

NOM et REPRESENTATION des MOLECULES

Compétences

- Associer un groupe caractéristique à une fonction dans le cas des alcool, aldéhyde, cétone, acide carboxylique, ester, amine, amide
- Connaître les règles de nomenclature pour les alcane, alcène, alcool, aldéhyde, cétone, acide carboxylique, ester, amine, amide.
- A partir du nom, savoir représenter la molécule (développée, semi-développée, topologique) et déterminer les groupes caractéristiques.
- Connaître la représentation de Cram.
- Savoir visualiser les différentes isomères de conformation

Plan

- 1- Comment nommer une molécule en chimie organique ?
La nomenclature
 - 1.1- Les alcanes non cyclique (C_nH_{2n+2})
 - 1.2- Les alcènes (C_nH_{2n})
 - 1.3- Les alcools (R-OH)
 - 1.4- Les aldéhydes et les cétones (R=O)
 - 1.5- Les acides carboxyliques (R-COOH)
 - 1.6- Les esters (R-O-CO-R')
 - 1.7- Les amines (R-NH₂ ; R-NR'-R'')
 - 1.8- Les amides (R-CO-NR'-R'')
 - 1.9- Les acides α -aminés (R-CO-CN₂-R')
- 2- Comment représenter une molécule ?
 - 2.1- Formule développée
 - 2.2- Formule semi-développée
 - 2.3- Formule topologique
 - 2.4- Représentation de Cram
- 3- Isomères de conformation

1- Comment nommer une molécule en chimie organique ? La nomenclature

1.1- Les alcanes non cyclique (C_nH_{2n+2})

Chaîne sans ramifications

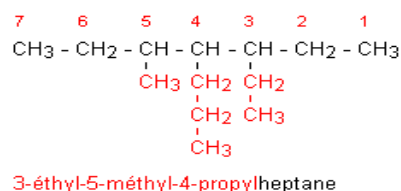
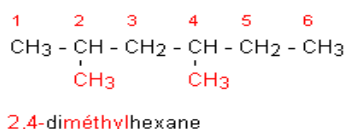
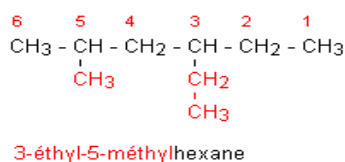
CH ₄	C ₂ H ₆	C ₃ H ₈	C ₄ H ₁₀	C ₅ H ₁₂	C ₆ H ₁₄	C ₇ H ₁₆	C ₈ H ₁₈	C ₉ H ₂₀	C ₁₀ H ₂₂
méthane	éthane	propane	butane	Pentane	Hexane	Heptane	Octane	Nonane	décane

Chaîne avec ramifications :

CH ₃ -	C ₂ H ₅ -	C ₃ H ₇ -
méthyle	éthyle	propyle

- 1- trouver la chaîne carbonée la plus longue (= **chaîne principale**) et trouver le nom de l'alcane correspondant
- 2- identifier les **ramifications** et le numéro du carbone (= **indice de position**) sur lequel elles se trouvent (les numéros doivent être le plus petit possible)
- 3- ajouter devant le nom de l'alcane, le nom des alkyles ramifiés, par ordre alphabétique (en enlevant la lettre « e » finale) et devant le nom de l'alkyle, l'indice de position.
- 4- si plusieurs ramifications identiques rajouter di, tri .. devant le nom de l'alkyle.
- 5- les numéros sont séparés par des virgules, sinon par des tirets.

Exemple :



1.2- Les alcènes (C_nH_{2n})

On obtient le nom d'un alcène de la manière suivante :

- **On cherche la chaîne carbonée la plus longue contenant la double liaison.**

- On compte le nombre d'atomes de carbone de cette chaîne principale et on obtient le nom de l'alcène grâce au **préfixe grec indiquant le nombre d'atomes** de carbone suivi du **suffixe -ène**. (on enlève « ane » que l'on remplace par « ène »)

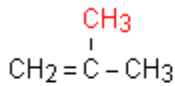
- On numérote les atomes de carbone de la chaîne principale de façon à avoir les plus petits indices pour les atomes de carbone doublement liés.

- La place de la double liaison est indiquée par son indice de position (le plus petit des deux) placé avant le **suffixe -ène**.

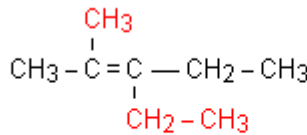
- C'est la place de la double liaison qui impose le sens de numérotation.

- Comme pour les alcanes, on indique les groupes substituants (des ramifications) de la chaîne principale avec leur indice de position.

