

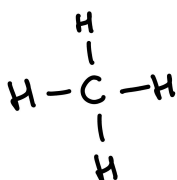
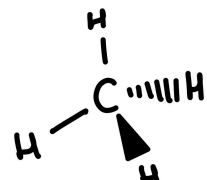
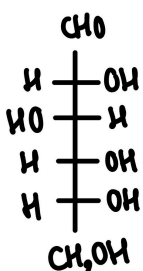
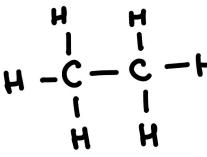
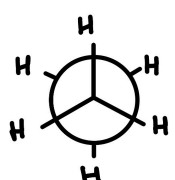
Chimie organique :

Représentation des molécules:

En 2D:

- Formule **brute** = listing des atomes.
- Formule **développée** = toutes les liaisons observables dans un schéma.
- Formule **semi développée** = simplification en supprimant les liaisons de l'hydrogène.
- Formule **topologique** = suppression de l'écriture carbone et hydrogène.

En 3D:

Cram	Fischer	Newman
<p>exemple du méthane:</p> <p>→ Schéma de Lewis:</p>  <p>→ Représentation Cram:</p>  <p>trait pointillé = atome à l'arrière.</p> <p>trait plein (gras) = atome à l'avant.</p>	<p>exemple du D-glucose (glucose naturel):</p>  <p>Dans la représentation de Fischer:</p> <p>→ Le groupement fonctionnel est placé en <u>haut</u>.</p> <p>→ traits horizontaux = vers l'avant.</p> <p>→ trait verticale = vers l'arrière.</p>	<p>exemple de l'éthane:</p> <p>→ Schéma de Lewis:</p>  <p>→ Représentation de Newman:</p>  <p>Deux carbones: un en avant du cercle (qu'on peut observer) et un derrière le cercle (non observable ici). Dans cette représentation on supprime l'écriture des carbones centraux.</p>

NOMENCLATURE:

Ici les fonctions sont placés par ordre de priorité décroissant

Noms des fonctions chimiques:	Schémas/Structures	Suffixe (fonction principale)	Préfixe (fonction secondaire)
Acide carboxylique		Acide ...-oïque	Carboxy-...
Esters		-oate d'alkyle	Alkoxy-carbonyl-
Amides		-amide	Cabamoyl-
Nitriles		-nitrile	Cyano-
Aldéhyde		-al	Formyl-
Cétone		-one	-oxo-
Alcools		-ol	Hydroxy-
Thiols		-thiol	Mercapto-

Amines	$\begin{array}{c} -\text{NH} \\ \\ \text{secondaire} \end{array}$ $\begin{array}{c} -\text{N}- \\ \\ \text{tertiaire} \end{array}$	-amine	Amino-
Ethers	---O---	alcoxy	-oxy-
Alcènes	>C=C<	-ène	Alkenyl-
Alcyne	$-\text{C}\equiv\text{C}-$	-yne	Alkynyl-
Halogènes	$-\text{X}$	-halo	/

Exemple global:

	<p>acide-4-éthyl-4-méthyl-pent-2-énoïque.</p> <p>Ici, on numérote les carbones dans un ordre qui dépend du groupe fonctionnel prioritaire. Dans ce cas, l'acide carboxylique est la fonction prioritaire donc le carbone relié à ce groupe est le n°1.</p>
--	--

STEREOCHIMIE:

Définition: des molécules différentes qui ont la même formule brute.

Isomérisme plane/ de construction:

→ Molécules différentes par leur formule semi-développée.

isomérisation de fonction	isomérisation de position	isomérisation de squelette
Les fonctions changent.	On déplace les fonctions sur le squelette carboné.	Les mêmes fonctions au même endroit mais le squelette change par ajout de ramification.

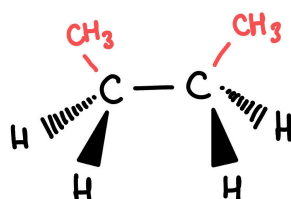
Isomérisation spatiale/stéréoisomérisation:

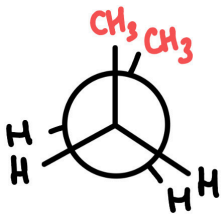
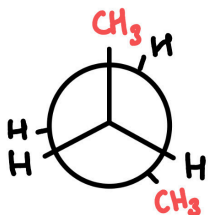
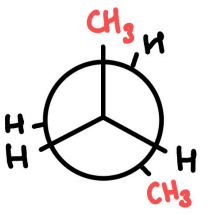
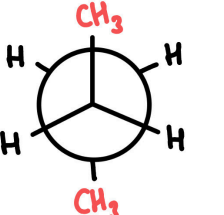
→ Molécules différentes par leur représentation dans l'espace (3D).

isomérisation spatiale de conformation:	isomérisation spatiale de configuration
Les substituants peuvent tourner les uns par rapport aux autres sur une liaison C-C = conformère (il existe autant de conformère que de liaison simple dans la molécule)	On coupe les liaisons et on les recrée ailleurs. → énantiomères= image l'un de l'autre (miroir). → diastéréoisomères= pas image/ pas énantiomères.

