

Partie B : ISOMERIE

1. Représentations des composés organiques

1-1 - Formule brute

La formule brute d'un composé organique permet de connaître la nature des atomes constituant la molécule (C, H, O, N, X) et leurs nombres (x,y,z,t,w), elle est notée : $C_xH_yO_zN_tX_w$. X = Halogène : F, Cl, Br, I.

La formule brute ne donne aucune indication sur la manière dont les atomes sont liés les uns aux autres, ni de leurs positions dans l'espace. A une seule et même formule brute peut correspondre plusieurs possibilités de réarrangement des atomes. Le calcul de l'indice d'insaturation permet de déterminer les différentes possibilités qu'on appelle **Isomères**.

1-2 - Indice ou degré d'insaturation

A une formule brute, correspond plusieurs isomères différents par leurs propriétés physiques et chimiques. Le degré d'insaturation indique le nombre d'insaturations présent dans la molécule, il permet de déterminer le nombre d'isomères, il suffit de respecter la valence des atomes.

Le degré d'insaturation de la formule brute, $C_xH_yO_zN_tX_w$, se calcule à partir de l'équation suivante :

$$di = x - (y+w)/2 + t/2 + 1$$

x : nombre d'atomes tétravalents (carbone C)

y : nombre d'atomes monovalents (hydrogène H)

t : nombre d'atomes trivalents (azote N)

w : nombre d'halogènes (atome monovalent)

(L'oxygène n'est pas pris en considération)

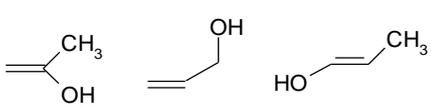
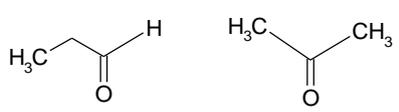
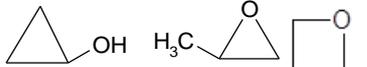
Si di = 0 on dit que la molécule est saturée (on a que des liaisons simples « σ »)

Si di = 1 on a une seule insaturation, la molécule contient soit une liaison double soit un cycle

Si di = 2 on a deux insaturations, la molécule contient soit 1 liaison triple, soit 2 liaisons doubles, soit 2 cycles, soit 1 liaison double et 1 cycle.

Exemple : C_3H_6O

Degré d'insaturation $di = 3 - 6/2 + 1 = 1$ donc la molécule contient une insaturation : soit une double liaison ou un cycle

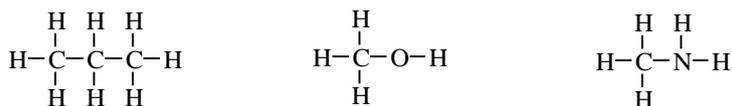
Double liaison C=C	Double liaison C=O	Un cycle
		

1-3 - Formule développée plane

C'est une formule qui donne l'enchaînement des atomes dans la molécule. On fait apparaître toutes les liaisons entre atomes.

Dans les composés organiques, un nombre caractéristique de liaisons est associé à chaque élément. Ainsi le carbone a quatre liaisons simples (le carbone est tétravalent), l'azote trois liaisons (l'azote est trivalent), l'oxygène deux liaisons (l'oxygène est divalent), l'hydrogène et les halogènes une seule liaison (Ils sont monovalents).

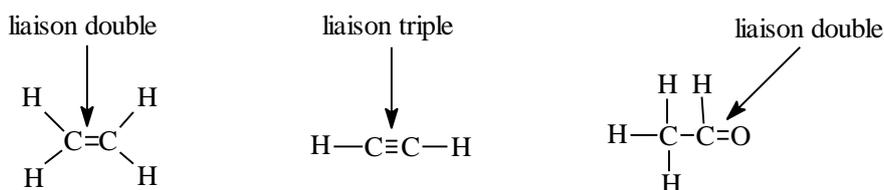
Exemples



Un trait signifie une liaison simple (liaison covalente)

On peut rencontrer des composés qui contiennent des liaisons multiples (doubles ou triples).

Exemples

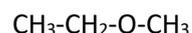
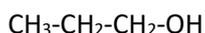


Dans tous les cas le nombre de liaison que peut faire chaque atome est respecté.

1-4 - Formule semi-développée

C'est une représentation simplifiée, qui ne représente que les liaisons entre atomes de carbone et carbone-hétéroatomes.