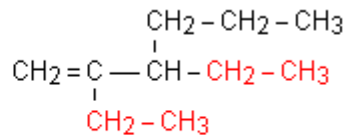
Exemples :



méthylpropène



3-éthyl-2-méthylpent-2-ène



2,3-diéthylhex-1-ène

1.3- Les alcools (R-OH)

On appelle **alcool** tout composé dont le groupement - OH est le groupe principal, à condition que ce dernier ne soit pas porté par un atome de carbone appartenant au cycle d'un composé aromatique.

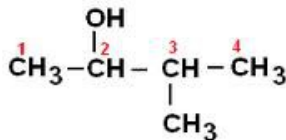
1- identifier la chaîne carbonée la plus longue contenant le groupement hydroxyle.

2- numéroté la chaîne afin que l'indice de position de l'hydroxyle soit le plus petit possible.

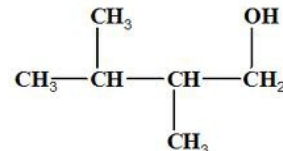
3- remplacer le « e » final de l'alcool par « -ol » précédé de l'indice de position de l'hydroxyle

4- si ramifications alkyles les nommer comme dans le cadre d'un alcane.

Exemple



3-méthylbutan-2-ol



2,3-diméthylbutan-1-ol

Remarque : un alcan-1-ol sera un alcool primaire,

1.4- Les aldéhydes et les cétones (R=O)

1.4.1- Aldéhyde :

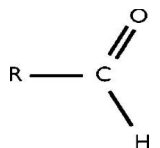
groupement carbonyle (C=O) en bout de chaîne carbonée

nomenclature :

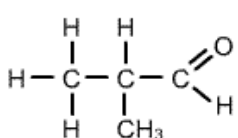
- chaîne carbonée la plus longue contenant le groupement carbonyle

- on remplace le « e » final de l'alcane correspondant par « al »

- si ramifications : le carbone fonctionnel, porte l'indice 1, ce qui détermine les indices de positions des ramifications

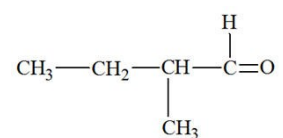


Exemple :



méthylpropanal

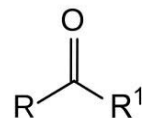
Rmq : le « 2 » devant le groupement méthyle est inutile car il n'y a pas d'autres possibilités d'avoir un groupement méthyle ici.



2-méthylbutanal

1.4.2- Cétones :

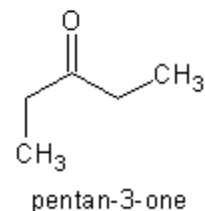
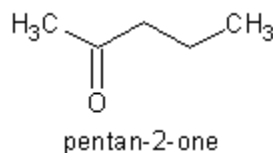
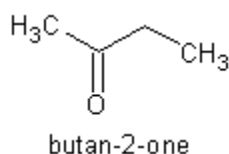
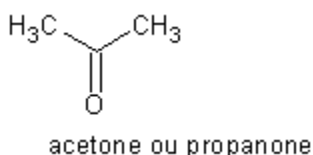
Le groupe carbonyle (C=O) est au milieu de la chaîne carbonée.



Nomenclature :

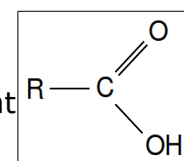
- chaîne carbonée la plus longue contenant le groupement carbonyle
- numérotation de la chaîne principale de façon à avoir le plus petit indice pour le groupement carbonyle, ce qui détermine les indices de positions des ramifications
- on remplace le « e » finale de l'alcane correspondant par « -one » précédé de l'indice de position du groupement carbonyle

Exemples:



1.5- Les acides carboxyliques (R-COOH)

Les acides carboxyliques sont caractérisés par la présence d'un groupement carboxyle (COOH)



nomenclature :

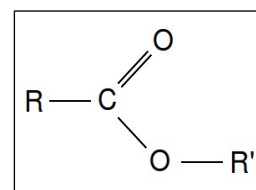
- chaîne carbonée la plus longue contenant le groupement carboxyle, forcément en bout de chaîne carbonée. Le carbone fonctionnel porte l'indice de position 1, ce qui détermine l'indice de position des ramifications de la chaîne carbonée.
- Le nom est précédé du préfixe « acide ».
- on remplace le « e » de l'alcane correspondant par « oïque »

Exemple

$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \quad \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C} \\ \quad \quad \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{O} \\ \quad \quad \quad \quad \\ \quad \quad \quad \quad \text{O}-\text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} 4 \quad 3 \quad 2 \quad 1 \\ \text{CH}_3-\text{CH}-\text{CH}_2-\text{C} \\ \quad \quad \quad \\ \text{CH}_3 \quad \quad \quad \text{OH} \end{array}$
Acide butanoïque	Acide 3-méthylbutanoïque

1.6- Les esters (R-O-CO-R')

Les esters sont des composés issus de l'estérification (réaction entre un acide carboxylique et un alcool). Ce sont des molécules souvent odorantes.



