mesure de sa formation, le quotient de réaction Q_r est toujours inférieur à la constante d'équilibre K : le système évolue de manière continue dans le sens direct de l'équation, et des rendements proches de 100 % sont alors obtenus.

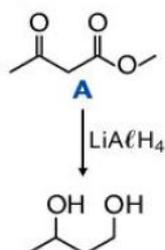
3 La stratégie de synthèse

a. Modification de groupe ou de chaîne

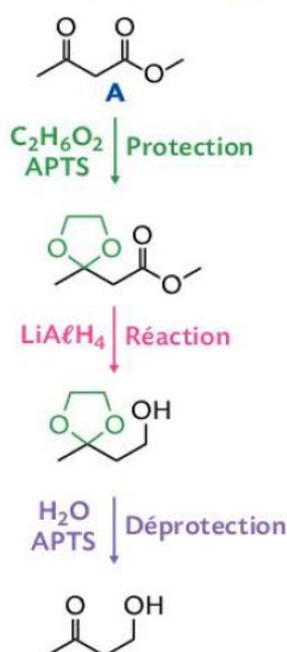
- La **chaîne carbonée** d'une molécule est **modifiée** s'il y a création ou rupture de liaison carbone-carbone. Dans le cas contraire, il y a **modification d'un ou plusieurs groupe(s)** caractéristique(s) (doc. F).

G Protection de fonction

- En présence de tétrahydroaluminat de lithium, les deux groupes fonctionnels de la molécule **A** sont transformés :



- Grâce à des étapes de protection et de déprotection, il est possible de transformer un seul des deux groupes caractéristiques de la molécule **A** :



- Lors d'une synthèse, si plusieurs groupes caractéristiques peuvent réagir lors d'une même réaction, il convient de protéger l'un des groupes par un groupe protecteur moins réactif (doc. **G**).

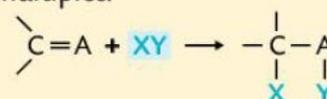
Lors d'une **protection de fonction**, un groupe caractéristique est transitoirement transformé en un autre groupe caractéristique moins réactif. Une réaction de déprotection doit exister pour régénérer le groupe caractéristique initial.

b. Catégories de réaction

- En chimie organique, on peut classer la plupart des réactions en quatre grandes catégories :

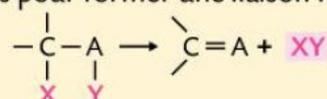
• Addition

Lors d'une **réaction d'addition**, des atomes ou des groupes d'atomes se lient à des atomes engagés dans des liaisons multiples.



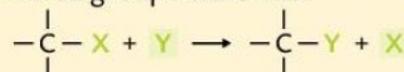
• Élimination

Lors d'une **réaction d'élimination**, des atomes ou groupes d'atomes, portés par des atomes adjacents, sont éliminés pour former une liaison multiple.



• Substitution

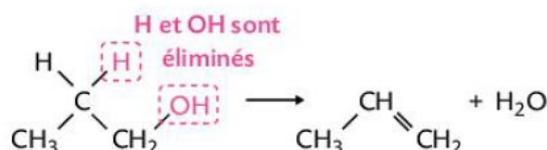
Lors d'une **réaction de substitution**, un atome ou un groupe d'atomes d'une molécule est remplacé par un autre atome ou groupe d'atomes.



• Acide-Base

Lors d'une **réaction acide-base**, un échange d'ion hydrogène H^+ se produit.

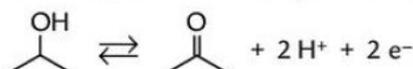
Exemple : La réaction dont l'équation est donnée ci-dessous est une réaction d'élimination.



- Un classement complémentaire est parfois possible, certaines réactions peuvent être aussi qualifiées de réactions d'oxydation ou de réduction.

Lors d'une **réaction d'oxydoréduction** il se produit un échange d'électron(s).

Exemple : La réaction modélisant la transformation du propan-2-ol en propanone est une réaction d'élimination. C'est aussi une réaction d'oxydation car elle peut être modélisée par la demi-équation électronique donnée ci-dessous.



