

Aspects pédagogiques du jeu *Laboratorium*

Au cours d'une partie de *Laboratorium*, les joueurs réalisent la synthèse de molécules organiques à partir d'un choix de 10 réactifs simples. Le jeu peut principalement être exploité en support de l'enseignement de chimie à deux moments : soit en introduction, soit en récapitulatif de la matière de chimie organique.

Dans le premier cas, il sera utilisé au début de l'enseignement de chimie organique (après la première heure, voire en première séquence) afin d'illustrer l'existence d'un grand nombre de molécules organiques aux propriétés diverses et la synthèse de ces molécules à partir de petites molécules simples. Son exploitation peut même être envisagée pour faire découvrir la chimie organique (composition de toutes ces molécules à partir de carbone, auquel s'ajoutent l'hydrogène, l'oxygène...).

Dans le second cas, une partie de *Laboratorium* en fin de chapitre permet de rassembler la matière abordée (la synthèse organique, les différents composés (alcane, alcène) et les fonctions étudiés (acide carboxylique, alcool...)).

Dans ce dossier, vous trouverez d'une part un bref descriptif des molécules du jeu de base ainsi que les mots-clés en lien avec la matière de chimie organique pour chacune d'entre elles et, d'autre part, une extension au jeu proposant de nouvelles molécules-cibles pour un temps de jeu compatible avec l'horaire scolaire (molécules plus petites et plus simples).

Bien entendu, le jeu ne se limite pas aux molécules-cibles proposées. Vous pouvez créer vos propres molécules en fonction de la matière étudiée et du temps imparti. Certaines contraintes sont cependant à respecter pour la composition des molécules qui est, pour l'instant, limitée aux atomes de carbone, d'hydrogène et d'oxygène fournis avec le jeu de base. Voici quelques conseils pour le choix des réactifs selon le type de molécule-cible (pour des molécules simples non cycliques) :

- Alcanes : à partir des réactifs 1, 2, 6, 7 ;
- Alcènes : à partir des réactifs 1, 2, 5, 6, 7 ;
- Acides carboxyliques : à partir des réactifs 1, 2, 6, 7, (8), 9 (uniquement simples liaisons ; en présence de doubles liaisons : + réactif 5) ;
- Alcools : à partir des réactifs 1, 2, 3, (4), 6, 7, 9 (uniquement simples liaisons ; en présence de doubles liaisons : + réactif 5) ;
- Esters : à partir des réactifs 1, 2, 6, 7, 8 (uniquement simples liaisons, en présence de doubles liaisons : + réactif 5).

Cette liste des réactifs permettra de synthétiser toutes les molécules d'un type. Toutefois, ces réactifs ne seront pas nécessairement tous utiles pour la réalisation d'une partie de jeu ; nous conseillons d'affiner le choix des réactifs mis en jeu en fonction de la molécule-cible choisie afin de rendre la partie plus fluide et plus rapide (comme cela a été fait pour les différentes molécules du jeu de base et de l'extension).

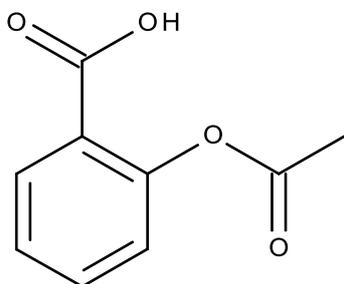
Table des matières

1) Descriptif des molécules du jeu de base

Aspirine.....	3
- Réaction d'estérification	
Cinnamaldéhyde.....	5
- Réaction de condensation aldolique	
Myrcène.....	8
- Réaction de polymérisation	
Linalol.....	10
- Chiralité	
Vanilline.....	13
Coumarine.....	15
- Réaction de Perkin (condensation d'aldéhydes)	
Resvératrol.....	17
- Stéréo-isomérisation	
2) Extensions (par ordre croissant de durée de jeu)	
Acide acétique.....	19
Iso-propanol.....	21
- Isomérisation de constitution	
Éthylène glycol.....	23
Iso-octane.....	24
- Isomérisation de constitution	