Exemples

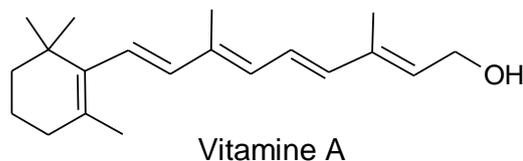
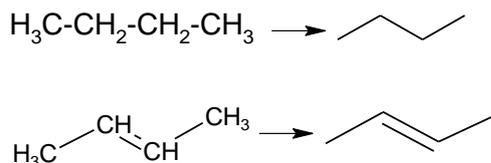


1-5 - Formule topologique

Ce type de formule très utilisé en biochimie, pour représenter les grosses molécules, est une représentation très simplifiée de la molécule :

- La chaîne carbonée est disposée en zigzag ; c'est une ligne brisée qui peut comporter des ramifications. Ni les atomes de carbone, ni les atomes d'hydrogène qui leur sont liés ne sont représentés. Les liaisons multiples sont mentionnées.
- Les atomes autres que **C** et **H** figurent par leur symbole, ainsi que les atomes d'hydrogène qu'ils portent.

Exemples :



2. Isomérisation

Deux isomères sont deux composés qui ont la même formule brute, mais diffèrent par :

- l'ordre ou la nature des liaisons qui relient les atomes entre eux,
- la disposition des atomes dans l'espace.

Il existe deux types d'isomères : les isomères de constitution et les stéréoisomères.

2-1- Isomérisation de constitution

Dans une représentation plane, la disposition des atomes dans une molécule définit l'isomérisation de constitution qui est appelée aussi isomérisation plane ou structurale. On peut distinguer :

a. Isomérisation de chaîne

Liée uniquement au squelette carboné qui peut être plus au moins ramifié.

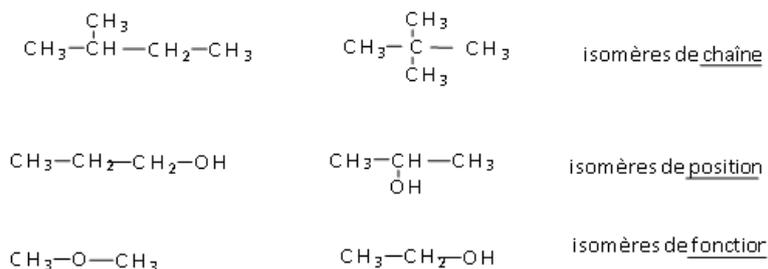
b. Isomérisation de position

Même squelette carboné mais un même groupement fonctionnel peut être situé à des positions différentes.

c. Isomérisation de fonction

Les structures possèdent des fonctions différentes. Ces isomères de fonction diffèrent au niveau de leurs propriétés chimiques et physiques et biologiques.

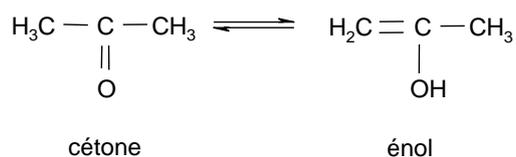
Exemples



Cas Particulier : Tautomérisation

La tautomérisation est un cas particulier de l'isomérisation de fonction, certains isomères de fonction peuvent se transformer selon un équilibre chimique. Il s'agit d'une tautomérisation et les deux isomères sont appelés des tautomères.

Exemple : équilibre céto-énolique



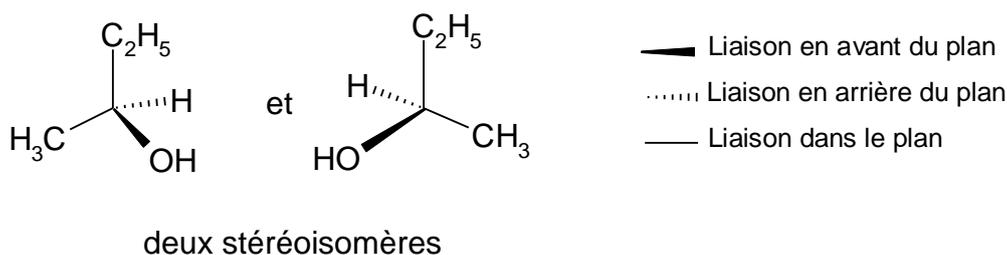
Dans cet exemple, l'hydrogène migre du carbone en alpha de la fonction cétone vers l'atome d'oxygène. La proportion des deux tautomères dépend du milieu réactionnel.

3. Stéréoisomérisation

Des isomères (de même constitution) sont appelés **stéréoisomères** lorsqu'ils ne diffèrent que par la disposition de leurs atomes dans l'espace.

Une formule plane est insuffisante pour décrire les molécules organiques, qui sont des édifices tridimensionnels.

La stéréoisomérisation est la relation qui existe entre deux stéréoisomères.



Les molécules sont représentées dans l'espace comme les deux stéréoisomères ci-dessus (représenté en projective ou CRAM). Il existe d'autres types de représentations tridimensionnelles des molécules organiques (Newman, Fischer...). Cette partie sera développée dans le chapitre « Stéréochimie ».