



Molécules organiques : squelettes, groupes et nomenclature

COURS • C09 • PREMIÈRE

Spécialité de première, programme officiel. Cours original rédigé avec une IA. Le cours de ton enseignant fait foi.

Sommaire du cours

Ce que tu dois savoir faire	1
Cours	1
Exemples résolus	8
Méthodes et pièges	9
Vers le PASS	9
Exercices	9
Corrigés	11

Ce que tu dois savoir faire

- Écrire la formule brute, la formule développée, la formule semi-développée et la formule topologique d'une molécule organique simple, et passer de l'une à l'autre.
- Décrire le squelette carboné d'une molécule : chaîne linéaire, ramifiée ou cyclique, saturée ou insaturée.
- Identifier dans une formule les groupes caractéristiques hydroxyle, carbonyle et carboxyle.
- Relier un groupe caractéristique à une famille fonctionnelle : alcool, aldéhyde, cétone, acide carboxylique.
- Nommer une molécule simple (alcane, alcool, aldéhyde, cétone, acide carboxylique) à partir de sa formule semi-développée, et inversement.
- Reconnaître des isomères (même formule brute, formules développées différentes).
- Exploiter un spectre infrarouge pour identifier des liaisons et en déduire une famille fonctionnelle, à l'aide d'une table de nombres d'onde.
- Convertir un nombre d'onde en longueur d'onde et inversement.

Cours

1. Les molécules organiques

Une **molécule organique** est une molécule construite autour d'un **squelette d'atomes de carbone**, liés entre eux et à des atomes d'hydrogène, auxquels peuvent s'ajouter des atomes d'oxygène, d'azote, d'halogènes, de soufre... La chimie organique doit sa richesse aux propriétés du carbone :

- il possède 4 électrons de valence et forme **4 liaisons covalentes** (il est **tétravalent**) pour respecter la règle de l'octet ;
- il peut se lier à d'autres carbones en chaînes longues, ramifiées ou fermées, par des liaisons simples, doubles ou triples.

Les autres atomes forment habituellement : **1 liaison** pour l'hydrogène et les halogènes, **2 liaisons** pour l'oxygène (avec 2 doublets non liants), **3 liaisons** pour l'azote (avec 1 doublet non liant). Ces valences permettent de vérifier qu'une formule écrite est possible : un carbone à 5 liaisons ou un oxygène à 3 liaisons (sans charge) signale une erreur.

2. Les différentes formules

Une même molécule peut être représentée de plusieurs façons, plus ou moins détaillées. Prenons l'éthanol.

Formule brute. Elle indique la nature et le nombre de chaque atome, sans renseigner sur leur enchaînement : C_2H_6O . On écrit d'abord C, puis H, puis les autres éléments par ordre alphabétique. Elle ne suffit pas à identifier une molécule : C_2H_6O est aussi la formule du méthoxyméthane.

Formule développée. Elle représente **toutes les liaisons** entre tous les atomes, dans le plan. Pour l'éthanol : un premier carbone lié à trois atomes d'hydrogène et au second carbone ; le second carbone lié à deux hydrogènes et à l'oxygène ; l'oxygène lié à un hydrogène. Chaque liaison y est dessinée par un trait (ici 8 traits : 5 C-H, 1 C-C, 1 C-O, 1 O-H). Les doublets non liants ne sont en général pas représentés (sauf dans un schéma de Lewis).

Formule semi-développée. Elle représente toutes les liaisons **sauf celles qui engagent un atome d'hydrogène** ; les hydrogènes sont regroupés à côté de l'atome qui les porte : CH_3-CH_2-OH . Les ramifications s'écrivent entre parenthèses ou au-dessus ou au-dessous de la chaîne, et l'on utilise des écritures condensées admises : -CHO pour le groupe aldéhyde, -COOH pour le groupe carboxyle, -CO- pour un carbonyle en milieu de chaîne.

Formule topologique. C'est l'écriture la plus rapide, employée partout en chimie organique et en biochimie. Ses règles :

- la chaîne carbonée est représentée par une **ligne brisée en zigzag** ;
- **chaque sommet et chaque extrémité de segment** représente un atome de carbone ;
- les atomes d'hydrogène **liés aux carbones ne sont pas représentés** : chaque carbone porte implicitement autant d'H qu'il faut pour avoir 4 liaisons ;
- les atomes autres que C et H (O, N, Cl...) sont **écrits explicitement**, avec les hydrogènes qu'ils portent (on écrit OH, NH_2) ;
- une liaison double est représentée par deux traits parallèles, une liaison triple par trois.

Pour l'éthanol, la formule topologique est un segment unique (deux extrémités, donc deux carbones) prolongé par un trait vers OH. Pour le butane, c'est un zigzag de 3 segments (4 carbones). Pour le cyclohexane C_6H_{12} , c'est un hexagone régulier.

Lire une formule topologique

1. Compter les sommets et les extrémités : ce sont les carbones •
2. Compléter chaque carbone par des H jusqu'à 4 liaisons •
3. Ajouter les hétéroatomes écrits et leurs H •
4. Écrire la formule brute

Isomérisation. Deux molécules qui ont la **même formule brute** mais des **formules développées différentes** sont des **isomères**. Elles ont des propriétés différentes. Exemples : l'éthanol $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$ et le méthoxyméthane $\text{CH}_3\text{-O-CH}_3$ ($\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$) ; le butane $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_3$ et le méthylpropane $\text{CH}_3\text{-CH(CH}_3\text{)-CH}_3$ (C_4H_{10}) ; le propanal $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CHO}$ et la propanone $\text{CH}_3\text{-CO-CH}_3$ ($\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$).

