

# Chapitre 1

## Le Carbone comme base de la Chimie Organique

Clayden, Greeves, Warren, Wothers, *Organic Chemistry*, Oxford University Press, 2001, Chapter 4, pp. 81–110.

Arnaud, *Chimie Organique*, Paul Arnaud, Dunod Editeur, 2009, Chapitre 4, pp 73-103.

# Définition de la Chimie Organique

- la chimie organique est la chimie des molécules (composés) contenant du carbone
- les molécules organiques contiennent du carbone lié de façon covalente à d'autres éléments (non-métalliques)

group 4

	1a	2a	3a	4a	5a	6a	7a	VIII			1b	2b	3b	4b	5b	6b	7b	0
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	1 <b>H</b> 1.008 Wasserstoff																	2 <b>He</b> 4.0003 Helium
2	3 <b>Li</b> 6.94 Lithium	4 <b>Be</b> 9.01 Beryllium						2ème période					5 <b>B</b> 10.81 Bor	6 <b>C</b> 12.011 Kohlenstoff	7 <b>N</b> 14.01 Stickstoff	8 <b>O</b> 16.00 Sauerstoff	9 <b>F</b> 19.00 Fluor	10 <b>Ne</b> 20.18 Neon
3	11 <b>Na</b> 22.99 Natrium	12 <b>Mg</b> 24.31 Magnesium											13 <b>Al</b> 26.98 Aluminium	14 <b>Si</b> 28.09 Silicium	15 <b>P</b> 30.97 Phosphor	16 <b>S</b> 32.06 Schwefel	17 <b>Cl</b> 35.45 Chlor	18 <b>Ar</b> 39.95 Argon
4	19 <b>K</b> 39.10 Kalium	20 <b>Ca</b> 40.08 Calcium	21 <b>Sc</b> 44.96 Scandium	22 <b>Ti</b> 47.90 Titan	23 <b>V</b> 50.94 Vanadium	24 <b>Cr</b> 52.00 Chrom	25 <b>Mn</b> 54.94 Mangan	26 <b>Fe</b> 55.85 Eisen	27 <b>Co</b> 58.93 Cobalt	28 <b>Ni</b> 58.71 Nickel	29 <b>Cu</b> 63.55 Kupfer	30 <b>Zn</b> 65.37 Zink	31 <b>Ga</b> 69.72 Gallium	32 <b>Ge</b> 72.59 Germanium	33 <b>As</b> 74.92 Arsen	34 <b>Se</b> 78.96 Selen	35 <b>Br</b> 79.90 Brom	36 <b>Kr</b> 83.80 Krypton
5	37 <b>Rb</b> 85.47 Rubidium	38 <b>Sr</b> 87.62 Strontium	39 <b>Y</b> 88.91 Yttrium	40 <b>Zr</b> 91.22 Zirkonium	41 <b>Nb</b> 92.91 Niob	42 <b>Mo</b> 95.94 Molybdän	43 <b>Tc</b> 98.91 Technetium	44 <b>Ru</b> 101.07 Ruthenium	45 <b>Rh</b> 102.91 Rhodium	46 <b>Pd</b> 106.4 Palladium	47 <b>Ag</b> 107.87 Silber	48 <b>Cd</b> 112.40 Cadmium	49 <b>In</b> 114.82 Indium	50 <b>Sn</b> 118.69 Zinn	51 <b>Sb</b> 121.75 Antimon	52 <b>Te</b> 127.60 Tellur	53 <b>I</b> 126.90 Iod	54 <b>Xe</b> 131.30 Xenon
6	55 <b>Cs</b> 132.91 Cäsium	56 <b>Ba</b> 137.34 Barium	57 <b>La</b> 138.91 Lanthan	72 <b>Hf</b> 178.49 Hafnium	73 <b>Ta</b> 180.95 Tantal	74 <b>W</b> 183.85 Wolfram	75 <b>Re</b> 186.2 Rhenium	76 <b>Os</b> 190.2 Osmium	77 <b>Ir</b> 192.22 Iridium	78 <b>Pt</b> 195.09 Platin	79 <b>Au</b> 196.97 Gold	80 <b>Hg</b> 200.59 Quecksilber	81 <b>Tl</b> 204.37 Thallium	82 <b>Pb</b> 207.2 Blei	83 <b>Bi</b> 209.98 Bismut	84 <b>Po</b> 209.98 Polonium	85 <b>At</b> 209.99 Astat	86 <b>Rn</b> 222.02 Radon
7	87 <b>Fr</b> 223.02 Francium	88 <b>Ra</b> 226.03 Radium	89 <b>Ac</b> 227.03 Actinium	104 <b>Rf</b> 261.11 Rutherfordium	105 <b>Db</b> 262.11	106 <b>Sg</b> 263.12	107 <b>Bh</b> 262.12	108 <b>Hs</b>	109 <b>Mt</b>									