Aspirine ou Acide acétylsalicylique

Mots-clés : acide carboxylique, ester, réaction d'estérification



Formule moléculaire : $C_9H_8O_4$

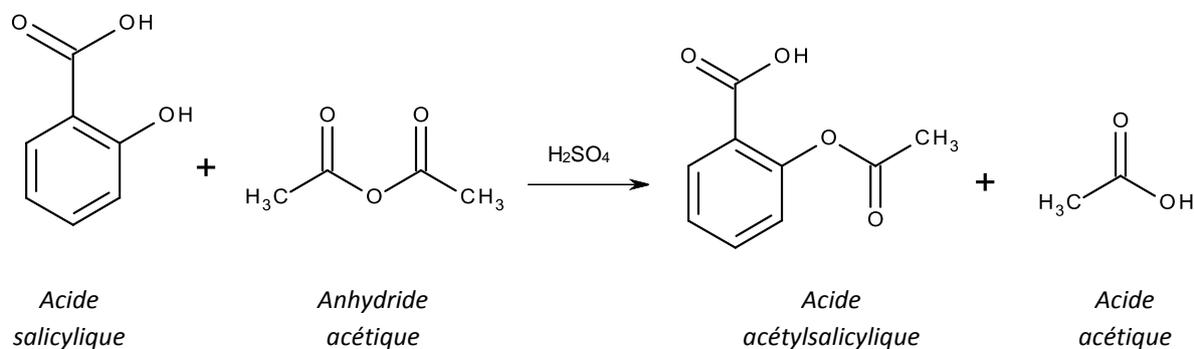


L'aspirine, aussi connue sous le nom d'acide acétylsalicylique, est un des médicaments les plus utilisés au monde. Elle est prescrite en cas de douleur, de fièvre, d'inflammation ainsi que pour empêcher la coagulation du sang.

Le papyrus Ebers, l'un des plus anciens traités médicaux connus de nos jours, révèle que, dès l'Antiquité, l'écorce de saule (du nom latin *Salix*) est utilisée pour soulager douleurs et fièvre. Ce n'est qu'au début du 19^{ème} siècle que le principe actif présent dans l'écorce sera identifié. En 1828, l'Allemand Joseph Buchner extrait de l'écorce de saule des cristaux jaunes qu'il dénomme *Salicine*. Le procédé d'extraction est amélioré par le français Henri Leroux l'année suivante et, en 1838, Raffaele Piria purifie la substance obtenue et l'appelle *Acide Salicylique*. L'utilisation de ce composé contre la douleur, la fièvre et les inflammations prend de l'ampleur au cours des décennies suivantes, mais est toutefois limitée par ses effets secondaires, notamment de graves brûlures d'estomac. La structure moléculaire de l'acide salicylique est identifiée en 1852 par Charles Gerhardt qui, en remplaçant le groupement hydroxyle par un groupement acétyle, est le premier à synthétiser l'*Acide Acétylsalicylique* en 1853. Malheureusement, le composé obtenu est impur et instable. Des chimistes de la société Bayer parviennent à synthétiser l'acide acétylsalicylique dans sa forme la plus pure. Ce nouveau composé présente les mêmes propriétés antalgiques, antipyrétiques et anti-inflammatoires que l'acide salicylique avec des effets secondaires moins prononcés. La société Bayer dépose le brevet du procédé sous la dénomination d'*Aspirine* et commercialise le médicament du même nom. Dans les années 1960, les propriétés d'antiagrégant plaquettaire (qui empêche la coagulation du sang) de l'Aspirine sont mises en évidence. À l'heure actuelle, l'Aspirine est l'un des médicaments les plus consommés au monde (environ 40 000 tonnes/an) contre les douleurs, la fièvre, comme anti-inflammatoire et pour le traitement des maladies cardiovasculaires.

1) Descriptif des molécules du jeu de base

L'acide acétylsalicylique est formé par une **réaction d'estérification** entre l'acide salicylique et l'anhydride acétique, en présence d'acide sulfurique concentré. Lors de cette réaction, le groupement hydroxyle (-OH) de l'acide salicylique réagit avec l'anhydride acétique pour former un groupement ester (-OCOCH₃). Les produits de la réaction sont l'acide acétylsalicylique et l'acide acétique.



L'acide acétylsalicylique purifié se présente sous forme de cristaux en forme d'aiguille.

Références

Valentin Fuster and Joseph M. Sweeny, "Aspirin - A Historical and Contemporary Therapeutic Overview", *Circulation* 2011, 123, 768-778.