3. Le squelette carboné

Le **squelette carboné** est l'enchaînement des atomes de carbone de la molécule. On le décrit par deux critères.

Forme de la chaîne.

- **Linéaire** : chaque carbone est lié à au plus deux autres carbones ; la chaîne n'a pas de branche (exemple : pentane $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_3$). Attention, « linéaire » ne veut pas dire « rectiligne » : la chaîne est en zigzag dans l'espace (carbones tétraédriques).
- **Ramifiée** : au moins un carbone est lié à trois ou quatre autres carbones (exemple : 2-méthylbutane $\text{CH}_3\text{-CH(CH}_3\text{)-CH}_2\text{-CH}_3$).
- **Cyclique** : la chaîne se referme sur elle-même (exemple : cyclohexane).

Saturation.

- Une chaîne est **saturée** si elle ne comporte que des liaisons simples carbone-carbone.
- Elle est **insaturée** si elle comporte au moins une liaison multiple carbone-carbone ($\text{C}=\text{C}$ ou $\text{C}\equiv\text{C}$).

Décrire un squelette carboné

1. linéaire, ramifié ou cyclique • 2. saturé (liaisons simples) ou insaturé (au moins une $\text{C}=\text{C}$ ou $\text{C}\equiv\text{C}$) • 3. nombre d'atomes de carbone de la chaîne principale

Les alcanes. Ce sont les hydrocarbures (molécules formées uniquement de C et de H) **saturés et non cycliques**. Leur formule brute générale est $\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$: méthane CH_4 , éthane C_2H_6 , propane C_3H_8 , butane C_4H_{10} . On le justifie ainsi : une chaîne de n carbones liés par n – 1 liaisons C-C ; chaque carbone a 4 liaisons, soit 4n « places », dont 2(n – 1) sont prises par les liaisons C-C ; il reste $4n - 2n + 2 = 2n + 2$ places pour les H.

4. Groupes caractéristiques et familles fonctionnelles

Un **groupe caractéristique** est un groupe d'atomes, contenant au moins un atome autre que C et H, qui confère à la molécule des propriétés particulières. Les molécules qui possèdent le même groupe caractéristique forment une **famille fonctionnelle** et ont des propriétés chimiques voisines.

Le groupe hydroxyle -OH : la famille des alcools. Un alcool possède un groupe hydroxyle -OH porté par un **carbone tétraédrique**, c'est-à-dire un carbone engagé dans quatre liaisons simples. Exemples : éthanol $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$, propan-2-ol $\text{CH}_3\text{-CH(OH)-CH}_3$. Le groupe -OH est polaire et permet des liaisons hydrogène : les petits alcools sont solubles dans l'eau.

Le groupe carbonyle $\text{C}=\text{O}$: aldéhydes et cétones. Le carbone du groupe carbonyle est lié à un oxygène par une liaison double.

- Si le carbone du carbonyle est lié à **au moins un atome d'hydrogène**, la molécule est un **aldéhyde** : le groupe -CHO est forcément en **bout de chaîne**. Exemples : éthanal $\text{CH}_3\text{-CHO}$, propanal

$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CHO}$. (Le méthanal H-CHO a deux H sur ce carbone.)

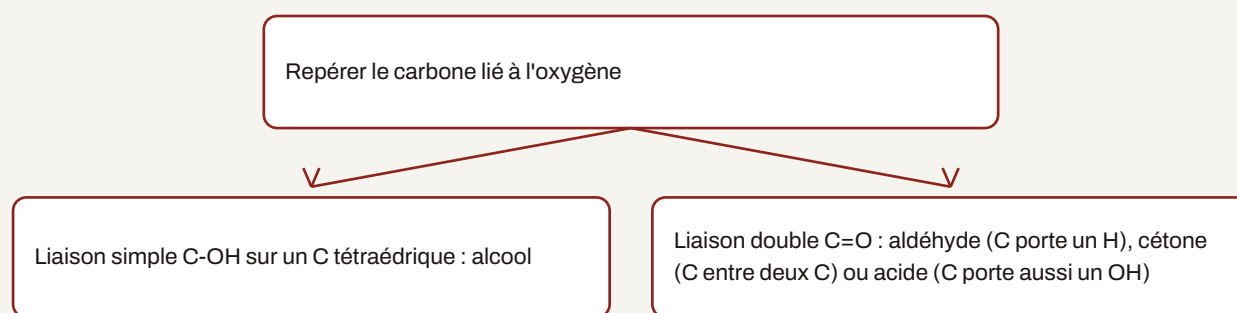
- Si le carbone du carbonyle est lié à **deux atomes de carbone**, la molécule est une **cétone** : le groupe -CO- est à l'intérieur de la chaîne. Exemples : propanone $\text{CH}_3\text{-CO-CH}_3$, butanone $\text{CH}_3\text{-CO-CH}_2\text{-CH}_3$.

Le groupe carboxyle -COOH : la famille des acides carboxyliques. Le groupe carboxyle associe sur un même carbone une liaison double C=O et une liaison simple C-OH . Il est toujours en bout de chaîne. Exemples : acide méthanoïque H-COOH , acide éthanoïque $\text{CH}_3\text{-COOH}$ (l'acide du vinaigre). Attention : le groupe carboxyle n'est ni un hydroxyle d'alcool ni un carbonyle de cétone, c'est un groupe à part entière.