Nomenclature :

- On cherche le nom de l'acide carboxylique **R - COOH**.
- On supprime le mot acide et on remplace la terminaison **oïque** par la terminaison **oate**
- on ajoute "**de**" que l'on fait suivre du nom du groupe alkyle - **R'**.

Exemple :

$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{C}-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_3 \\ 5 \quad 4 \quad 3 \quad 2 \quad 1 \quad \quad 1 \quad 2 \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{CH}_3-\text{CH}-\text{CH}_2-\text{C} \\ \quad \quad \quad \\ \text{CH}_3 \quad \quad \quad \text{O}-\text{CH}_3 \end{array}$
Pentanoate d'éthyle	3-méthylbutanoate de méthyle

1.7- Les amines (R-NH₂ ; R-NR'-R'')

On appelle **amines** les composés obtenus à partir de la molécule d'ammoniac NH₃, par substitution d'un, de deux ou de trois groupes alkyles à un, deux ou trois atomes d'hydrogène.

1.7.1- Amines primaires (R-NH₂)

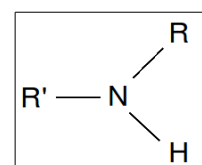
Un seul atome d'hydrogène de la molécule d'ammoniac est substitué par un groupement alkyle

- on recherche la chaîne carbonée la plus longue contenant -NH₂
- on détermine l'indice de position (le plus petit possible) du groupement de l'azote
- la chaîne principale détermine le nom de l'alcane, auquel on enlève « e » final pour le remplacer par « amine » précédé de son indice de position

$\begin{array}{c} \text{CH}_3 - \text{CH} - \text{CH}_2 - \text{CH}_3 \\ \\ \text{NH}_2 \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{NH}_2 \\ \\ \text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 \end{array}$
butan-2-amine	propanamine

1.7.2- Les amines secondaires (R-NH-R')

Deux atomes d'hydrogène de la molécule d'ammoniac sont substitués par des groupements alkyles.



Nomenclature :

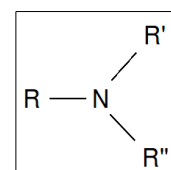
- on recherche la chaîne carbonée la plus longue, sur laquelle est fixée l'azote. Cela détermine l'alcane correspondant auquel on ajoute à la place du « e » final « amine » précédé de l'indice de position de l'azote sur la chaîne: *alcan-x-amine*

- L'autre groupement alkyle est ajouté en préfixe précédé de « N- »

$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 - \text{CH} - \text{N} \\ \quad \quad \quad \diagup \quad \diagdown \\ \text{CH}_3 \quad \quad \quad \text{CH}_3 \quad \quad \quad \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 - \text{N} \\ \quad \quad \quad \diagup \quad \diagdown \\ \quad \quad \quad \text{H} \end{array}$
N-méthylpropan-2-amine	N-méthylméthanamine

1.7.3- Les amines tertiaires (R-NR'-R'')

Les trois atomes d'hydrogène de la molécule d'ammoniac sont substitués par des groupements alkyles.



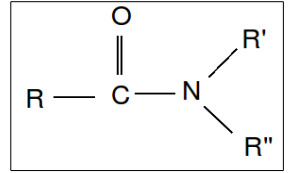
Nomenclature :

- on cherche le groupement alkyle le plus long. sur lequel est fixé l'azote. Cela détermine l'alcane correspondant auquel on ajoute à la place du « e » final « amine » précédé de l'indice de position de l'azote sur la chaîne.
- Les deux autres groupes alkyles sont ajoutés en préfixe précédés de « N- », par ordre alphabétique.
- Si les substituants alkyles sont identiques on les nomme « N,N-di.....yl... »

$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_2 - \text{CH}_3 \\ \quad \quad \quad \diagup \quad \diagdown \\ \text{CH}_3 - \text{N} \quad \quad \quad \text{CH}_2 - \text{CH}_3 \\ \quad \quad \quad \diagdown \quad \diagup \\ \text{CH}_2 - \text{CH}_3 \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_2 - \text{CH}_3 \\ \quad \quad \quad \diagup \quad \diagdown \\ \text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{N} \quad \quad \quad \text{CH}_2 - \text{CH}_3 \\ \quad \quad \quad \diagdown \quad \diagup \\ \text{CH}_2 - \text{CH}_3 \end{array}$
N-éthyl-N-méthylpropan-2-amine	N,N-diéthylpropan-2-amine