Arthur I. Vogel, "A text-book of practical organic chemistry, 3rd Edition", Longman Group Ltd, Grande Bretagne, 1970, p 996.

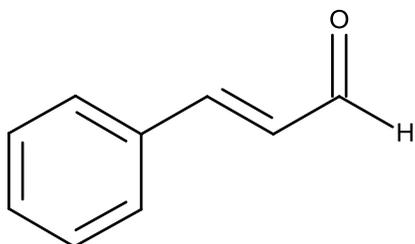
K. Peter C. Vollhardt and Neil E. Schore, "Traité de chimie organique, 2^e Édition – Traduction de Paul Depovere », De Boeck Université, Italie, 1995, p880.

<https://en.wikipedia.org/wiki/Aspirin> ; https://fr.wikipedia.org/wiki/Acide_ac%C3%A9tylsalicylique

Images : <http://www.bayer.com/en/aspirin.aspx>

Cinnamaldéhyde ou Aldéhyde cinnamique

Mots-clés : aldéhyde, réaction de condensation aldolique



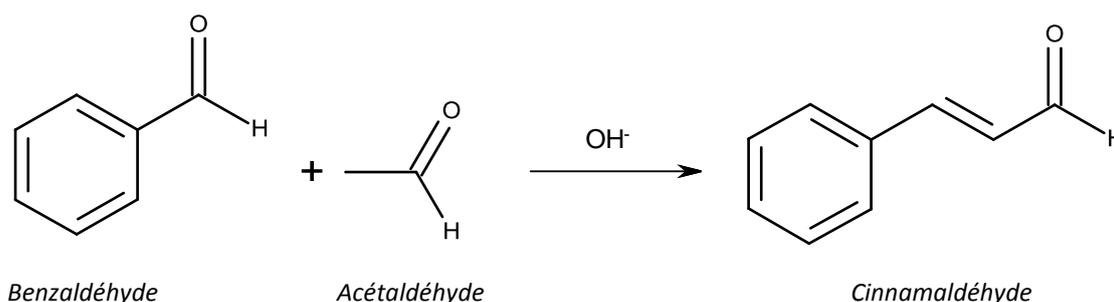
Formule moléculaire : C_9H_8O



Derrière ce nom se cache la molécule donnant son arôme à la cannelle (comme en témoigne son nom dérivant de *cinnamon* en anglais, signifiant cannelle). Elle est utilisée dans l'industrie alimentaire ainsi que dans la parfumerie pour ses propriétés gustatives et olfactives.

Le cinnamaldéhyde a été isolé en 1834 par Jean-Baptiste Dumas et Eugène-Melchior Péligot à partir de l'huile essentielle de cannelle. Le chimiste Luigi Chiozza sera le premier à le synthétiser en laboratoire en 1856.

Le cinnamaldéhyde est formé par la *condensation aldolique* du benzaldéhyde et de l'acétaldéhyde.



La condensation aldolique est une réaction classique des aldéhydes qui aboutit à la formation d'une liaison carbone-carbone. La réaction de condensation est catalysée par une base (ex : NaOH) et se déroule en deux étapes : la formation d'un aldol suivie par sa déshydratation.

En milieu basique, l'aldéhyde (dit « énoisable ») perd un proton en position α de la fonction aldéhydique pour former l'ion énolate correspondant. Celui-ci réagit ensuite avec le groupe carbonyle d'un autre aldéhyde, conduisant à la formation d'un aldol (aldéhyde-alcool). On peut déshydrater un aldol en chauffant le milieu réactionnel basique.

1) Descriptif des molécules du jeu de base

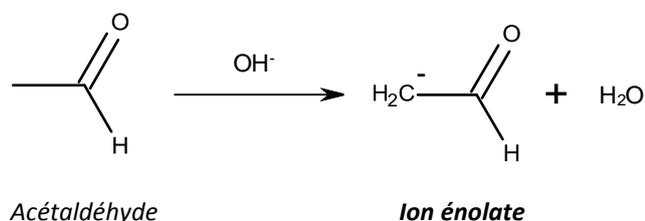
Notons que la condensation de deux aldéhydes ayant chacun des atomes d'hydrogène en position α (aldéhydes dits « énoles ») donne lieu à un mélange complexe de produits. Ceci peut être évité si l'un des deux aldéhydes ne possède pas d'atome d'hydrogène en position α (aldéhyde dit « non-énoles »).

