



COURS

Chapitre 6 « Structure des entités organiques »

Les compétences à acquérir...

- Formules brutes et semi développées.
- Squelettes carbonés saturés, groupes caractéristiques et familles fonctionnelles.
- Identifier, à partir d'une formule semi-développée, les groupes caractéristiques associés aux familles de composés : alcool, aldéhyde, cétone et acide carboxylique.
- Justifier le nom associé à la formule semi-développée de molécules simples possédant un seul groupe caractéristique et inversement.
- Exploiter, à partir de valeurs de référence, un spectre d'absorption infrarouge.



Utiliser des modèles moléculaires ou des logiciels pour visualiser la géométrie de molécules organiques.

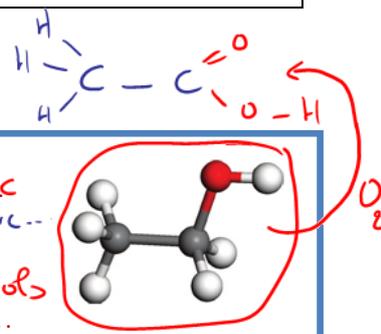
- Identification des groupes caractéristiques par spectroscopie infrarouge.

I- Représenter une molécule et nomenclature et des alcanes:**1- Représentation d'une molécule :**

Une molécule est formée par un assemblage d'atomes. Elle est électriquement neutre.

En général, les molécules de la chimie organique comportent des atomes de **carbone C**, **hydrogène H** et, en nombre réduit, des atomes **oxygène O**, **azote N**, **chlore Cl**, etc.

Cette année nous allons étudier des quelques familles de molécules : **alcanes**, **alcools**, **aldéhydes**, **cétones**, **acides carboxyliques**.



Il existe plusieurs manières de représenter une molécule, certaines permettant de visualiser ces liaisons internes.

Formule brute	Formule développée	Formule semi-développée
C_2H_6O		CH_3-CH_2-OH
La formule brute d'une molécule donne sa composition en précisant par des indices le nombre de chacun des atomes qui la constituent.	La formule développée d'une molécule permet de représenter <u>toutes</u> les liaisons chimiques entre les atomes qui la constituent.	Dans la formule semi-développée d'une molécule, les liaisons mettant en jeu l'atome d'hydrogène ne figurent pas

Remarques :

- Les atomes de carbone et d'hydrogène sont écrits en premier dans cet ordre, suivis des autres atomes dans l'ordre alphabétique
- Un atome de carbone forme toujours **4** liaisons ; un atome d'hydrogène toujours **1** ; l'atome d'oxygène **2** liaisons, l'azote **3** liaisons

2- Squelette carboné saturé :

Les atomes de carbone sont liés les uns aux autres pour former des **chaînes carbonées**, qui peuvent être **linéaires**, **ramifiées** ou **cycliques**.

Ces chaînes constituent le **squelette** des molécules organiques.

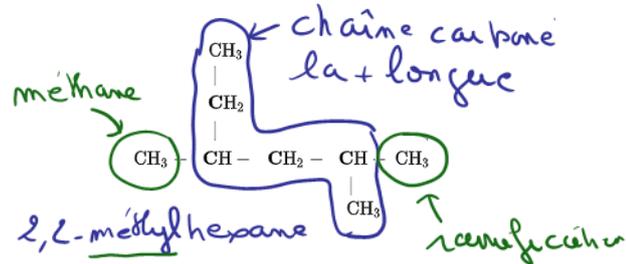
Le squelette d'une molécule est **saturé** si toutes les liaisons chimiques entre atomes de carbone sont des **liaisons simples**.

C_4H_{10} 		
Chaîne linéaire	Chaîne ramifiée	Chaîne cyclique

Remarque : La chaîne carbonée la plus longue ou chaîne principale

Sur une molécule, il faudra repérer la chaîne carbonée **la + longue** et les ramifications.