Groupe caractéristique	Écriture	Famille	Position	Exemple
hydroxyle	-OH sur un C tétraédrique	alcool	quelconque	propan-2-ol $\text{CH}_3\text{-CH(OH)-CH}_3$
carbonyle	-CHO	aldéhyde	bout de chaîne	propanal $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CHO}$
carbonyle	-CO- entre deux C	cétone	dans la chaîne	propanone $\text{CH}_3\text{-CO-CH}_3$
carboxyle	-COOH	acide carboxylique	bout de chaîne	acide propanoïque $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-COOH}$

Pour les molécules saturées, non cycliques et ne portant qu'un seul groupe, les formules brutes générales sont : alcools $\text{C}_n\text{H}_{2n+2}\text{O}$; aldéhydes et cétones $\text{C}_n\text{H}_{2n}\text{O}$; acides carboxyliques $\text{C}_n\text{H}_{2n}\text{O}_2$. Un aldéhyde et une cétone de même nombre de carbones sont donc isomères.

Reconnaître une famille oxygénée



Deux branches distinctes • ce schéma ne relie pas les deux issues entre elles

5. La nomenclature

La nomenclature systématique (règles de l'UICPA) attribue à chaque molécule un nom unique, construit à partir de son squelette et de son groupe caractéristique.

Préfixes du nombre de carbones de la chaîne principale.

Nombre de C	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Préfixe	méth	éth	prop	but	pent	hex	hept	oct	non	déc

Alcane linéaires. Préfixe + terminaison **-ane** : méthane, éthane, propane, butane, pentane...

Alcane ramifiés. On applique les règles dans l'ordre :

1. repérer la **chaîne principale** : la chaîne carbonée la **plus longue** ; elle donne le nom de base ;
2. les branches sont des **groupes alkyles**, nommés d'après leur nombre de carbones avec la terminaison **-yl** : méthyl ($-\text{CH}_3$), éthyl ($-\text{CH}_2-\text{CH}_3$), propyl... ;
3. **numéroter** la chaîne principale de façon que les carbones portant les ramifications aient les **indices les plus petits possibles** ;
4. écrire le nom : indice, tiret, nom du groupe alkyle (sans le « e » final), placé devant le nom de l'alcane ; s'il y a plusieurs groupes identiques, on utilise les préfixes **di**, **tri**, **tétra** et on sépare les indices par des virgules ; des groupes différents sont cités par **ordre alphabétique** (sans tenir compte de di, tri).

Exemples :

- $\text{CH}_3-\text{CH}(\text{CH}_3)-\text{CH}_2-\text{CH}_3$: chaîne principale de 4 carbones ; numérotée de gauche à droite, le méthyle est en position 2 (et non 3) : **2-méthylbutane**.
- $\text{CH}_3-\text{CH}(\text{CH}_3)-\text{CH}(\text{CH}_3)-\text{CH}_2-\text{CH}_3$: chaîne de 5 carbones, méthyles en 2 et 3 (et non 3 et 4) : **2,3-diméthylpentane**.
- $\text{CH}_3-\text{C}(\text{CH}_3)_2-\text{CH}_3$: chaîne de 3 carbones, deux méthyles sur le carbone 2 : **2,2-diméthylpropane** (on répète l'indice).
- $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{C}_2\text{H}_5)-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$: la chaîne la plus longue a 6 carbones, l'éthyle est en position 3 : **3-éthylhexane**.

Le piège classique : une chaîne « écrite » horizontalement n'est pas toujours la plus longue. Une branche $-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ écrite en bout de chaîne la prolonge.

Molécules à groupe caractéristique. La chaîne principale est la chaîne la plus longue **qui contient le carbone porteur du groupe caractéristique** (ou le carbone du groupe lui-même). On la numérote pour donner au groupe caractéristique l'**indice le plus petit**, puis, en cas d'égalité, aux ramifications. Le groupe caractéristique impose la terminaison du nom.

Famille	Terminaison	Règle de l'indice	Exemples
Alcool	-ol (alcan-x-ol)	indice du C portant OH	propan-1-ol $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{OH}$; butan-2-ol $\text{CH}_3-\text{CH}(\text{OH})-\text{CH}_2-\text{CH}_3$
Aldéhyde	-al (alcanal)	aucun indice : le C du groupe est le C1	butanal $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CHO}$; 2-méthylpropanal $\text{CH}_3-\text{CH}(\text{CH}_3)-\text{CHO}$

Famille	Terminaison	Règle de l'indice	Exemples
Cétone	-one (alcan-x-one)	indice du C du carbonyle	pentan-2-one $\text{CH}_3\text{-CO-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_3$; pentan-3-one $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CO-CH}_2\text{-CH}_3$
Acide carboxylique	acide ...-oïque	aucun indice : le C du groupe est le C1	acide butanoïque $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-COOH}$; acide 2-méthylpropanoïque $\text{CH}_3\text{-CH(CH}_3\text{)-COOH}$

Remarques :

- Pour un aldéhyde ou un acide, le carbone du groupe fait partie de la chaîne principale et porte le numéro 1 : les ramifications sont numérotées à partir de lui. Dans $\text{CH}_3\text{-CH(CH}_3\text{)-CH}_2\text{-CHO}$, le méthyle est sur le carbone 3 : **3-méthylbutanal**.
- Pour une cétone, l'indice est omis quand une seule position est possible : on écrit couramment **propanone** et **butanone** (les noms propan-2-one et butan-2-one sont aussi corrects).
- Dans un alcool ramifié, l'indice du groupe -OH se place juste devant la terminaison : $\text{CH}_3\text{-CH(CH}_3\text{)-CH}_2\text{-OH}$ est le **2-méthylpropan-1-ol** ; $(\text{CH}_3)_3\text{C-OH}$ est le **2-méthylpropan-2-ol**.

Du nom à la formule. On lit le nom à l'envers : la terminaison donne la famille et la chaîne principale, on écrit la chaîne de carbones numérotée, on place le groupe caractéristique, puis les ramifications aux indices donnés, et l'on complète chaque carbone par des H jusqu'à 4 liaisons. Exemple : acide 3-méthylbutanoïque : chaîne de 4 carbones, C1 dans -COOH, méthyle sur C3 : $\text{CH}_3\text{-CH(CH}_3\text{)-CH}_2\text{-COOH}$.

