

Revoir auparavant les notions suivantes de 1^{re} SPÉ : les [structures des entités organiques](#) et l'[aspect macroscopique des synthèses organiques](#).

1. Structure et propriétés des molécules organiques

1.1. Formule topologique

• Après les formules brutes, développées et semi-développées, la formule topologique simplifie la représentation d'une molécule en ne faisant apparaître que les liaisons C-C et les groupes fonctionnels.

Brute	Développée	Semi-développée	Topologique
$C_4H_{10}O$ Butan-2-ol			

• La formule de Lewis est un cas à part, qui fait apparaître les doublets non liants de la molécule.

1.2. Nouvelles familles fonctionnelles et Nomenclature

• Un **halogénoalcane** est un alcane où un ou plusieurs atomes d'hydrogène sont remplacés par un atome d'halogène. Les halogènes sont les éléments de l'avant-dernière colonne de la classification périodique : Fluor F, Chlore Cl, Brome Br et Iode I. On utilise la lettre X pour désigner n'importe lequel d'entre eux.

• Une **amine** comporte un atome d'azote lié à un, deux ou trois groupes alkyls notés -R. Elles sont nommées avec le suffixe amine après un radical formé sur le nombre d'atome de C de la chaîne.

• Le remplacement du groupe hydroxyle -OH d'un acide carboxylique par un autre groupe fonctionnel conduit aux dérivés d'acides carboxyliques. Il s'agit des **esters** (-O-R') et des **amides** (-NRR')


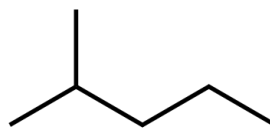
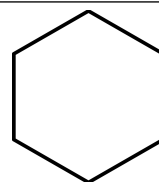
↳ La chaîne portant la double liaison C=O permet la construction du nom.

	Halogénoalcanes	Amines	Ester	Amide ⁽¹⁾
	$R-X$ -o -ane	$R-NH_2$ $R-NH-R'$ $R-NR''-R'$ -amine	 -oate de -yle	 -amide
Exemples	 2-chlorobutane	 Éthylméthylamine	 Butanoate de méthyle	 N-méthyléthylamide

(1) Les éventuels groupes alkyls R' et R'' (différents de H) sont précédés de N- comme d'un numéro.

1.3. Notion de squelette carboné

- On distingue plusieurs types de chaînes carbonées.

Chaîne linéaire	Chaîne ramifiée	Cycle
Les atomes de carbones s'enchaînent les uns à la suite des autres.	Lorsque des groupes alkyls sont greffés sur une chaîne linéaire, on parle de chaîne ramifiée.	La chaîne boucle sur elle-même.
 hexane	 2-méthylpentane	 cyclohexane

↳ Une chaîne est dite saturée lorsqu'elle ne comporte que des simples liaisons C-C.

↳ Une chaîne insaturée contient des doubles liaisons C=C, ou des triples liaisons C≡C. Un cycle constitue aussi une insaturation.

1.4. Isomérisie de constitution

• Dans le paragraphe précédent, l'hexane et le 2-méthylpentane ont la même formule brute C₆H₁₄, mais des formules développées différentes. Ces molécules sont des isomères de constitution.

↳ Le 3-méthylpentane (formule brute C₆H₁₄) est aussi un isomère de l'hexane.

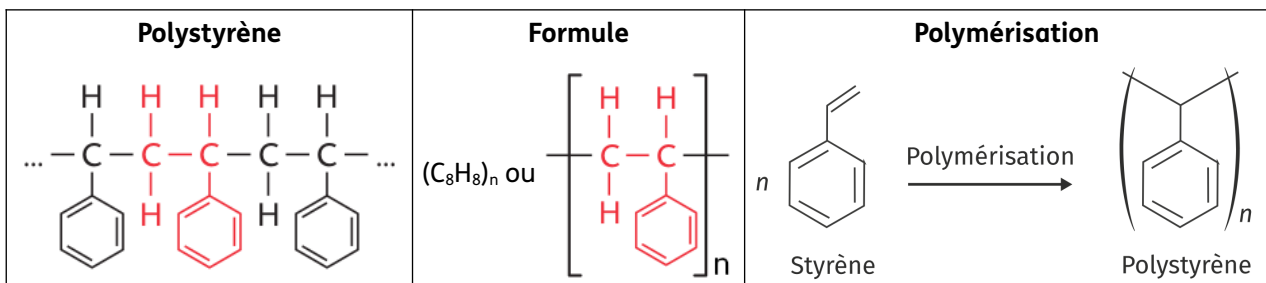
Les isomères de constitution sont des molécules ayant la même formule brute, mais des formules développées différentes.