1.8- Les amides (R-CO-NR'-R'')

Les amides sont caractérisés par la présence d'un carbonyle (C=O) lié à un atome d'azote



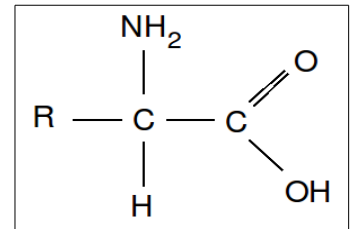
Nomenclature

- l'alcane est déterminé par la chaîne carbonée comportant le groupe carbonyle. Celui-ci donne le nom de l'alkanamide (élision de « e » final de l'alcane, remplacé par « amide »)
- les groupes alkyles de l'azote sont nommés par ordre alphabétique précédé de « N- »

$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{NH}_2$	$\text{H}_5\text{C}_2 \quad \text{O}$ $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}-\overset{\parallel}{\text{C}}-\text{NH}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$
propanamide	N-butyl-2-méthylbutanamide

1.9- Les acides α -aminés (R-CO-CN H_2 -R')

Les acides aminés (ou aminoacides) sont une classe de composés chimiques possédant deux groupes fonctionnels : à la fois un groupe carboxyle (-COOH) et un groupe amine (-NH₂). Parmi ceux-ci, les acides α -aminés se définissent par le fait que leur groupe amine est lié à l'atome de carbone adjacent au groupe acide carboxylique (le carbone α)



$\begin{array}{c} \text{NH}_2 \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{C} \\ \quad \parallel \\ \text{H} \quad \text{O} \\ \quad \quad \backslash \\ \quad \quad \text{OH} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{NH}_2 \\ \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{C} \\ \quad \parallel \\ \text{H} \quad \text{O} \\ \quad \quad \backslash \\ \quad \quad \text{OH} \end{array}$
le plus simple des acides α -aminés : la glycine acide aminoacétique ou acide 2-aminoéthanoïque	Alanine acide 2-aminopropanoïque

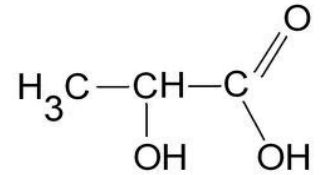
2- Comment représenter une molécule ?

2.1- Formule développée

On montre toutes les liaisons de covalence. Contrairement au modèle de Lewis, on n'indique pas les doublets non liants.

2.2- Formule semi-développée

On indique les liaisons de covalence entre carbone. On n'indique pas les liaisons C-H, ni les liaisons O-H.



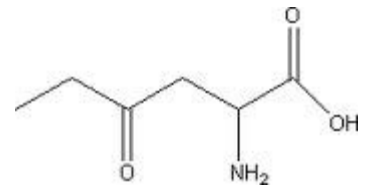
2.3- Formule topologique

Les atomes d'hydrogène ne sont pas indiqués.

Un trait représente une liaison C-C. Pour plus de lisibilité, on incline deux liaisons C-C successives

Un double trait représente une liaison double entre deux atomes de carbone

On indique les hétéroatomes (atomes autres qu'hydrogène et carbone)



2.4- Représentation de Cram

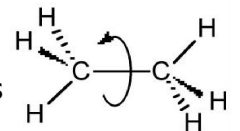
Représentation en 3D d'une molécule organique. Généralement utilisée autour d'un carbone tétraédrique (lié à 4 groupement d'atomes distincts)

- on indique les atomes de carbone, d'hydrogène et les autres atomes.
- Un trait représente une liaison dans le plan.
- Un triangle représente une liaison en avant du plan.
- un triangle en pointillé représente une liaison en arrière du plan.

<p>Carbone tétraédral représentation spatiale selon Cram</p>	<p>Représentation spatiale de la molécule de méthane</p>	<p>propane</p>	<p>éthanol</p>
--	--	----------------	----------------

3- Isomères de conformation

On appelle conformations d'une molécule, les différentes structures spatiales qu'elle peut prendre par suite de rotations autour de ses liaisons simples.



Une conformation la plus stable d'une molécule est celle qui correspond à l'énergie minimale. C'est à dire, celle pour laquelle les interactions répulsives entre les doublets de liaisons et les interactions stériques, dues à l'encombrement des gros substituants sont les plus faibles.

Exemple pour l'éthane (C_2H_6)