6. La spectroscopie infrarouge

Principe. Les liaisons d'une molécule ne sont pas rigides : elles vibrent (allongement, déformation) à des fréquences qui dépendent des atomes liés et de la nature de la liaison. Quand on éclaire un échantillon avec un rayonnement infrarouge, chaque type de liaison **absorbe** le rayonnement dans un domaine de fréquences qui lui est propre. Le spectre infrarouge (IR) révèle donc les **types de liaisons** présentes, et par là les groupes caractéristiques.

Nombre d'onde. En spectroscopie IR, on repère le rayonnement par son **nombre d'onde** σ , inverse de la longueur d'onde :

$$\sigma = 1 / \lambda$$

Il s'exprime usuellement en cm^{-1} (λ en cm). Il est proportionnel à la fréquence : $\nu = c \times \sigma$ (avec σ en m^{-1} et $c = 3,00 \times 10^8 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$). Un spectre IR usuel s'étend de $4\,000 \text{ cm}^{-1}$ à 400 cm^{-1} , soit des longueurs d'onde de $2,5 \mu\text{m}$ à $25 \mu\text{m}$.

Lecture d'un spectre. En abscisse, le nombre d'onde, **décroissant de gauche à droite** ; en ordonnée, la **transmittance** T (en %), rapport de l'intensité transmise à l'intensité incidente. Une absorption se traduit donc par une **bande dirigée vers le bas** (T faible). On décrit une bande par sa position (nombre d'onde), son intensité (forte, moyenne, faible) et sa largeur (fine ou large).

Le spectre se lit en deux zones :

- de 4 000 à 1 500 cm^{-1} : les bandes caractéristiques des liaisons (O-H, C-H, C=O, C=C), exploitées avec une table ;
- en dessous de 1 500 cm^{-1} : l'**empreinte digitale**, zone riche et complexe, propre à chaque molécule, qui sert à la comparer à un spectre de référence mais ne s'interprète pas liaison par liaison au lycée.

Liaison	Nombre d'onde (cm^{-1})	Allure de la bande
O-H alcool libre (gaz, solution diluée)	3 580 à 3 670	fine, forte
O-H alcool lié (liquide pur)	3 200 à 3 400	large, forte
O-H acide carboxylique	2 500 à 3 200	très large, forte
C-H (carbone tétraédrique)	2 800 à 3 000	fine, forte
C-H du groupe aldéhyde (-CHO)	2 700 à 2 900	moyenne, souvent deux pics
C=O aldéhyde et cétone	1 650 à 1 730	fine, forte
C=O acide carboxylique	1 680 à 1 710	fine, forte
C=C	1 625 à 1 685	moyenne

Influence de la liaison hydrogène. Dans un alcool liquide, les groupes -OH sont engagés dans des liaisons hydrogène plus ou moins fortes : la liaison O-H est affaiblie et vibre à des fréquences variées. La bande O-H est alors **large et décalée vers les petits nombres d'onde** (3 200 à 3 400 cm^{-1}). À l'état gazeux ou très dilué dans un solvant apolaire, les molécules sont isolées : la bande est **fine** vers 3 600 cm^{-1} . Dans un acide carboxylique, les liaisons hydrogène sont plus fortes encore (les molécules s'associent par paires) : la bande O-H devient très large et chevauche les bandes C-H.

Méthode d'identification.

- Une bande forte et fine vers 1 700 cm^{-1} signale une liaison C=O : aldéhyde, cétone ou acide.
- Si elle s'accompagne d'une bande très large de 2 500 à 3 200 cm^{-1} : **acide carboxylique**.
- Si elle s'accompagne de bandes moyennes vers 2 700 à 2 900 cm^{-1} (en particulier vers 2 720 cm^{-1}) : **aldéhyde**.
- Sinon (C=O seule) : **cétone**.
- Une bande large vers 3 200 à 3 400 cm^{-1} sans bande C=O : **alcool**.
- Les bandes C-H vers 2 800 à 3 000 cm^{-1} sont présentes dans presque toutes les molécules organiques : elles n'apportent pas d'information sur la famille.

Un spectre IR indique les liaisons présentes, donc la famille, mais il ne donne ni le nombre de carbones ni la position du groupe : pour identifier la molécule, on combine le spectre avec la formule brute ou d'autres informations.

Exemples résolus

Exemple 1 : passer d'une formule topologique aux autres formules

Énoncé. Une molécule a pour formule topologique un zigzag de 3 segments (donc 4 sommets et extrémités) ; l'extrémité droite est reliée par une double liaison à un atome O. a) Écrire sa formule semi-développée et sa formule brute. b) Identifier le groupe caractéristique et la famille. c) Nommer la molécule.

Résolution. a) Les 4 sommets et extrémités sont 4 atomes de carbone. Le carbone de l'extrémité gauche est lié à un seul carbone : il porte 3 H (CH_3). Les deux carbones intermédiaires sont liés à deux carbones : ils portent 2 H chacun (CH_2). Le carbone de droite est lié à un carbone et doublement lié à l'oxygène, soit 3 liaisons : il porte 1 H. Formule semi-développée : $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CHO}$. Formule brute : 4 C, $3 + 2 + 2 + 1 = 8$ H, 1 O : $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}$. Vérification avec $\text{C}_n\text{H}_{2n}\text{O}$ pour $n = 4$: $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}$. b) Le carbone doublement lié à l'oxygène porte un H : groupe **carbonyle** en bout de chaîne, famille des **aldéhydes**. c) Chaîne de 4 carbones, terminaison -al : **butanal**.