Dans le cas de la synthèse présentée, le benzaldéhyde ne possède pas d'hydrogène en position α , au contraire de l'acétaldéhyde. C'est donc ce dernier qui réagit avec l'ion hydroxyde pour former l'ion énolate. Afin d'éviter la réaction compétitive de condensation des molécules d'acétaldéhyde entre elles dans le milieu réactionnel, l'acétaldéhyde est ajouté lentement au benzaldéhyde. De la sorte, le cinnamaldéhyde est l'unique produit de la réaction. Il se présente sous forme d'un liquide jaune visqueux et plus dense que l'eau.

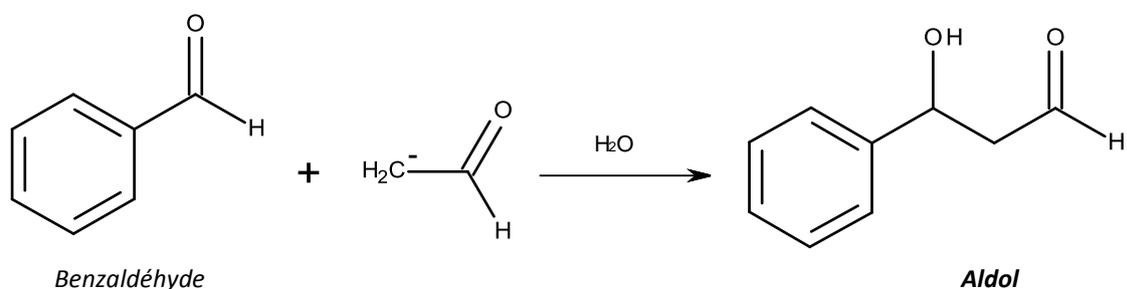
Mécanisme de la condensation aldolique du benzaldéhyde et de l'acétaldéhyde :

1°) Formation de l'aldol

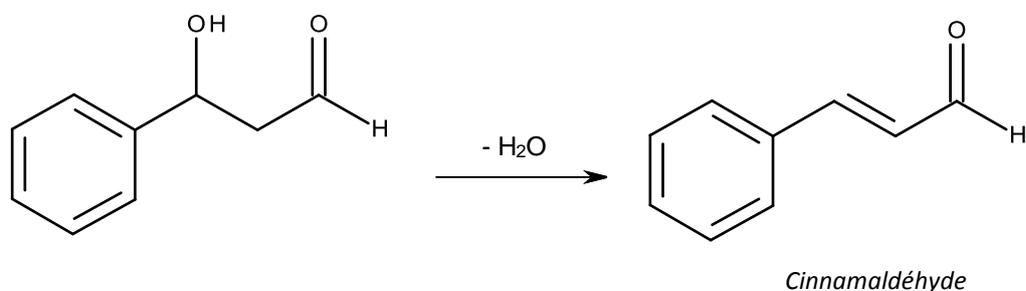
Formation de l'énolate



Attaque nucléophile et protonation



2°) Déshydratation de l'aldol



1) Descriptif des molécules du jeu de base

Références

John H. Richards, Donald J. Cram, George S. Hammond, « *Éléments de chimie organique – Traduction Philibert L'Écuyer* », McGraw-Hill, Montréal, 1968, p205-207.

Peter Vollhardt and Neil Schore, "*Traité de chimie organique, 2^e Édition – Traduction de Paul Depovere* », De Boeck Université, Italie, 1995, p685-693.

Charles Sell, « *The chemistry of fragrance: from perfumer to consumer, 2nd Edition* », RSC Publishing, Grande-Bretagne, 2006, p22-23.

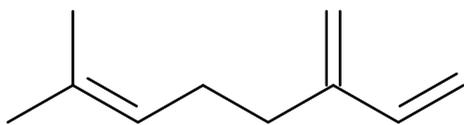
<https://en.wikipedia.org/wiki/Cinnamaldehyde> ;

https://fr.wikipedia.org/wiki/Ald%C3%A9hyde_cinnamique

Image : <http://www.pixabay.com>

Myrcène

Mots-clés : alcène, polymère, réaction de polymérisation



Formule moléculaire : $C_{10}H_{16}$



Le myrcène est une molécule composée uniquement d'atomes d'hydrogène et de carbone, ces derniers étant liés entre eux par des simples ou des doubles liaisons. Dans l'industrie, le myrcène est utilisé dans la fabrication de parfums.