↳ Des isomères de constitution ont des propriétés physico-chimiques différentes.

1.5. Polymères

Les polymères sont des molécules géantes constituées de la répétition d'un grand nombre de motifs appelés monomères. Ils sont obtenus par polyaddition ou polycondensation d'un très grand nombre de monomères.

• L'indice polymérisation n est le nombre de monomères du polymère.

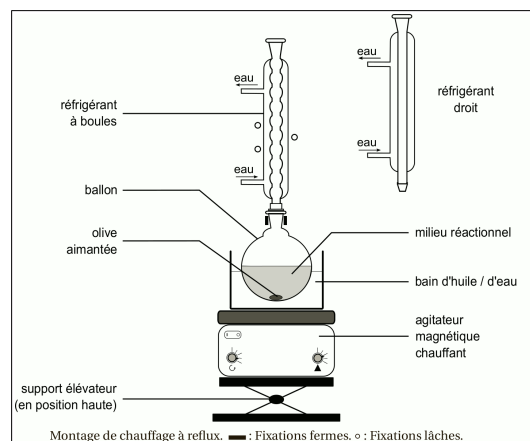


2. Optimisation d'une étape d'une synthèse

2.1. Optimisation de la vitesse de formation d'un produit

- La cinétique a permis de préciser les facteurs qui influencent la vitesse d'une transformation. Ainsi, la vitesse des réactions est généralement plus grande lorsque on augmente la concentration des réactifs, la température ou qu'un catalyseur est ajouté au milieu réactionnel.

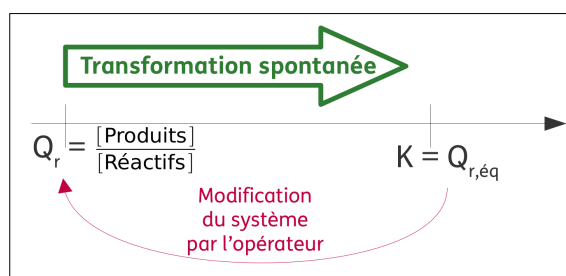
- Le chauffage à reflux permet d'augmenter la température du milieu réactionnel sans perte d'espèce chimiques par vaporisation, les vapeurs étant condensées puis retombant dans le ballon.



2.2. Optimisation du rendement d'une synthèse

- Pour améliorer le rendement d'une synthèse, il faut faire évoluer le système dans le sens de formation des produits c'est-à-dire le sens direct.

↳ Lorsqu'il subit une perturbation, l'équilibre évolue spontanément en sorte que Q_r se rapproche de K .



- Une diminution de Q_r à partir de l'équilibre, tend à un rétablissement de celui-ci, c'est-à-dire une évolution dans le sens direct. Deux possibilités pour cela :

↳ Excès d'un réactif

Partant de l'équilibre, en augmentant la quantité d'un réactif, Q_r diminue et l'équilibre évolue dans le sens direct : consommation de ce réactif excédentaire et formation des produits.

↳ Élimination d'un produit

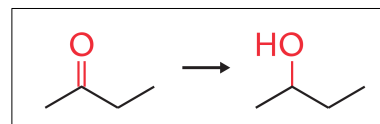
Partant de l'équilibre, en éliminant un produit, Q_r diminue et l'équilibre évolue dans le sens direct : formation du produit manquant et consommation des réactifs.