- le carbone est dans la 2ème période, 4ème groupe, il a donc 4 électrons de valence sur la 2ème couche
- le carbone est toujours tétravalent: 4 liaisons (paires d'électrons) avec d'autres atomes

## L'Équation de Schrödinger

- les électrons (= ondes) autour d'un noyau doivent satisfaire l'équation de Schrödinger

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

- l'équation de Schrödinger est une équation différentielle qui décrit les **états permis** (état stationnaire de la fonction d'onde  $\psi$ ) d'un électron dans le champ d'un noyau atomique
- si le résultat de l'opération du Hamiltonien  $\hat{H}$  sur la fonction d'onde  $\psi$  est proportionnel à  $\psi$ , alors  $\psi$  est un état permis et la constante de proportionnalité (valeur propre) est son énergie  $E$

- à une dimension: 
$$\hat{H}\psi(x) = -\frac{h^2}{8\pi^2 m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

- à trois dimensions: 
$$\hat{H}\psi(r) = -\frac{h^2}{8\pi^2 m} \nabla^2\psi(r) + V(r)\psi(r) = E\psi(r)$$

$$\hat{H}\psi(r) = -\frac{h^2}{8\pi^2 m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(r) + V(r)\psi(r) = E\psi(r)$$

- $\nabla^2$  est le Laplacien,  $V(r)$  l'énergie potentielle,  $m$  la masse de l'électron,  $h$  la constante de Planck

## Nombres Quantiques et Orbitales

- les orbitales atomiques sont les états stationnaires  $\psi$  d'un électron dans le champ d'un noyau atomique

Nom	NQ principal $n$	NQ azimuthal $\ell$	NQ magnétique $m$	NQ de spin $s$	électrons
1s	1	0	0	$+1/2, -1/2$	2
2s	2	0	0	$+1/2, -1/2$	2
2p	2	1	+1, 0, -1	$+1/2, -1/2$	6
3s	3	0	0	$+1/2, -1/2$	2
3p	3	1	+1, 0, -1	$+1/2, -1/2$	6
3d	3	2	+2, +1, 0, -1, -2	$+1/2, -1/2$	10

- chaque orbitale est décrite par un ensemble unique de nombres quantiques  $n$ ,  $\ell$ , et  $m$
- $n$ ,  $\ell$ ,  $m$  correspondent à l'énergie de l'électron, au moment angulaire et ses composantes vectorielles
- chaque orbitale est remplie par deux électrons avec des spin  $s$  différents (**principe d'exclusion de Pauli**)

## Représentation des Orbitales Atomiques

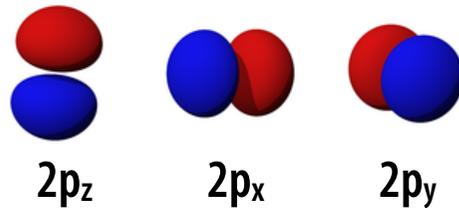
- les orbitales atomiques représente l'espace dans lequel l'électron a une certaine probabilité non-nulle d'être observé

.