H Polymères synthétiques ou naturels

Nom, utilisation et origine	Motif
Polychlorure de vinyle (PVC) Revêtements de sol, canalisations etc. Synthétique	
Cis-polyisoprène Caoutchouc Naturel (Latex)	
Cellulose Mouchoirs en papier Naturel (Paroi des cellules végétales)	

lycee.hachette-education.com/pc/tle



Stratégie de synthèse

VIDÉO DE COURS

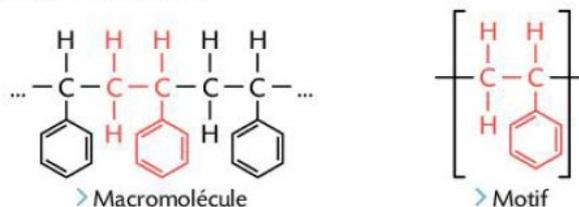
INFO

- On distingue le **réactif principal A** qui est le précurseur de la molécule cible du **réactif secondaire CH₃I**.
- Au-dessous et au-dessus de la flèche, des informations sont fournies : **solvant**, **température**, **chauffage** (noté Δ), **catalyseur**, **durée de la réaction**, etc.
- Dans l'écriture simplifiée, seule la formule de la **molécule cible** est indiquée (ici B). Le sous-produit de la réaction I⁻ n'est pas indiqué.

c. Réaction de polymérisation

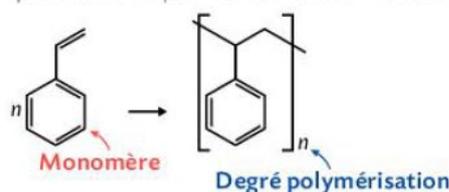
Un **polymère** est un ensemble de **macromolécules**. Dans une macromolécule, une unité structurale appelée **motif** se répète un grand nombre de fois.

Exemple : Le polystyrène est un polymère synthétique utilisé par exemple comme isolant dans le bâtiment.



Une **réaction de polymérisation** permet d'obtenir les macromolécules constituant le polymère à partir d'un très grand nombre de molécules identiques appelées **monomères**.

Exemple : La réaction dont l'équation est donnée ci-dessous est une réaction de polymérisation. On peut aussi la qualifier de réaction d'addition.

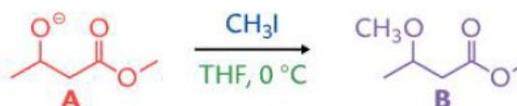


Les polymères peuvent être d'origine naturelle ou synthétique (tableau H).

d. Synthèse multi-étapes

- La **synthèse organique** consiste à produire une espèce chimique organique. Les molécules de cette espèce, dites **molécules cibles**, sont plus complexes que les molécules des réactifs appelés **précurseurs** de la molécule cible.
- Une équation est toujours ajustée mais en chimie organique, on utilise souvent une écriture simplifiée (INFO).

Exemple :



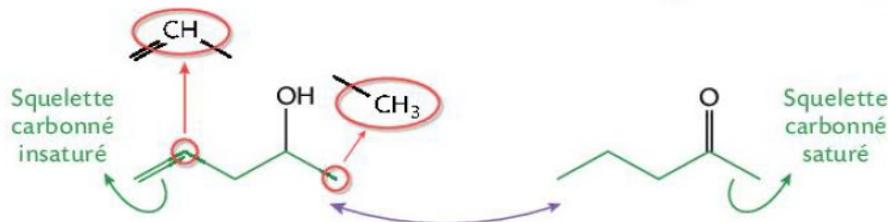
- Pour définir une stratégie de synthèse (ordre des étapes, mise en place d'éventuelles étapes de protection, etc.), le chimiste dispose de banques de réactions (voir la **Fiche 9 p. 460**).
- Pour comparer plusieurs synthèses d'une même espèce cible, un critère important est le **rendement global** de la synthèse qui doit être le plus élevé possible.
- D'autres critères sont aussi importants : **écoresponsabilité**, **coût**, **durée**, etc.

Une **synthèse écoresponsable** d'un produit permet de réduire au maximum l'empreinte environnementale en se proposant d'agir sur trois domaines :

- les **matières premières** : en limitant les quantités, en préférant des espèces peu dangereuses, renouvelables, etc. ;
- les **solvants** : non toxiques, non polluants, en faible quantité voire sans solvant ;
- l'**énergie** : en limitant les dépenses, en utilisant des conditions douces (catalyseur, faibles températures, etc.).