3. Stratégies de synthèse multi-étapes

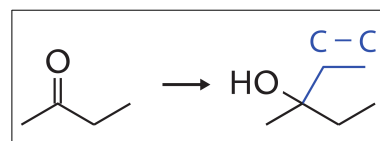
3.1. Modification d'une molécule

- On distingue deux types de modification d'une molécule :

↳ Il peut y avoir modification du groupe caractéristique. Dans ce cas, le produit obtenu appartient à une famille fonctionnelle différente de celle du réactif initial.



↳ Il peut y avoir modification de la chaîne carbonée. Il y a création (ou suppression) de liaison C-C.



3.2. Types de réactions

• La réactivité des molécules organiques dépend de leurs groupes fonctionnels, plus précisément de la nucléophilie (capacité à donner des électrons via un doublet non liant) et de l'électrophilie (capacité à accepter les électrons) des différents sites présents. Plusieurs types de réactions sont possibles :

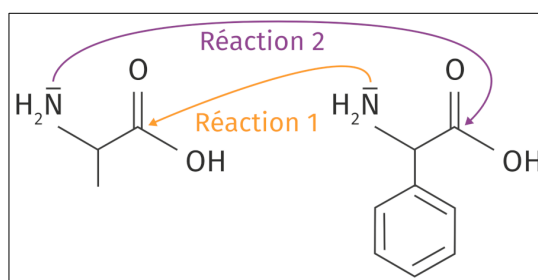
Addition	Une réaction d'addition est un ajout d'atomes ou de groupes d'atomes sur une molécule possédant au moins une liaison multiple qui disparaît dans la réaction.	$\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2 + \text{Br}_2 \longrightarrow \text{H}_2\text{CBr}-\text{CH}_2\text{Br}$ Bromation de l'éthène
Élimination	Une réaction d'élimination est un retrait d'atomes ou de groupes d'atomes sur une molécule conduisant à la formation d'une liaison multiple (double ou triple)	$\begin{array}{c} \text{CH}_3-\text{CH}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{OH} \end{array} \longrightarrow \text{CH}_3-\text{CH}=\text{CH}_2 + \text{H}_2\text{O}$ Déshydratation du propan-1-ol
Substitution	Une réaction de substitution est une réaction au cours de laquelle un atome ou groupe d'atomes, lié à un carbone par une liaison simple, est remplacé par un autre atome ou groupe d'atomes.	$\begin{array}{c} \text{R}^3 \\ \\ \text{R}^2-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{R}^1 \end{array} + \text{H}-\text{Cl} \longrightarrow \begin{array}{c} \text{R}^3 \\ \\ \text{R}^2-\text{C}-\text{Cl} \\ \\ \text{R}^1 \end{array} + \text{H}-\text{OH}$ Substitution par Cl sur alcool tertiaire
Acide-Base	Lors d'une réaction acido-basique, il y a échange de proton H⁺ , entre un acide AH qui libère le proton et la base B qui le capte.	$\text{CH}_3\text{COOH}_{(\text{aq})} + \text{HO}^-_{(\text{aq})} \rightarrow \text{H}_2\text{O}_{(\text{l})} + \text{CH}_3\text{COO}^-_{(\text{aq})}$ Dosage acide faible par base forte
Redox	Lors d'une réaction redox, il y a échange d'électrons entre un réducteur qui libère un (ou plusieurs) électron et un oxydant qui le capte.	$2 \text{MnO}_4^-_{(\text{aq})} + 5 \text{R}-\text{CHOH}-\text{R}' + 6 \text{H}^+_{(\text{aq})} = 2 \text{Mn}^{2+}_{(\text{aq})} + 5 \text{R}-\text{CO}-\text{R}' + 8 \text{H}_2\text{O}_{(\text{l})}$

3.3. Protection – Déprotection

• Un composé est dit polyfonctionnel s'il possède plusieurs groupes caractéristiques. En synthèse organique, les composés polyfonctionnels sont souvent utilisés.

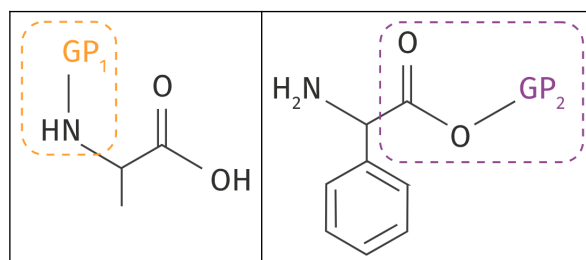
• Lors d'une réaction chimique mettant en jeu des composés polyfonctionnels, les groupes caractéristiques de ces molécules sont susceptibles de réagir.