Chaîne carbonée la + longue est composée de 6 atomes de C
 Combien de ramifications? 2



3- Nomenclature des alcanes :

Les alcanes (...hydrocarbures...) sont des molécules composées de carbone et d'hydrogène à chaîne linéaire ou ramifiée ou cyclique dont la formule brute est $C_n H_{2n+2}$

Ces ne comportent que des liaisons simples C - C et C - H.

Leur nom doit être connu car on va utiliser l'utiliser pour nommer les molécules organiques (en gras) pour nommer les composés oxygénés. Les 4 premiers possèdent un nom d'usage qui est à connaître :

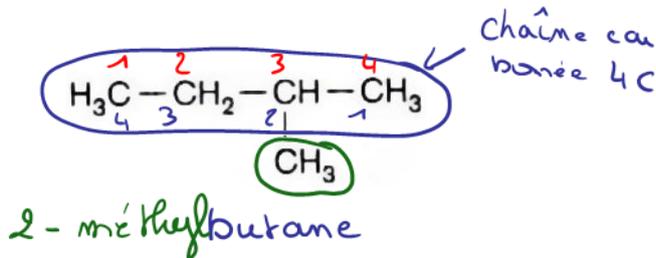
CH_4 méthane	C_2H_6 éthane	C_3H_8 propane	C_4H_{10} butane	C_5H_{12} pentane	♡ chaîne carbonée
-------------------	--------------------	---------------------	-----------------------	------------------------	-------------------

hexane C_6H_{14}	heptane C_7H_{16}	octane C_8H_{18}	nonane C_9H_{20}	décane $C_{10}H_{22}$	undécane $C_{11}H_{24}$	dodécane $C_{12}H_{26}$
-----------------------	------------------------	-----------------------	-----------------------	--------------------------	----------------------------	----------------------------

Groupelements alkyle notés - R sont des ramifications de formule

Exemples : CH_3- : méthyl
 CH_3-CH_2- : éthyl
 $CH_3-CH_2-CH_2-$: propyl

Exemples :



Nomenclature des alcanes :

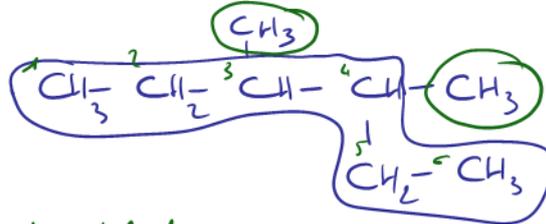
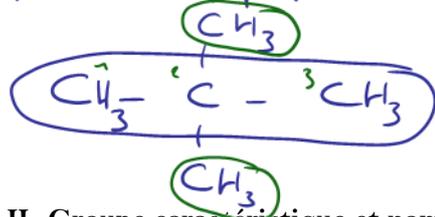
- Repérer la chaîne carbonée la plus longue.
- Le nom sera basé sur le nombre d'atomes de carbone de cette chaîne : ...ane
- Repérer d'éventuelles ramifications
- Numérotter la chaîne de façon à ce que la ramification ait le numéro le plus petit.
- ...

--	--	--

Complément nomenclature des alcanes :

• 2 ramifications (identiques) : di
 • 3 : tri
 • Les ramifications sont classées par l'ordre d.

2,2-diméthylpropane



3,4-diméthylhexane

II- Groupe caractéristique et nomenclature de certaines familles de composés oxygénés

Un groupe **caractéristique** est un groupe d'atomes qui donne des propriétés spécifiques aux molécules qui le possèdent. On dit que ces molécules forment une **..famille..chimique**

2-Famille des alcools:

Un **alcool** est un composé organique possédant un **groupe caractéristique** **-OH**, appelé **groupe...hydroxyle**, relié à un atome de carbone tétragonal

La formule générale de alcool est **R-OH** ou **C_mH_{2m+1}-OH**

Remarque: un atome de carbone tétragonal réalise toujours 4 liaisons covalentes simples.

Le **nom d'un alcool** dérive de celui de l'alcane correspondant, en remplaçant le "e" final par la terminaison "**ol**", précédée du plus petit indice de position du groupe hydroxyle (-OH) sur la chaîne carbonée principale.