1s

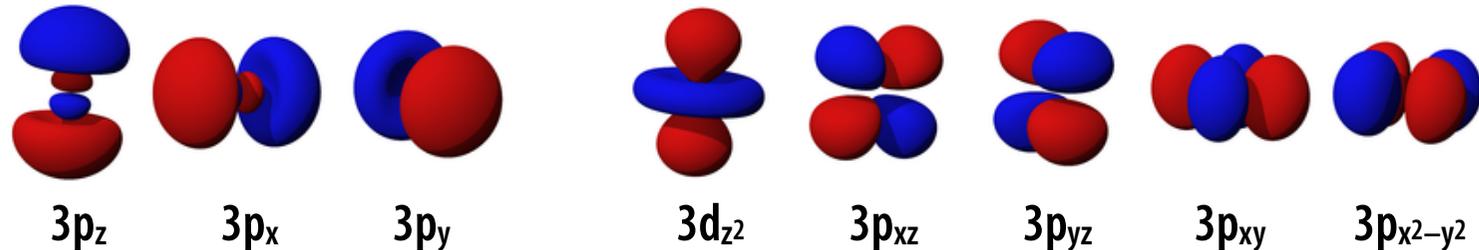
•

2s



•

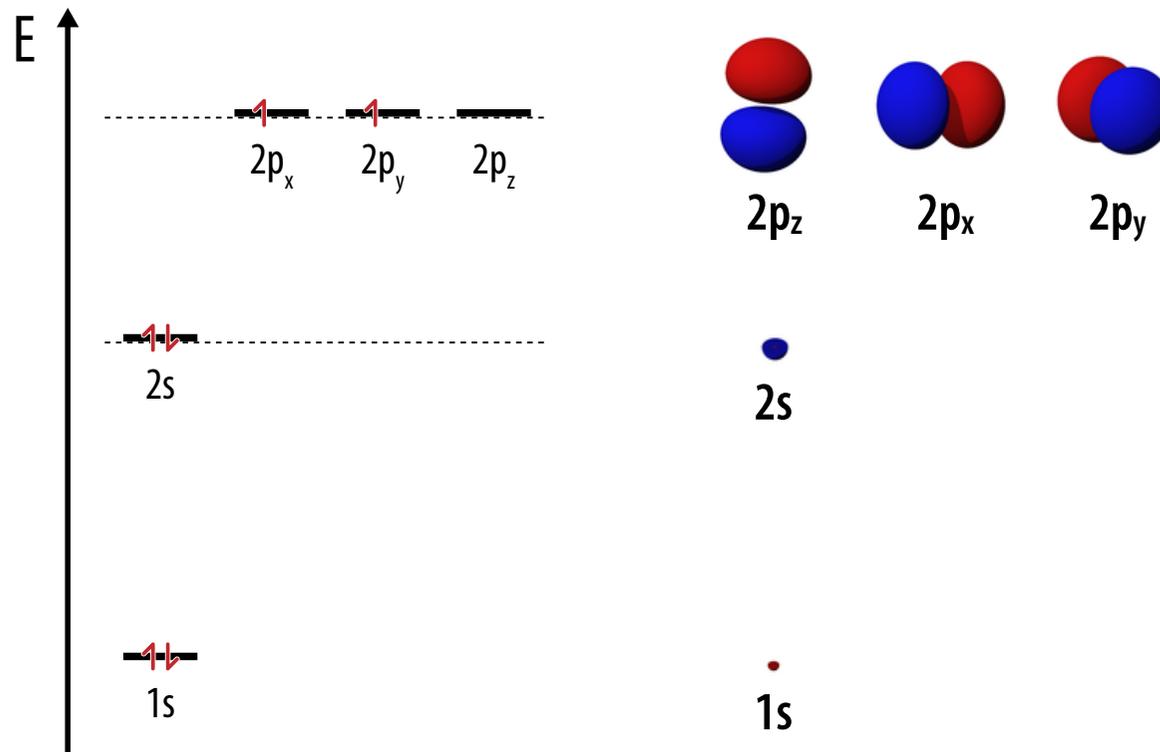
3s



- les illustrations montrent  $|\psi|^2$  représentant la densité de probabilité pour trouver un électron
- représentations approximatives des surfaces de contour pour une densité de probabilité  $|\psi|^2 = \text{const.}$
- les représentations utilisent souvent un code couleur pour la phase (signe) de  $\psi$

## Électrons de Valence et Configuration Électronique du Carbone

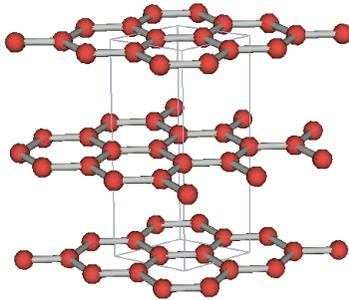
- les orbitales atomiques sont remplies en commençant par le plus bas niveau d'énergie (**principe d'Aufbau**)