Exemple 2 : nommer une molécule ramifiée

Énoncé. Nommer les molécules suivantes : a) $\text{CH}_3\text{-CH}(\text{CH}_3)\text{-CH}_2\text{-CH}(\text{OH})\text{-CH}_3$; b) $\text{CH}_3\text{-CH}(\text{CH}_3)\text{-CO-CH}_3$; c) $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}(\text{CH}_3)\text{-COOH}$.

Résolution. a) Groupe -OH sur un carbone tétraédrique : **alcool**. La chaîne la plus longue contenant le carbone porteur de OH compte 5 carbones (pentanol). On numérote pour donner à OH le plus petit indice : de droite à gauche, OH est sur le carbone 2 (de gauche à droite, il serait sur le carbone 4). Avec cette numérotation, le méthyle est sur le carbone 4. Nom : **4-méthylpentan-2-ol**. b) Groupe -CO- entre deux carbones : **cétone**. Chaîne principale de 4 carbones : $\text{CH}_3\text{-CH}(\text{CH}_3)\text{-CO-CH}_3$. Numérotée de droite à gauche, le carbonyle est en position 2 (de gauche à droite, il serait en 3) et le méthyle en 3. Nom : **3-méthylbutan-2-one** (ou 3-méthylbutanone). c) Groupe -COOH : **acide carboxylique**. Le carbone du groupe est le C1, la chaîne compte 4 carbones (butanoïque) et le méthyle est sur le carbone 2. Nom : **acide 2-méthylbutanoïque**.

Exemple 3 : identifier une molécule par spectroscopie infrarouge

Énoncé. Un liquide a pour formule brute $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$. Son spectre IR présente : une bande forte et fine à 1715 cm^{-1} , des bandes fines vers 2900 à 3000 cm^{-1} , aucune bande entre 2650 et 2850 cm^{-1} , aucune bande large au-dessus de 3000 cm^{-1} . a) Écrire les formules semi-développées des deux isomères de formule $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$ possédant un groupe carbonyle. b) Identifier le liquide.

Résolution. a) Un groupe carbonyle et 3 carbones : soit en bout de chaîne, **propanal** $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CHO}$ (aldéhyde), soit au milieu, **propanone** $\text{CH}_3\text{-CO-CH}_3$ (cétone). b) La bande à 1715 cm^{-1} confirme la liaison C=O (1650 à 1730 cm^{-1}). Les bandes vers 2900 à 3000 cm^{-1} sont celles des liaisons C-H de carbones tétraédriques. L'absence de bande C-H d'aldéhyde (2700 à 2900 cm^{-1} , en particulier vers 2720 cm^{-1}) exclut le propanal. L'absence de bande large au-dessus de 3000 cm^{-1} exclut un groupe O-H . Le liquide est la **propanone**.

Méthodes et pièges

- Pour une formule topologique, compte aussi les extrémités : un zigzag de n segments représente $n + 1$ carbones (sans hétéroatome dans la chaîne).
- Vérifie toujours les valences : 4 liaisons par carbone, 2 par oxygène, 1 par hydrogène. Compte les liaisons doubles pour deux.
- La chaîne principale est la plus longue, pas celle qui est écrite en ligne droite : suis toutes les branches avant de choisir.
- Numérote pour donner le plus petit indice au groupe caractéristique d'abord, aux ramifications ensuite.
- Aldéhyde et acide carboxylique : le carbone du groupe est toujours le carbone 1, on n'écrit pas son indice (butanal, pas butan-1-al).
- Ne confonds pas -CHO (aldéhyde, en bout de chaîne) et -CO- (cétone, dans la chaîne), ni le -OH d'un alcool et celui d'un groupe carboxyle.
- Un -OH porté par un carbone qui porte aussi un C=O appartient à un groupe carboxyle : la molécule est un acide, pas un alcool.
- Sur un spectre IR, l'axe des nombres d'onde est orienté de droite à gauche (les grands nombres à gauche) et les bandes pointent vers le bas.
- Ne cherche pas à attribuer chaque bande sous 1500 cm^{-1} : c'est l'empreinte digitale.

Vers le PASS

En PASS, la lecture rapide des formules topologiques est indispensable : les molécules du vivant (glucides, acides aminés, lipides, médicaments) s'écrivent toutes ainsi. On y ajoute d'autres groupes caractéristiques (amine, amide, ester, éther, thiol, groupes aromatiques), les règles de priorité entre groupes dans le nom, la stéréochimie (représentation de Cram, carbone asymétrique, isomères Z et E) et la reconnaissance des fonctions comme clé de la réactivité. L'infrarouge y est complété par la résonance magnétique nucléaire (RMN) et la spectrométrie de masse pour déterminer entièrement une structure.

Suite en PASS : Lire les molécules et reconnaître les fonctions

Exercices

Niveau 1 : s'entraîner

1. Pour chacune des formules topologiques décrites, donner la formule semi-développée et la formule brute : a) un zigzag de 2 segments (3 carbones), avec un groupe OH fixé sur le sommet central ; b) un zigzag de 3 segments (4 carbones), l'extrémité droite étant doublement liée à un O ; c) un zigzag de 2 segments (3 carbones), l'extrémité droite étant doublement liée à un O et reliée à un OH ; d) un hexagone.
2. Pour chaque molécule, entourer en pensée le groupe caractéristique, le nommer et indiquer la famille : a) $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CHO}$; b) $\text{CH}_3\text{-CO-CH}_3$; c) $\text{CH}_3\text{-COOH}$; d) $\text{CH}_3\text{-CH(OH)-CH}_3$; e) $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CO-CH}_2\text{-CH}_3$.