Exemples :

pentan-2-ol	3-méthylpentan-2-ol	3,3-diméthylbutan-1-ol 2,2-diméthylbutan-4-ol

Complément nomenclature des alcools :

On numérote la chaîne carbonée de façon à ce que le numéro de -OH soit le plus petit possible.

3- Famille des aldéhydes et des cétones :

Aldéhydes et cétones sont des composés organiques possédant un **groupe carbonyle** **C=O** relié respectivement:

- à zéro ou un atome de carbone (aldéhyde) en bout de chaîne	Formule générale des aldéhydes $R - C \begin{matrix} =O \\ \backslash \\ H \end{matrix}$
- deux atomes de carbone (cétone)	Formule générale des cétones $R - C \begin{matrix} =O \\ \\ O \end{matrix} - R'$

- Le **nom d'un aldéhyde** dérive de celui de l'alcane correspondant, en remplaçant le "**e**" final par la terminaison "**al**...".

acide 2-méthylpropanoïque Acide 2-méthylbutanoïque acide 2-éthyl-4-méthylhexanoïque

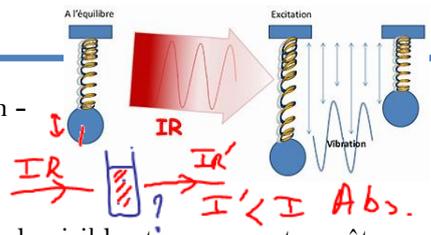
Complément nomenclature des acides carboxyliques :

Toujours en bout de chaîne

III- Quels sont les renseignements fournis un spectre infra rouge ?

1- Principe :

La spectroscopie infrarouge (IR) est dans son principe identique à la spectroscopie UV-visible. Le domaine de longueur d'onde utilisé est (2500 nm - 25000 nm).



Des ondes électromagnétiques ^{lumière} OEM sont envoyées sur la matière et on regarde celles qui sont transmises et celles qui sont absorbées.

Les OEM dans l'infrarouge possèdent des énergies plus faibles que celles dans le visible et ne peuvent pas être absorbées par les atomes.

Par contre, dans les longueurs choisies, les OEM ont une énergie suffisante pour mettre en « vibration » les liaisons de la molécule : Une liaison C=O n'absorbe pas la même énergie (longueurs d'onde différentes) qu'une liaison C-O ou C-N

Pour cette raison la spectroscopie IR permet de repérer les liaisons entre les atomes... et d'en déduire les groupes caractéristiques présents dans la molécule.

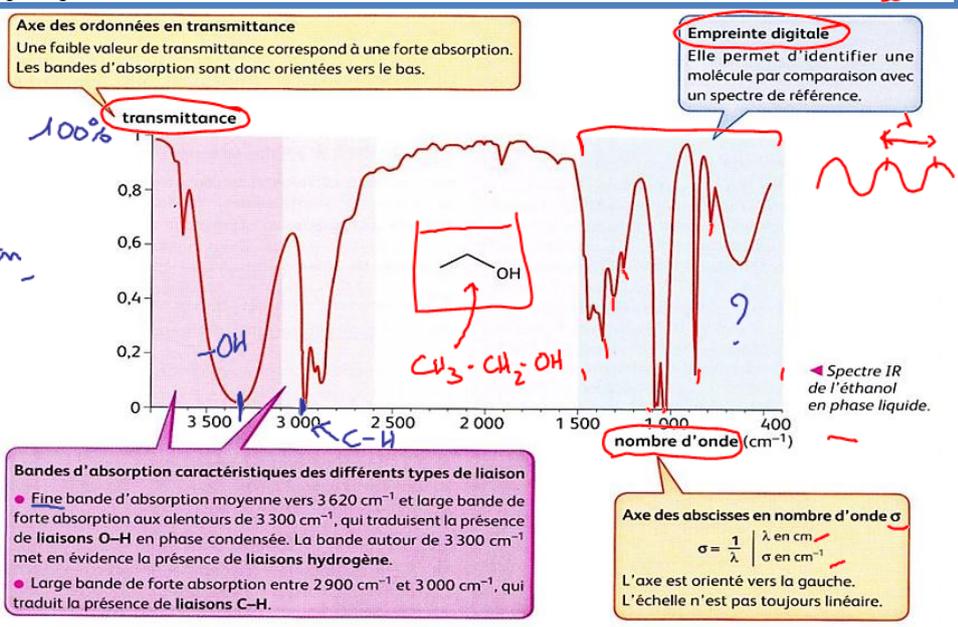
2- Interprétation d'un spectre IR :