↳ Lorsque deux acides α-aminés sont mis en présence l'un de l'autre, deux réactions peuvent avoir lieu entre les deux acides aminés différents, conduisant à deux produits différents.

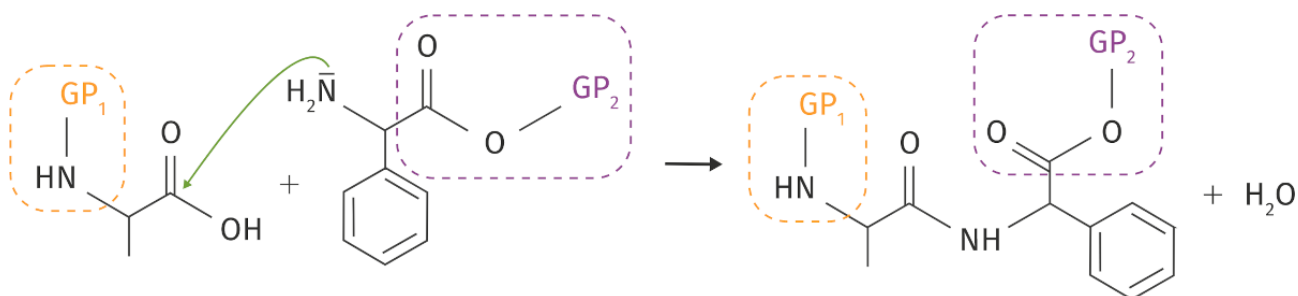


• Si l'on souhaite n'obtenir qu'un seul produit, il est nécessaire de « protéger » les groupes dont on ne veut pas qu'ils réagissent.

↳ La protection d'un groupe caractéristique consiste à transformer temporairement ce groupe en un autre groupe ne réagissant pas, appelé groupe protecteur.



- La seule réaction possible est alors :



- Il est nécessaire, une fois la réaction de synthèse réalisée, de procéder à la déprotection du groupe caractéristique qui a été initialement protégé.

3.4. Stratégies

- Pour élaborer ou analyser une synthèse organique, on peut s'appuyer sur des banques de réactions qui répertorient les transformations possibles, classées par précurseur (substrat que l'on modifie) et cible (produit visé) On procède de la façon suivante :

- ↳ Repérer les fonctions mises en jeu
- ↳ Identifier si la modification qui a lieu change la chaîne carbonée ou une fonction spécifique.
- ↳ Sélectionner dans la banque le précurseur et la cible ou bien le précurseur et le réactif.
- ↳ Adapter l'équation de la réaction proposée dans la banque.

3.5. Impact environnemental

L'Économie d'Atomes notée EA d'une synthèse est définie comme le rapport de la masse molaire du produit recherché sur la somme des masses molaires de tous les produits qui apparaissent dans l'équation, en tenant compte des coefficients stœchiométriques.

- Si le produit C est la cible de la synthèse suivante : $a A + b B \rightarrow c C + d D$, l'économie d'atome est :

$$EA = \frac{c \times M(C)}{c \times M(C) + d \times M(D)} = \frac{c \times M(C)}{a \times M(A) + b \times M(B)}$$

- Ainsi, si le rendement d'une synthèse est de 100 % mais que l'économie d'atome est de 27 %, cela signifie que seuls 27 % des réactifs sont incorporés dans le produit.

- Une synthèse écoresponsable d'un produit permet de réduire au maximum l'empreinte environnementale en se proposant d'agir sur trois domaines :

- ↳ Les matières premières : en limitant les quantités, en préférant des espèces peu dangereuses, renouvelables, etc. ...
- ↳ Les solvants : non toxiques, non polluants, en faible quantité voire sans solvant.
- ↳ L'énergie : en limitant les dépenses, en utilisant des conditions douces (catalyseur, faibles températures, etc. ...)