3. Nommer les molécules : a) $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-OH}$; b) $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CHO}$; c) $\text{CH}_3\text{-CO-CH}_2\text{-CH}_3$; d) $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-COOH}$; e) $\text{CH}_3\text{-CH(CH}_3\text{)-CH}_2\text{-CH}_3$.
4. Écrire la formule semi-développée de : a) 2-méthylpropan-1-ol ; b) pentan-3-one ; c) acide 3-méthylbutanoïque ; d) 2,2-diméthylpropane ; e) 2-méthylpropanal.
5. On donne trois spectres IR décrits par leurs bandes principales. Spectre A : bande large et forte à 350 cm^{-1} , bandes fines à 2950 cm^{-1} . Spectre B : bandes fines à 2950 cm^{-1} , bande fine et forte à 1715 cm^{-1} . Spectre C : bande très large de 2500 à 3200 cm^{-1} , bande forte à 1705 cm^{-1} . Attribuer chaque spectre à l'une des familles : alcool, cétone, acide carboxylique.

Niveau 2 : type bac

6. On s'intéresse aux alcools de formule brute $\text{C}_4\text{H}_{10}\text{O}$. a) Vérifier que cette formule correspond à la formule générale des alcools saturés non cycliques. b) Écrire les formules semi-développées des quatre alcools isomères et les nommer. c) Préciser pour chacun si sa chaîne est linéaire ou ramifiée. d) Le méthoxypropane $\text{CH}_3\text{-O-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_3$ a la même formule brute : est-ce un alcool ? Justifier.
7. Le propanal et la propanone ont la même formule brute. a) Écrire leurs formules semi-développées et leur formule brute commune. b) Quel nom donne-t-on à deux telles molécules ? c) Quelle bande commune présentent leurs spectres IR ? d) Quelle bande permet de les distinguer ? Préciser dans quel spectre elle apparaît.
8. Au laboratoire, on oxyde le propan-1-ol en acide propanoïque. Pour suivre la transformation, on enregistre le spectre IR du produit isolé. a) Écrire les formules semi-développées du réactif et du produit attendu. b) Décrire les bandes caractéristiques attendues dans le spectre du réactif liquide, puis dans celui du produit. c) Le spectre du produit présente une bande forte à 1730 cm^{-1} , des bandes moyennes vers 2720 et 2820 cm^{-1} et aucune bande large au-dessus de 2500 cm^{-1} . Quelle espèce a-t-on obtenue ? La nommer.
9. Un élève a proposé les noms suivants, tous incorrects. Pour chacun, écrire la formule semi-développée correspondant au nom proposé, puis donner le nom correct : a) 2-éthylpropane ; b) 3-méthylbutane ; c) 1-méthylpropane ; d) butan-3-ol.

Niveau 3 : vers le PASS

10. Une espèce organique ne contient que C, H et O. L'analyse donne les pourcentages en masse : C : 48,6 % ; H : 8,1 % ; O : 43,3 %. Sa masse molaire vaut $M = 74\text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$. Données : $M(\text{C}) = 12,0$; $M(\text{H}) = 1,0$; $M(\text{O}) = 16,0\text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$. a) Déterminer sa formule brute. b) Son spectre IR présente une bande très large de 2500 à 3200 cm^{-1} et une bande forte à 1710 cm^{-1} . Identifier et nommer la molécule. c) Vérifier la cohérence avec la formule générale de la famille.
11. La bande C=O de la butanone est située à $\sigma = 1715\text{ cm}^{-1}$ et la bande O-H d'un alcool liquide vers $\sigma = 3300\text{ cm}^{-1}$. a) Calculer les longueurs d'onde correspondantes en micromètres. b) Calculer la fréquence du rayonnement absorbé par la liaison C=O ($c = 3,00 \times 10^8\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$). c) Dans quel domaine du spectre électromagnétique se situent ces rayonnements ?
12. Un composé de formule brute $\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}$ présente en IR une bande forte à 1715 cm^{-1} , aucune bande entre 2650 et 2850 cm^{-1} et aucune bande au-dessus de 3100 cm^{-1} . Sa chaîne carbonée est linéaire et la molécule possède une symétrie : les deux groupes situés de part et d'autre du carbone fonctionnel sont identiques. a) Quelle famille ? Justifier. b) Écrire les formules semi-développées et les noms de toutes les molécules de cette famille de formule $\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}$ à chaîne linéaire. c) Identifier le composé.

13. Pour chaque affirmation, dire si elle est vraie ou fausse en justifiant. a) La formule $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-C}(\text{CH}_3)_2\text{-OH}$ est celle d'un alcool à chaîne ramifiée nommé 2-méthylbutan-2-ol. b) Le butanal et la butanone sont isomères. c) Un spectre IR permet à lui seul de distinguer le propan-1-ol du propan-2-ol. d) L'acide éthanoïque possède un groupe hydroxyle et appartient donc à la famille des alcools. e) La formule $\text{C}_3\text{H}_8\text{O}$ ne peut correspondre à aucune molécule.