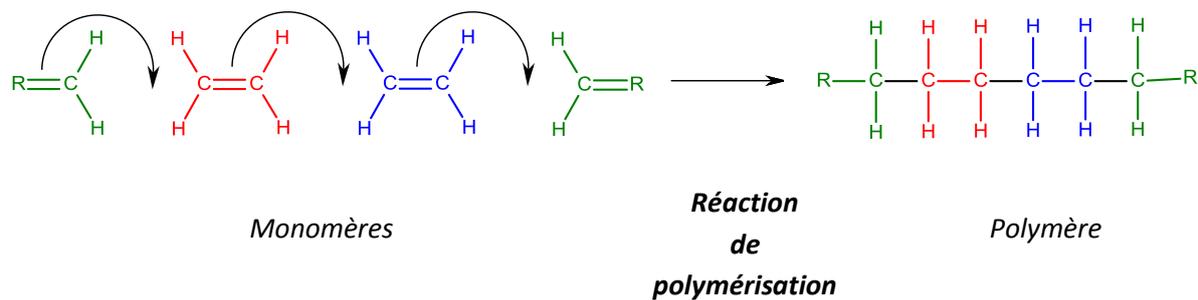
Le myrcène fait partie de la famille des terpènes, produits naturels formés par l'association de composés possédant le squelette carboné de l'isoprène (unité de 5 atomes de carbone). Plus précisément, il s'agit d'un monoterpène composé de 10 atomes de carbone, donc de deux unités isoprène. Les terpènes constituent une classe importante et variée d'hydrocarbures qui sont utilisés depuis l'Antiquité notamment comme arômes et parfums.

Le myrcène se trouve à l'état naturel dans de nombreuses plantes comme le thym, l'ylang-ylang, le laurier, la citronnelle ou le cannabis, mais aucun procédé économique d'extraction ni de synthèse n'a pu être développé à l'échelle industrielle. Les meilleurs rendements sont obtenus par pyrolyse du β -pinène (composant de l'huile de térébenthine), comme l'ont découvert Léo Goldblatt et Samuel Palkin en 1947. Il se présente sous forme d'un liquide incolore possédant une odeur caractéristique de géranium. Il est instable et polymérise spontanément à température ambiante. Par conséquent, le myrcène n'est pas utilisé directement dans la fabrication de parfums, mais sert de précurseur à la préparation de nombreuses molécules aromatiques telles que le linalol, le citronellol, le géranol, etc...

Le myrcène est un dimère d'isoprène, c'est-à-dire qu'il est constitué de deux unités, ou monomères, d'isoprène (un alcène de formule C_5H_8).

Les polymères sont des grandes molécules (dites « macromolécules ») constituées de la répétition de petites unités, appelées monomères. Les polymères d'addition sont majoritairement formés à partir de molécules d'alcènes qui réagissent entre elles lors d'une **réaction de polymérisation** : en présence d'un catalyseur (acide, radical libre, base ou métal de transition), les centres insaturés de l'alcène monomère forment des liaisons carbone-carbone entre eux, donnant naissance à un polymère composé d'un grand nombre d'alcènes monomères.

1) Descriptif des molécules du jeu de base



Références

Arno Behr and Leif Johnen, "Myrcene as a natural base chemical in sustainable chemistry: a critical review", *ChemSusChem* 2009, 2, 1072-1095.

Peter Vollhardt and Neil Schore, "Traité de chimie organique, 2^e Édition – Traduction de Paul Depovere", De Boeck Université, Italie, 1995, p442-448.

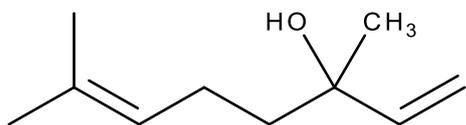
John H. Richards, Donald J. Cram, George S. Hammond, « *Éléments de chimie organique – Traduction Philibert L'Écuyer* », McGraw-Hill, Montréal, 1968, p358-359.