En ordonnée figure la transmittance (transmettre)

Une transmittance de 100 % signifie qu'il n'y a pas d'absorption

Si la transmittance diminue alors l'absorption augmente... et traduit la présence d'une liaison particulière.

C'est la raison pour laquelle les bandes d'absorption pointent vers le bas



Bandes d'absorption caractéristiques des différents types de liaison

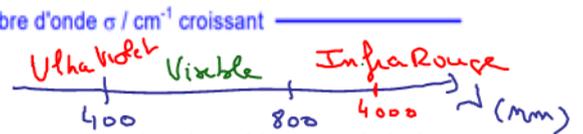
- Fine bande d'absorption moyenne vers 3620 cm⁻¹ et large bande de forte absorption aux alentours de 3300 cm⁻¹, qui traduisent la présence de liaisons O-H en phase condensée. La bande autour de 3300 cm⁻¹ met en évidence la présence de liaisons hydrogène.
- Large bande de forte absorption entre 2900 cm⁻¹ et 3000 cm⁻¹, qui traduit la présence de liaisons C-H.

Axe des abscisses en nombre d'onde σ

$$\sigma = \frac{1}{\lambda} \quad \lambda \text{ en cm}$$

$$\sigma \text{ en cm}^{-1}$$

L'axe est orienté vers la gauche. L'échelle n'est pas toujours linéaire.



En abscisse,

La grandeur représentée en abscisses est le nombre d'onde noté σ (sigma...) qui est l'inverse de la longueur d'onde λ :

$$\sigma = \frac{1}{\lambda}$$

Premons $\sigma = 2500 \text{ cm}^{-1} \Rightarrow \lambda = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{2500} = 4,00 \cdot 10^{-4} \text{ cm} = 4,00 \cdot 10^{-4} \times 10^7 \text{ nm} = 4,00 \cdot 10^{-6} \times 10^9 \text{ nm} = 4000 \text{ nm}$

On distingue deux domaines sur un spectre :

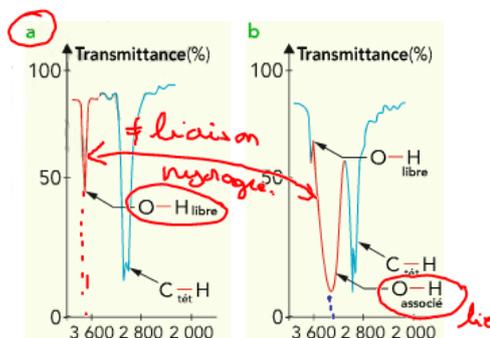
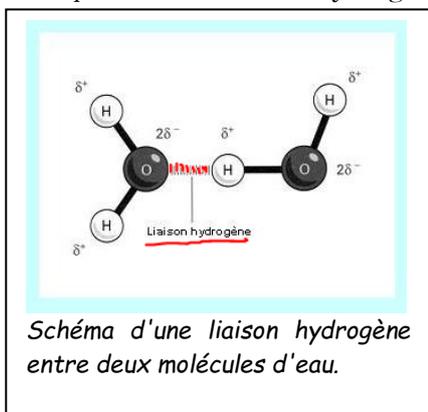
- La région pour faibles valeurs de σ (<1500 cm⁻¹), qui est caractéristique du composé et des fonctions présentes est appelée "empreinte digitale". Dans cette zone, il est en général difficile d'attribuer les pics observés à des groupes d'atomes. Cette zone permettra de comparer le spectre avec un ou des spectres de référence.