Corrigés

- a) Trois carbones : les extrémités portent 3 H, le sommet central porte OH et 1 H.
 $\text{CH}_3\text{-CH}(\text{OH})\text{-CH}_3$, $\text{C}_3\text{H}_8\text{O}$ (propan-2-ol).

b) Quatre carbones : CH_3 , CH_2 , CH_2 , puis un carbone doublement lié à O qui porte 1 H.
 $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CHO}$, $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}$ (butanal). c) Trois carbones : CH_3 , CH_2 , puis un carbone lié à =O et à OH, qui a déjà 4 liaisons (1 C, 2 pour =O, 1 pour OH), donc aucun H. $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-COOH}$, $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$ (acide propanoïque). d) Six carbones en cycle, chacun lié à deux carbones, portant donc 2 H : $(\text{CH}_2)_6$, soit C_6H_{12} (cyclohexane).
- a) -CHO, groupe carbonyle en bout de chaîne : **aldéhyde** (propanal).

b) -CO- entre deux carbones, groupe carbonyle : **cétone** (propanone). c) -COOH, groupe carboxyle : **acide carboxylique** (acide éthanoïque). d) -OH sur un carbone tétraédrique, groupe hydroxyle : **alcool** (propan-2-ol). e) -CO- entre deux carbones, groupe carbonyle : **cétone** (pentan-3-one).
- a) Alcool, 3 carbones, OH sur le carbone 1 : **propan-1-ol**.

b) Aldéhyde, 4 carbones : **butanal**. c) Cétone, 4 carbones, carbonyle en position 2 (seule position possible) : **butanone** (ou butan-2-one). d) Acide, 3 carbones : **acide propanoïque**. e) Alcane ramifié, chaîne principale de 4 carbones, méthyle sur le carbone 2 : **2-méthylbutane**.
- a) Chaîne de 3 carbones, OH sur C1, méthyle sur C2 : $\text{CH}_3\text{-CH}(\text{CH}_3)\text{-CH}_2\text{-OH}$.

b) Chaîne de 5 carbones, carbonyle sur C3 : $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CO-CH}_2\text{-CH}_3$. c) Chaîne de 4 carbones, C1 dans -COOH, méthyle sur C3 : $\text{CH}_3\text{-CH}(\text{CH}_3)\text{-CH}_2\text{-COOH}$. d) Chaîne de 3 carbones, deux méthyles sur C2 : $\text{CH}_3\text{-C}(\text{CH}_3)_2\text{-CH}_3$, soit $\text{C}(\text{CH}_3)_4$. e) Chaîne de 3 carbones, C1 dans -CHO, méthyle sur C2 : $\text{CH}_3\text{-CH}(\text{CH}_3)\text{-CHO}$.
5. **Spectre A : alcool** (bande large et forte à $3\,350\text{ cm}^{-1}$, domaine O-H lié de $3\,200$ à $3\,400\text{ cm}^{-1}$, et aucune bande C=O).

Spectre B : cétone (bande C=O à $1\,715\text{ cm}^{-1}$, sans bande O-H ni bande C-H d'aldéhyde). **Spectre C : acide carboxylique** (bande O-H très large de $2\,500$ à $3\,200\text{ cm}^{-1}$ et bande C=O à $1\,705\text{ cm}^{-1}$, dans le domaine $1\,680$ à $1\,710\text{ cm}^{-1}$).
6. a) Formule générale $\text{C}_n\text{H}_{2n+2}\text{O}$; pour $n = 4$: $\text{C}_4\text{H}_{10}\text{O}$. La formule convient.

b) **Butan-1-ol** $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-OH}$; **butan-2-ol** $\text{CH}_3\text{-CH}(\text{OH})\text{-CH}_2\text{-CH}_3$; **2-méthylpropan-1-ol** $\text{CH}_3\text{-CH}(\text{CH}_3)\text{-CH}_2\text{-OH}$; **2-méthylpropan-2-ol** $\text{CH}_3\text{-C}(\text{CH}_3)(\text{OH})\text{-CH}_3$. c) Butan-1-ol et butan-2-ol : **chaîne linéaire** ; 2-méthylpropan-1-ol et 2-méthylpropan-2-ol : **chaîne ramifiée**. d) **Non** : l'oxygène y est lié à deux carbones et ne porte pas d'hydrogène, il n'y a pas de groupe hydroxyle. C'est un isomère des alcools, d'une autre famille (les éthers, hors programme de ce chapitre).
7. a) **Propanal** $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CHO}$ et **propanone** $\text{CH}_3\text{-CO-CH}_3$, de formule brute commune $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$.

b) Même formule brute, formules développées différentes : ce sont des **isomères**. c) Les deux possèdent une liaison C=O : **bande fine et forte entre $1\,650$ et $1\,730\text{ cm}^{-1}$** (ainsi que les bandes C-H vers $2\,800$ à $3\,000\text{ cm}^{-1}$). d) La **liaison C-H du groupe aldéhyde** donne des bandes moyennes vers $2\,700$ à $2\,900\text{ cm}^{-1}$.

(en particulier vers $2\,720\text{ cm}^{-1}$), **présentes uniquement dans le spectre du propanal.**

8. a) Réactif : **propan-1-ol** $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-OH}$. Produit attendu : **acide propanoïque** $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-COOH}$.

b) Réactif liquide : **bande large et forte de $3\,200$ à $3\,400\text{ cm}^{-1}$** (O-H lié) et bandes C-H vers $2\,800$ à $3\,000\text{ cm}^{-1}$, pas de bande C=O. Produit attendu : **bande très large de $2\,500$ à $3\,200\text{ cm}^{-1}$** (O-H d'acide) et **bande forte de $1\,680$ à $1\,710\text{ cm}^{-1}$** (C=O d'acide). c) La bande à $1\,730\text{ cm}^{-1}$ indique une liaison C=O ; les bandes vers $2\,720$ et $2\,820\text{ cm}^{-1}$ sont celles de la liaison C-H d'un aldéhyde ; l'absence de bande large exclut l'alcool et l'acide. On a obtenu un aldéhyde à 3 carbones : **le propanal** $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CHO}$. L'oxydation s'est arrêtée à l'aldéhyde, intermédiaire entre l'alcool et l'acide.