<https://en.wikipedia.org/wiki/Myrcene> ; <https://fr.wikipedia.org/wiki/Myrc%C3%A8ne>

Images : <http://www.pixabay.com>

Linalol ou Alcool linalylique

Mots-clés : alcool, chiralité



Formule moléculaire : $C_{10}H_{18}O$



Le linalol (3,7-diméthyl-1,6-octadién-3-ol) est une molécule semblable au myrcène qui possède un groupement $-OH$ supplémentaire. Cette simple différence change néanmoins ses applications : le linalol est présent dans les huiles essentielles de lavande et de bois de rose.

Le linalol est un alcool monoterpénique que l'on retrouve dans de nombreuses plantes telles que la lavande, la menthe, la coriandre et le bois de rose. Il a été synthétisé pour la première fois en 1919 par Léopold Ruzicka, qui reçut le Prix Nobel de Chimie en 1939 pour l'ensemble de ses travaux sur les terpènes. Il s'agit d'une molécule *chirale* qui existe à l'état naturel sous forme de deux *énantiomères* : le R-linalol(-) et le S-linalol(+).

La chiralité est une propriété tridimensionnelle des molécules qui peut notamment conférer une perception aromatique différente pour deux molécules ayant la même formule moléculaire.

Certains objets sont superposables à leur image dans un miroir ; tel est le cas d'une fourchette, d'une bouteille ou de l'Atomium. D'autres, au contraire, ne sont pas superposables à leur image dans un miroir. C'est le cas d'une main (la main gauche est l'image de la main droite dans un miroir), d'une chaussure ou d'une vis.

Un objet est chiral s'il n'est pas superposable à son image dans un miroir ($\chi\epsilon\iota\rho$ en grec ancien signifie main). Si l'objet est superposable à son image spéculaire, on dit qu'il est achiral. Deux objets chiraux images l'un de l'autre dans un miroir et non superposables sont appelés des **énantiomères**.

Il en va de même pour les molécules : certaines sont chirales, d'autres sont achirales. Deux molécules chirales images l'une de l'autre dans un miroir et non superposables sont aussi appelées des énantiomères. Ces deux molécules ont la même formule moléculaire et possèdent les mêmes fonctions chimiques, mais n'ont pas la même configuration. Un mélange en égale proportion de deux énantiomères est appelé un mélange racémique.

1) Descriptif des molécules du jeu de base

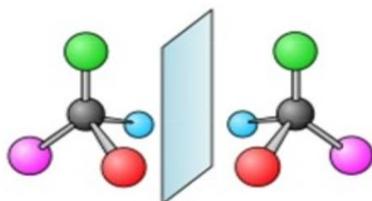
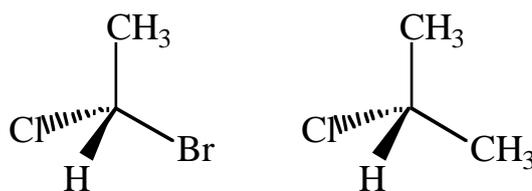


Schéma d'une molécule chirale et de son image dans un miroir.

Comment déterminer si une molécule est chirale ? Une molécule est chirale si et seulement si elle ne possède pas d'axe de symétrie impropre S_n (ou axe de rotation-réflexion S_n). Pour la grande majorité des cas, les molécules chirales sont des molécules qui ne possèdent ni plan ni centre de symétrie. Pour savoir si une molécule est chirale ou non, il faut rechercher si elle possède ou non soit un plan, soit un centre de symétrie, ou voir si elle est superposable à son image spéculaire.



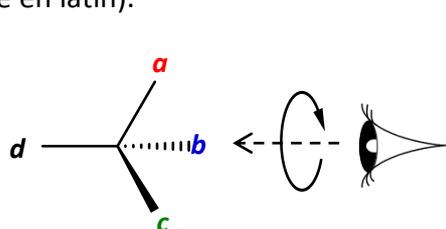
Exemple d'une molécule chirale à gauche et d'une molécule achirale à droite.

Par exemple, on ne trouve aucun plan de symétrie dans la molécule de gauche ci-dessus. Elle ne possède pas non plus de centre de symétrie. Cette molécule est chirale. Le plan oblique qui contient H, C et Cl est plan de symétrie pour la molécule de droite. Cette molécule est achirale. Si un atome de carbone porte quatre atomes ou groupes d'atomes différents, il est asymétrique ou stéréogénique.