1 La structure des entités chimiques organiques



Même formules brutes (C₅H₁₀O) et formules topologiques semi-développées différentes : **isomère de constitution**

Nom d'une espèce

Savoir utiliser la **Fiche 8** p. 459

Famille fonctionnelle	Halogénoalcane	Alcool	Aldéhyde	Cétone	Acide carboxylique	Ester	Amine	Amide
Groupe caractéristique	C-X avec X = Cl, Br, I	$\begin{array}{c} \\ -C-OH \\ \end{array}$	$\begin{array}{c} -C=O \\ \\ H \end{array}$	$\begin{array}{c} C-C=O \\ \\ C \end{array}$	$\begin{array}{c} -C=O \\ \\ OH \end{array}$	$\begin{array}{c} -C=O \\ \\ O-C \end{array}$	$\begin{array}{c} -N- \\ \end{array}$	$\begin{array}{c} -C=O \\ \\ -N- \end{array}$

2 L'optimisation d'une synthèse

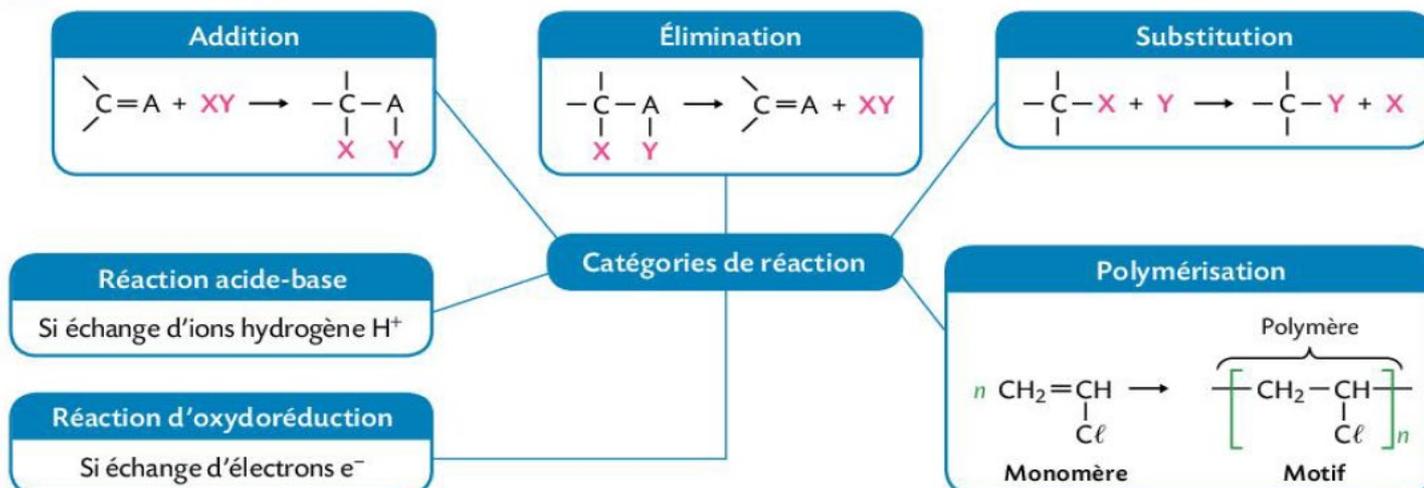
Augmentation de la vitesse de formation d'un produit

- Chauffer le milieu réactionnel.
- Utiliser un catalyseur.
- Augmenter la concentration des réactifs en solution.

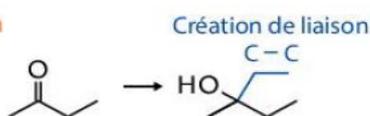
Optimisation du rendement

- Introduire un réactif en excès.
- Éliminer un produit de la réaction au fur et à mesure de sa formation.

3 La stratégie de synthèse



• **Modification de chaîne**



• **Modification de groupe**



• **Protection / déprotection** de fonction :

- transformer temporairement un groupe caractéristique en un autre moins réactif ;
- une réaction de déprotection doit exister.

• Pour établir la **stratégie de synthèse** d'une espèce, savoir utiliser la **Fiche 9** p. 460.

• Critères de **comparaison de deux synthèses** : rendement, écoresponsabilité (matière première, solvants, énergie, vitesse de formation, etc.).