

Constitution, configuration et conformation

I – Les différentes formes du squelette carboné :

1) Chaîne carbonée linéaire :

2) Chaîne carbonée cyclique :

3) Chaîne carbonée ramifiée :

- Hydrocarbure saturée avec une liaisons carbone / carbone simple (suffixe ane).
- Hydrocarbure insaturée avec une liaison double carbone / carbone (suffixe ène)
- Hydrocarbure insaturée avec une liaison triple carbone / carbone (suffixe yne)

Calcul du nombre d'insaturation :

Pour une molécule $C_xH_yN_zO_t$, il y a $x - \frac{y}{2} + \frac{z}{2} + 1$ insaturation (x représente le nombre d'atome tétravalent, y le nombre d'atome monovalent et z le nombre d'atome trivalent).

II – Diverses formules et écritures des composés organiques :

1) Formule brut :

Elle indique la nature et le nombre des atomes dans la molécule.

2) Formule semi - développée :

On ne visualise pas les doublets liants des hydrogènes.

3) Formule développée :

On représente tous les atomes et tous les doublets liants.

4) Ecriture simplifiée :

On symbolise les cycles carbonés par des polygones.

5) Ecriture topologique :

Les chaînes carbonés sont disposés en zigzag et sont représentés par des lignes brisées. Par convention, il est sous-entendu qu'un atome de carbone est placé au sommet de chaque segment et porte autant d'atomes d'hydrogènes qu'il est nécessaire pour respecter la règle de l'octet. Tout autre atome que le carbone et l'hydrogène figure par son symbole.

6) Ecriture de Lewis :

On représente tous les atomes de la molécule, tous les doublets liants et non liants.

III – Représentation des molécules :

1) Cram ou coin volant :

Pour un carbone tétraédrique, les traits représentent les liaisons dans le plan, les triangles noirs les liaisons en avant du plan et les triangles en traits les liaisons en arrière du plan.

2) Perspective :

Deux atomes de carbone sont reliés de biais entre eux.

3) Newman :

On observe une molécule suivant un axe reliant deux carbones.

Le carbone de devant est symbolisé par un point à l'intersection de trois traits des liaisons.

Le carbone de derrière est situé au centre du cercle sur lequel viennent se fixer les traits de liaisons.

4) Fischer :

Les atomes ou groupements situés en avant du carbone sont reliés par un trait horizontal.

Ceux situés en arrière du carbone sont reliés par un trait vertical.

IV – Bases de la nomenclature :

1) Composition du nom d'un hydrocarbure :

Préfixe : ramification (par exemple, les groupements méthyles).

Radical : elle indique la longueur de la chaîne carbonée.

Suffixe 1 : il donne la saturation (ane, ène ou yne).

Suffixe 2 : il indique la fonction de l'hydrocarbure (par exemple, ol pour les alcools).

2) Distinction des stéréoisomères :

a) Z et E :

- Pour une molécule éthylénique (liaison double carbone – carbone), on classe les groupements d'un carbone par leur numéro atomique.
- Si les deux groupes sont du même côté de la double liaison, la molécule sera appelée Z (de l'allemand « zusammen », ensemble).
- Dans le cas contraire, elle sera appelée E (de l'allemand « entgegen », opposé).

b) Cis et Trans :

- Pour une molécule cyclique, on place le cycle selon un plan horizontal.
- Si 2 groupements sont du même côté, la molécule est dite Cis.
- A l'inverse, la molécule sera dite Trans.

c) R et S :

- Elle permet de distinguer les stéréoisomères de configuration portant un carbone asymétrique.
- Elle se base sur la règle CIP (Cahn, Ingold et Prelog) : on classe les groupements par ordre décroissant du numéro atomique (1-2-3-4).
- On regarde ensuite dans la direction Carbone – groupe 4 qui s'éloigne, et on projette dans un plan.
- Si l'on passe de 1 à 2, puis à 3 dans le sens anti – trigo (sens horaire), la configuration est dite R (de Rectus, droit).
- Si le sens de passage est trigo (anti horaire), la configuration est dite S (de Sinister : gauche).

V - Isomérisation de constitution (plan) :

Cela définit la nature et l'ordre des liaisons qui relie les atomes entre eux d'une molécule de formule brute donnée.

Les isomères de constitution ont une formule brute identique mais des représentations semi - développées ou développées différentes.

1) Isomérisation de chaîne ou de squelette :

La longueur de la chaîne carbonée est différente selon l'isomère.

2) Isomérisation de positions :

Les radicaux sont placés à des endroits différents.

3) Isomérisation de fonction :

Ils présentent des groupes fonctionnels différents (par exemple, aldéhyde et cétone).

VI – Isomérisation de configuration (espace) :

Deux isomères ont même formule plane (même formule brute et enchaînement des atomes dans le même ordre) mais ont une disposition spatiale de leurs atomes différentes (caractérisé par des distances différentes entre atomes).

1) Stéréoisomères de conformation :

On passe de l'un d'entre eux aux autres par rotation autour d'une liaison simple. Pour les étudier, on utilise la projection de Newman.

On distingue les conformères éclipsés (plus grande énergie mais moins stable) et décalés (plus petite énergie mais plus stable).

2) Stéréoisomères de configuration :

On passe de l'un à l'autre en rompant puis reformant deux liaisons.

a) Enantiomères :

Deux stéréoisomères qui sont images l'un de l'autre dans un miroir.

b) Diastéréoisomères :

Deux stéréoisomères qui ne sont pas images l'un de l'autre dans un miroir.

c) Chiralité :

Deux énantiomères non superposables sont dites chirales. Pour cela, il faut que la molécule ne présente ni plan, ni centre de symétrie.

d) Carbone asymétrique (ou stéréogène) :

C'est un carbone tétraédrique (lié à 4 atomes ou groupements d'atomes) dont les quatre substituants sont différents. On le note généralement C*.

VII – Etat d'hybridation :

L'hybridation est une opération mathématique permettant de passer d'une fonction d'onde susceptible de décrire l'atome isolé à celle de l'atome entrant en combinaison.

Une hybridation entre des orbitales appartenant à des niveaux voisins possédant des énergies peu différentes correspond à une réorganisation qui conduit à une nouvelle distribution électronique et permet la formation de liaisons équivalente autour d'un atome donné.

Hybridation sp^3 : géométrie tétraédrique.

Hybridation sp^2 : géométrie triangulaire.

Hybridation sp^1 : géométrie linéaire.