



Fiche de synthèse n° 1.c

Formules chimiques et isométrie de constitution

I. Différentes formules chimiques

1. La formule brute

La **formule brute** nous renseigne sur la nature et le nombre des atomes qui constituent la molécule. Le nombre de chacun d'eux est porté en indice à droite du symbole de l'élément.

S'il s'agit d'un ion, la charge globale de l'édifice est inscrite en exposant à droite.

Exemples :

- Une molécule de propane comporte **3 atomes de carbone** et **8 atomes d'hydrogène**, on la note : **C₃H₈**.
- La propanone a pour formule brute C₃H₆O, ce qui signifie qu'elle comporte 3 atomes de carbone, 6 atomes d'hydrogène et 1 atome d'oxygène.
- L'ion hydroxyde HO⁻ est constitué d'1 atome d'hydrogène et d'1 atome d'oxygène. L'ensemble de l'édifice porte **1 charge globale négative**.

La formule brute n'apporte toutefois aucun renseignement sur la façon dont les atomes sont reliés les uns par rapport aux autres...

2. Les formules structurales

Contrairement à la **formule brute**, les **formules structurales** nous expliquent comment les atomes sont reliés les uns aux autres au sein d'une molécule ou d'un ion.

a. La formule développée

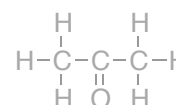
Dans la **formule développée**, toutes les liaisons (simples ou multiples) entre les différents atomes sont représentées.

Exemples :

- Formule développée du propane (de formule brute C₃H₈) :
$$\begin{array}{ccccc} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \\ & | & | & | & \\ \text{H} & - \text{C} & - \text{C} & - \text{C} & - \text{H} \\ & | & | & | & \\ & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \end{array}$$
- Formule développée de la propanone (de formule brute C₃H₆O) :
$$\begin{array}{ccccc} & \text{H} & \text{O} & \text{H} & \\ & | & || & | & \\ \text{H} & - \text{C} & - \text{C} & - \text{C} & - \text{H} \\ & | & & | & \\ & \text{H} & & \text{H} & \end{array}$$

Toutes les liaisons sont représentées et on observe bien la double liaison entre le carbone et l'oxygène.

Remarque : La double liaison carbone = oxygène pourrait également être représentée vers le bas.
Cela ne modifierait en rien la validité de la formule !



Puisque l'on représente l'ensemble des atomes et des liaisons, l'écriture des formules développées peut vite s'avérer longue et fastidieuse.



b. La formule semi-développée

Dans la **formule semi-développée**, les liaisons mettant en jeu un atome d'hydrogène ne sont pas représentées pour plus de lisibilité. Toutes les autres liaisons sont représentées.

Exemples :

- Formule semi-développée du propane : $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_3$

Seules les liaisons carbone – carbone sont représentées. Pour bien visualiser que les atomes de carbone aux extrémités sont liés à **3 atomes d'hydrogène**, on inscrit le chiffre **3** en bas à droite du symbole de l'hydrogène. Le carbone central est quant à lui lié à **2 atomes d'hydrogène**.

- Formule semi-développée de la propanone : $\text{H}_3\text{C}-\overset{\text{O}}{\underset{\text{||}}{\text{C}}}-\text{CH}_3$

Remarque : L'écriture $\text{H}_3\text{C}-\text{C}$ permet de mieux visualiser la liaison carbone – carbone entre le premier atome de carbone et le second.

La formule suivante reste néanmoins correcte : $\text{CH}_3-\overset{\text{O}}{\underset{\text{||}}{\text{C}}}-\text{CH}_3$

Bien que plus pratique que l'écriture des formules développées, la représentation des formules semi-développées peut atteindre ses limites dans le cas des cycles et des molécules volumineuses.

c. La représentation topologique

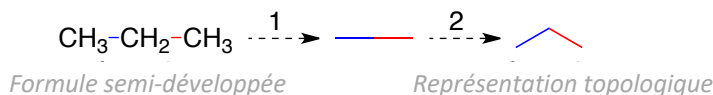
C'est celle que l'on utilise le plus largement en chimie organique aujourd'hui !

Pour obtenir la **représentation topologique** depuis la formule semi-développée :

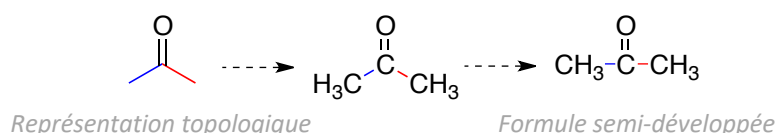
- on retire le symbole des atomes de carbone et on ôte **les atomes d'hydrogène portés par les atomes de carbone** ;
- on représente les liaisons C-C par des lignes brisées ;
- on respecte la multiplicité des liaisons.

Exemples :

- La représentation topologique du propane s'obtient :
 - 1 : En retirant le symbole des atomes de carbone et les atomes d'hydrogène portés par les atomes de carbone ;
 - 2 : En représentant les deux liaisons carbone – carbone par des lignes brisées, afin de bien les distinguer lorsque l'on n'utilise qu'une seule couleur !



- Pour obtenir la formule semi-développée de la propanone à partir de sa représentation topologique, on ajoute le symbole des atomes de carbone ainsi que ceux des atomes d'hydrogène portés par les atomes de carbone :

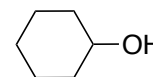


Remarque : Il a été vu que dans une molécule, un atome de carbone participe à 4 liaisons. Il est donc aisé d'en déduire le nombre d'atomes d'hydrogène liés à un atome de carbone à partir de sa représentation topologique. Dans l'exemple de la propanone, les atomes de carbone aux extrémités sont engagés chacun dans une unique liaison carbone – carbone, il manque donc 3 atomes d'hydrogène pour parvenir aux 4 liaisons auxquelles le carbone participe.