9. a) « 2-éthylpropane » : $\text{CH}_3\text{-CH}(\text{CH}_2\text{-CH}_3)\text{-CH}_3$. La chaîne la plus longue passe par l'éthyle et compte 4 carbones, avec un méthyle sur C2 : **2-méthylbutane**.

b) « 3-méthylbutane » : $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}(\text{CH}_3)\text{-CH}_3$. La numérotation doit donner l'indice le plus petit, en partant de l'autre extrémité : **2-méthylbutane**. c) « 1-méthylpropane » : $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_3$ (le méthyle en bout de chaîne la prolonge). Chaîne linéaire de 4 carbones : **butane**. d) « butan-3-ol » : $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}(\text{OH})\text{-CH}_3$. On numérote de l'autre côté pour donner à OH le plus petit indice : **butan-2-ol**.

10. a) Dans une mole d'espèce (74 g) :

masse de carbone : $74 \times 0,486 = 36,0\text{ g}$, soit $36,0 / 12,0 = 3,0\text{ mol}$ d'atomes de C ; masse d'hydrogène : $74 \times 0,081 = 6,0\text{ g}$, soit $6,0 / 1,0 = 6,0\text{ mol}$ d'atomes de H ; masse d'oxygène : $74 \times 0,433 = 32,0\text{ g}$, soit $32,0 / 16,0 = 2,0\text{ mol}$ d'atomes de O. Formule brute : $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$. Vérification : $3 \times 12,0 + 6 \times 1,0 + 2 \times 16,0 = 74,0\text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$. b) La bande très large de $2\,500$ à $3\,200\text{ cm}^{-1}$ (O-H d'acide) et la bande à $1\,710\text{ cm}^{-1}$ (C=O d'acide) désignent un **acide carboxylique**. Avec 3 carbones : **acide propanoïque** $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-COOH}$. c) Formule générale des acides saturés non cycliques $\text{C}_n\text{H}_{2n}\text{O}_2$; pour $n = 3$: $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$. **Cohérent**.

11. a) $\lambda = 1 / \sigma$. Pour C=O : $\lambda = 1 / 1\,715 = 5,83 \times 10^{-4}\text{ cm} = 5,83 \times 10^{-6}\text{ m}$, soit $\lambda \approx 5,83\text{ }\mu\text{m}$. Pour O-H : $\lambda = 1 / 3\,300 = 3,03 \times 10^{-4}\text{ cm} = 3,03 \times 10^{-6}\text{ m}$, soit $\lambda \approx 3,03\text{ }\mu\text{m}$.

b) $\sigma = 1\,715\text{ cm}^{-1} = 1\,715 \times 100\text{ m}^{-1} = 1,715 \times 10^5\text{ m}^{-1}$. $\nu = c \times \sigma = 3,00 \times 10^8 \times 1,715 \times 10^5 = 5,15 \times 10^{13}\text{ Hz}$.
 Vérification : $\nu = c / \lambda = 3,00 \times 10^8 / 5,83 \times 10^{-6} = 5,15 \times 10^{13}\text{ Hz}$. c) Ces longueurs d'onde (quelques micromètres) sont supérieures à celles du visible (400 à 800 nm) : **domaine de l'infrarouge**.

12. a) La bande forte à $1\,715\text{ cm}^{-1}$ révèle une liaison $\text{C}=\text{O}$. L'absence de bande vers $2\,700$ à $2\,850\text{ cm}^{-1}$ exclut un aldéhyde ; l'absence de bande au-dessus de $3\,100\text{ cm}^{-1}$ exclut un groupe $\text{O}-\text{H}$, donc un alcool ou un acide. Le composé est une **cétone** (formule $\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}$ conforme à $\text{C}_n\text{H}_{2n}\text{O}$ avec $n = 5$).

b) Cétones à chaîne linéaire de 5 carbones : le carbonyle peut être en position 2 ou 3 (la position 4 revient à la position 2 par numérotation inverse) : **pentan-2-one** $\text{CH}_3\text{-CO-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_3$ et **pentan-3-one** $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CO-CH}_2\text{-CH}_3$. c) Dans la pentan-2-one, le carbonyle est encadré par un méthyle et un propyle, différents. Dans la pentan-3-one, il est encadré par deux éthyles identiques : **le composé est la pentan-3-one**.

13. a) **Vrai** : la chaîne la plus longue contenant le carbone porteur de OH compte 4 carbones ($\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-C-CH}_3$) ; numérotée depuis la droite, OH et le méthyle sont sur le carbone 2 : 2-méthylbutan-2-ol. La chaîne est ramifiée (un carbone lié à trois carbones).

b) **Vrai** : butanal $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CHO}$ et butanone $\text{CH}_3\text{-CO-CH}_2\text{-CH}_3$ ont la même formule brute $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}$ et des formules développées différentes. c) **Faux** : les deux sont des alcools ; leurs spectres présentent les mêmes bandes caractéristiques ($\text{O}-\text{H}$ large, $\text{C}-\text{H}$). Seule l'empreinte digitale diffère, et l'on ne peut les distinguer qu'en la comparant à des spectres de référence ; la table des bandes ne suffit pas. d) **Faux** : le $-\text{OH}$ de l'acide éthanoïque est porté par un carbone engagé dans une liaison $\text{C}=\text{O}$, il fait partie du **groupe carboxyle**. La molécule est un acide carboxylique ; un alcool exige un $-\text{OH}$ sur un carbone tétraédrique. e) **Vrai** : une molécule à 3 carbones saturée et non cyclique contient au plus $2 \times 3 + 2 = 8$ hydrogènes ($\text{C}_3\text{H}_8\text{O}$ pour un alcool) ; avec 9 H, un atome dépasserait sa valence. Aucune molécule neutre ne correspond à $\text{C}_3\text{H}_9\text{O}$.