Conformation:

Dans une isomérisation spatiale de conformation on se place en représentation de Newman, de plus il existe des noms pour chaque positions, exemple du butane: CH₃-CH₂-CH₂-CH₃



Conformation éclipsée	Conformation décalé gauche	Conformation pseudo éclipsée	Conformation anti
 <p>→ énergiquement très défavorable, les deux groupements méthyle se superposent.</p>	 <p>→ moins énergétique que la conformation éclipsée. (+60°).</p>	 <p>→ moins énergétique que les autres. (+60°).</p>	 <p>→ la plus favorable énergiquement car les méthyles sont à l'opposé. Il s'agit du conformère le plus stable pour le butane.</p>

Autre cas: pour l'éthane CH₃-CH₃ la position défavorable est éclipsée et la plus favorable est décalé gauche.

Configuration:

→ Pour avoir des molécules différentes: passage d'un stéréoisomère à l'autre nécessite la rupture d'au moins une liaison.

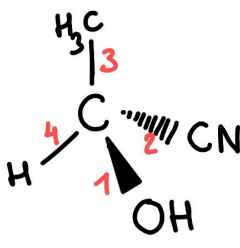

→ Centre stéréogène= atome ou groupe dont la permutation de 2 substituants qui lui sont liés, génère 2 stéréoisomères. Exemple: carbone asymétrique = carbone qui a 4 liaisons différentes (l'environnement qui l'entoure qui est asymétrique).

→ Chiralité = aucune symétrie dans la molécule (≠ Achiralité: le contraire)

→ Chiralité ≠ Centre stéréogène : le centre stéréogène est une condition suffisante mais non nécessaire pour la chiralité (la chiralité est au niveau de la molécule et le centre stéréogène est au niveau des atomes).

✓ Règle du CIP:

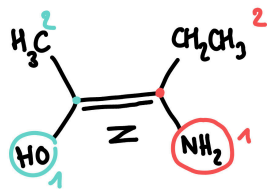
On a besoin d'un carbone stéréogène:

<p>étape 1</p> 	<p>→ Classez les atomes reliés au carbone par ordre Z (num. atomique) décroissant (1er rang)</p> <p>→ Si plusieurs atomes sont identiques on regarde les atomes qui sont liés à ces atomes (2e rang). Celui qui a un ensemble de Z supérieur à l'autre atome est prioritaire.</p> <p>→ Les liaisons multiple comptent comme étant relié X fois à l'atome. Exemple: si il y a une triple liaison entre un carbone et un azote, c'est comme si le carbone était relié à trois azote, donc l'azote se voit prioritaire (par rapport à l'oxygène par exemple: l'oxygène à un nombre Z supérieur à l'azote dans des conditions normales)</p>
<p>étape 2:</p> 	<ul style="list-style-type: none"> • Si l'atome 4 est à l'arrière du plan: sens de rotation (direct) 1 → 2 → 3: <ul style="list-style-type: none"> → si tourne dans sens horaire: C est R (Rectus). → si tourne dans le sens anti-horaire: C est S (Sinister) • Si l'atome 4 est à l'avant du plan: lecture <u>indirect</u> 3 → 2 → 1 <ul style="list-style-type: none"> → sens horaire: C est R → sens anti-horaire: C est S <p><i>Pour s'aider on peut imaginer/ dessiner la molécule avec la représentation de Newman en plaçant l'atome 4 à l'arrière.</i></p>

→ Une molécule est dite **méso** si elle contient un centre de symétrie en elle, la molécule est donc aussi achirale.

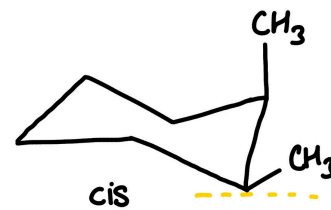
→ Si on a n carbone asymétrique, il y a **2ⁿ** stéréoisomère.

✓ **Z/E et Cis/Trans:**

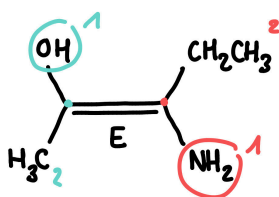
Z/E: associé à une double liaison

→ configuration Z (zusammen) groupement prioritaire du même coté.

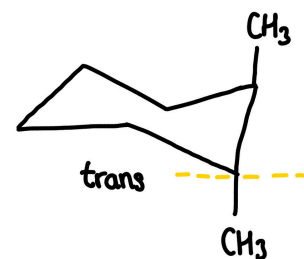
Les groupes sont numéroté avec la règle des CIP.

Cis/Trans: associé à un composé cyclique

→ configuration Cis: par rapport au cycle, les substituants sont du même coté



→ configuration E (entgegen): les groupement prioritaire sont de part et d'autre de la double liaison.



→ configuration Trans: par rapport au cycle, les substituants sont de coté opposé.

⚠ Les composé énantiomères ou diastéréoisomères n'ont pas les mêmes propriétés physiologie ou thérapeutique (peut conduire à des effets secondaires dans le cas d'un principe actif).