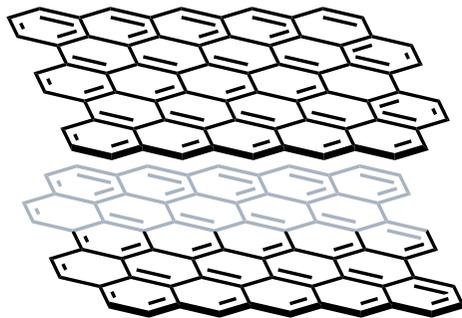
- la **couche de valence** est la couche remplie la plus externe et la plus haute en énergie (NQ  $n$  le plus élevé)
- seuls les électrons de la couche de valence sont utiles dans les liaisons chimiques et les réactions
- la configuration électronique du **carbone à l'état fondamental** est  $1s^2 2s^2 2p^2$

# Les Différentes Formes (Allotropes) du Carbone

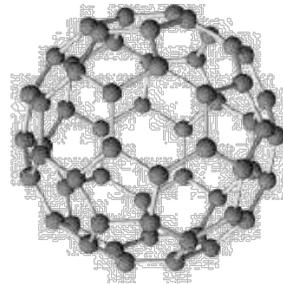
## Graphite



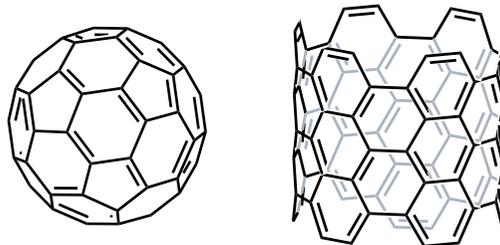
chaque carbone a 3 voisins  
chaque carbone a 4 liaisons



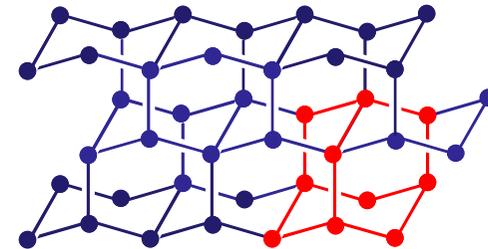
## Fullerènes, Nanotubes



chaque carbone a 3 voisins  
chaque carbone a 4 liaisons



## Diamant

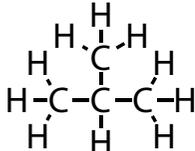
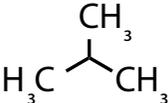
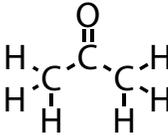
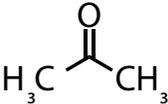
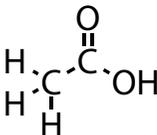
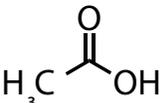
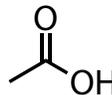
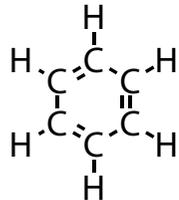
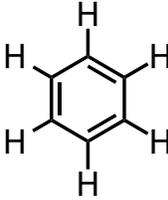


chaque carbone a 4 voisins  
chaque carbone a 4 liaisons



- le carbone est toujours tétravalent (connectés par 4 liaisons à d'autres atomes)
- géométrie de coordination variable: tétraédrique (4 voisins), trigonal (3 voisins), linéaire (2 voisins)

## Les Différents Types de Formule Chimique

nom usuel	nom IUPAC	formule brute	formule développée	formules topologiques		
isobutane	2-methylpropane	$C_4H_{10}$	$CH_3-CH(CH_3)-CH_3$			
acétone	propane-2-one	$C_3H_8O$	$CH_3-C(=O)-CH_3$			
acide acétique	acide éthanoïque	$C_2H_4O_2$	$CH_3-C(=O)-OH$ $CH_3COOH$			
benzène	benzène	$C_6H_6$	$C_6H_6$			
styrène	1-phényléthène	$C_8H_8$	$C_6H_5-CH=CH_2$	