- La région qui correspond aux grandes valeurs de σ (4000-1500 cm⁻¹) où apparaissent les bandes caractéristiques de certaines liaisons, par exemple C=O, C=C, C-H, O-H, N-H...qui permet l'identification de groupes caractéristiques. Dans cette zone chaque bande d'absorption dont le nombre d'onde se trouve dans les plages ci-dessous et dans des tables de référence est caractéristique d'un type de liaison chimique.

liaison	nombre d'onde (cm ⁻¹)	intensité	liaison	nombre d'onde (cm ⁻¹)	intensité
O-H libre	3580 à 3650	F, fine	C=O acide	1680 à 1710	F
O-H lié (associé) Eau, H	3200 à 3400	F, large	C=O aldéhyde et cétone	1705-1725	F
C _{tri} -H (carbone trigonal)	3000 à 3100	m	C _{tét} -H	1415 à 1470	F
C _{tét} -H (carbone tétragonal)	2800 à 3000	F	C-O	1050 à 1450	F
C=C	1625 à 1685	F	C-C	1000-1250	F
			C≡N (liaison triple)	2 250	Forte, fine

3- Particularité de la liaison hydrogène.

La présence de liaisons hydrogène O-H, influence les positions et l'allure des bandes d'absorption.

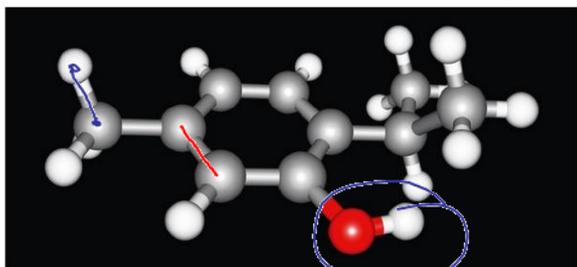


Sur le spectre a, on observe un pic d'absorption au nombre d'onde $\sigma = 3600 \text{ cm}^{-1}$. Il est *fin* et *faible*. D'après le tableau précédent, ce pic est donc dû à une liaison O-H ne présentant pas de liaison *hydrogène*.

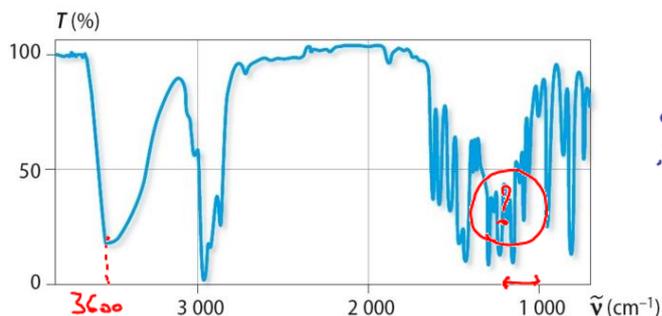
Sur le spectre b, on observe un pic *large* de *forte* intensité vers 3300 cm^{-1} . D'après le tableau précédent, ce pic est donc dû à une liaison O-H *liée*.

4- Un exemple :

Utilisé en cuisine comme aromate, le thym est aussi une plante médicinale aux vertus antiseptiques. Une des molécules constituant son huile essentielle est le thymol, dont la représentation se trouve ci-après :



1. Quel groupe d'atomes caractéristique comportant de l'oxygène reconnaît-on dans sa représentation ?
2. À quelle famille chimique correspond-il ?
3. Le spectre infrarouge du thymol pur est donné ci-dessous :



En analysant ce spectre, indiquer la bande caractéristique de la fonction déterminée à la question 2.

1) Cette molécule comporte le groupe hydroxyle caractéristique
2) de la famille des alcools

3) Sur le spectre, on observe un pic d'absorption fin et de forte intensité à un nombre d'onde $\sigma = 2900 \text{ cm}^{-1}$. D'après la Table IR, cela met en évidence la liaison C-H. Sur le spectre, on observe un pic d'absorption large et de forte intensité à un nombre d'onde $\sigma = 3600 \text{ cm}^{-1}$. D'après la Table IR, cela met en évidence la liaison O-H liée.