Le carbone central participe, quant à lui, à une liaison double avec l'oxygène et à deux liaisons simples carbone-carbone. Il n'est donc pas nécessaire d'ajouter des atomes d'hydrogène.

- La molécule de cyclohexanol est une molécule cyclique. Sa représentation topologique est la suivante :

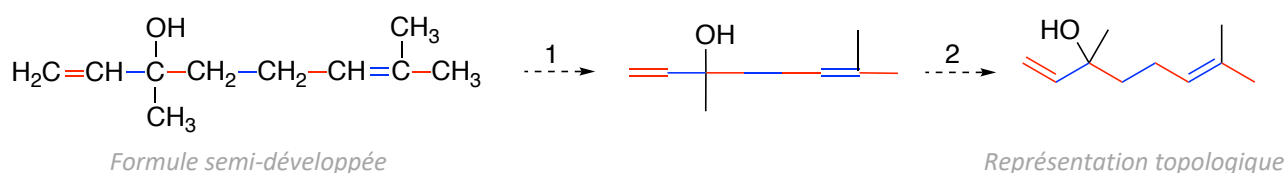


Remarque : On ne supprime pas l'atome d'hydrogène lié à l'oxygène, mais uniquement ceux liés aux atomes de carbone !

Un exemple plus complexe :

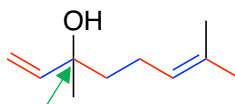
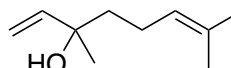
Le linalol est une molécule à l'odeur florale. On le retrouve dans une majorité d'huiles essentielles, notamment celle de la lavande.

Pour obtenir sa représentation topologique, on procède exactement de la même façon qu'avec le propane :



Remarques :

- Cette représentation topologique serait également acceptée :
- Nous aurions pu également songer à la représentation ci-dessous. Cependant, elle rend moins compte de la géométrie tétraédrique autour de l'atome de carbone que celle représentée dans l'exemple.



II. Groupes caractéristiques : prérequis à la notion d'isomérisation de constitution

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

GRUPE CARACTERISTIQUE	FAMILLE	FORMULE DE LA FAMILLE
Groupe hydroxyle —OH	ALCOOL	R—OH
Groupe carbonyle $\begin{array}{c} \text{—C—} \\ \parallel \\ \text{O} \end{array}$	ALDÉHYDE	$\text{R}-\begin{array}{c} \text{C}-\text{H} \\ \parallel \\ \text{O} \end{array}$
	CÉTONE	$\text{R}_1-\begin{array}{c} \text{C}-\text{R}_2 \\ \parallel \\ \text{O} \end{array}$
Groupe carboxyle $\begin{array}{c} \text{—C—OH} \\ \parallel \\ \text{O} \end{array}$	ACIDE CARBOXYLIQUE	$\text{R}-\begin{array}{c} \text{C}-\text{OH} \\ \parallel \\ \text{O} \end{array}$
Groupe amino —NH ₂	AMINE	R—NH ₂

*R, R₁ et R₂ sont des groupes alkyles.



III. Isométrie de constitution

1. Définition

Les **isomères de constitution** sont des molécules qui possèdent la même formule brute mais qui ont des formules développées (et donc semi-développées) différentes.

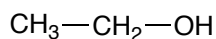
Les isomères de constitution ont des propriétés physiques, chimiques et biologiques différentes. Parmi-eux, on distingue les isomères de fonction, les isomères de position et les isomères de chaîne.

2. Isométrie de fonction

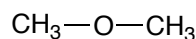
Les **isomères de fonction** sont des isomères de constitution qui présentent des groupes caractéristiques différents.

Exemple :

L'éthanol et le méthoxyméthane ont la même formule brute C_2H_6O , mais des groupes caractéristiques différents (groupe hydroxyle pour l'éthanol, éther pour le méthoxyméthane).



L'éthanol



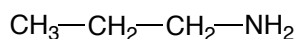
Le méthoxyméthane

3. Isométrie de position

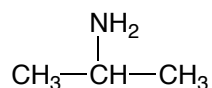
Les **isomères de position** sont des isomères de constitution qui appartiennent à la même famille de composés chimiques, mais dont le groupe caractéristique est porté par des atomes de carbone différents de la chaîne carbonée.

Exemple :

Le propan-1-amine et le propan-2-amine ont la même formule brute C_3H_9N , le même groupe caractéristique amino, mais la position de ce dernier sur la chaîne carbonée diffère.



Le propan-1-amine



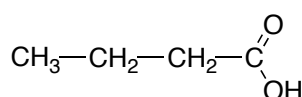
Le propan-2-amine

4. Isométrie de chaîne

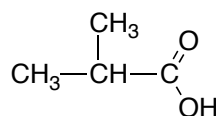
Les **isomères de chaîne** sont des isomères de constitution qui ne possèdent pas la même chaîne carbonée.

Exemple :

L'acide butanoïque et l'acide 2-méthylpropanoïque ont la même formule brute $C_4H_8O_2$, le même groupe caractéristique carboxyle positionné en début de chaîne, mais une chaîne carbonée différente : l'une est linéaire (celle de l'acide butanoïque) alors que l'autre comporte une ramification (celle de l'acide 2-méthylpropanoïque).



L'acide butanoïque



L'acide 2-méthylpropanoïque