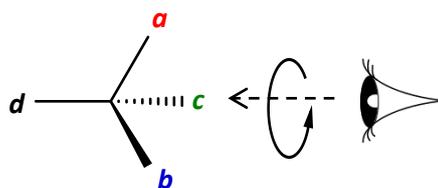
Comment distinguer un énantiomère de l'autre ? Les propriétés physiques et chimiques des énantiomères étant identiques, il n'est pas aisé de faire la distinction entre eux. Une substance chirale possède cependant toujours une propriété particulière, que ne possèdent jamais les substances achirales, appelée activité optique ou pouvoir rotatoire : si l'un des énantiomères d'une substance chirale est traversé par un faisceau de lumière polarisée plane, il provoque une rotation du plan de polarisation de cette lumière. Si la même expérience est réalisée avec l'image spéculaire du premier énantiomère, le plan de polarisation de la lumière sera dévié dans la direction opposée. Une molécule chirale sera ainsi dextrogyre (*dexter*, droit en latin ; le composé est désigné comme l'énantiomère (+)) et son énantiomère lévogyre (*laevus*, gauche en latin ; le composé est l'énantiomère (-)), ou inversement.

1) Descriptif des molécules du jeu de base

Nomenclature des stéréocentres : afin d'indiquer la chiralité dans la molécule, le stéréocentre est dit **R** ou **S**. Pour déterminer par exemple la chiralité au niveau d'un carbone asymétrique, on classe les atomes qui sont attachés au stéréocentre selon un ordre décroissant de priorité en fonction de leur numéro atomique. L'atome qui a le numéro atomique le plus grand a la priorité la plus élevée ; ce sera l'atome *a*. Viennent ensuite *b*, *c* et *d*, qui a la priorité la plus basse, c'est-à-dire le numéro atomique le plus faible. On positionne alors la molécule de façon à ce que l'atome *d* (priorité la plus faible) soit placé à l'opposé (le plus loin possible) de l'œil de l'observateur. Si le défilé de *a* à *b* à *c* se fait vers la droite (dans le sens horlogique), la configuration du stéréocentre est dite R (*rectus*, droit en latin). Si la séquence se fait vers la gauche (dans le sens anti-horlogique), le stéréocentre est S (*sinister*, gauche en latin).

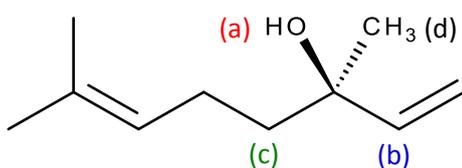


Énantiomère R

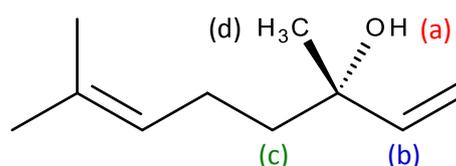


Énantiomère S

Les deux énantiomères du linalol présentent des propriétés olfactives différentes. Le R-linalol(-), aussi dénommé licaréol, a une odeur caractéristique de lavande et est boisée. Il se trouve entre autres dans la lavande, les baies de laurier,... Le S-linalol(+), ou coriandrol, possède une odeur florale et fraîche. Comme son nom l'indique, il est l'un des constituants principaux de l'huile de coriandre.



R-linalol(-) ou licaréol



S-linalol(+) ou coriandrol

Références

Peter Vollhardt and Neil Schore, "Traité de chimie organique, 2^e Édition – Traduction de Paul Depovere », De Boeck Université, Italie, 1995, « Chapitre 5 : Stéréo-isomérie » p136.

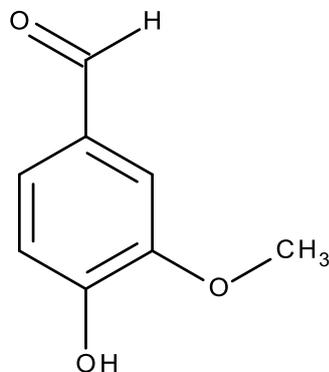
Charles Sell, « The chemistry of fragrance: from perfumer to consumer, 2nd Edition », RSC Publishing, Grande-Bretagne, 2006, p22-23.

<https://en.wikipedia.org/wiki/Linalool>

Images : <https://pixabay.com/>

Vanilline

Mots-clés : aldéhyde, éther, phénol



Formule moléculaire : $C_8H_8O_3$

La vanilline, comme son nom l'indique, est une molécule présente dans les gousses de vanille. Elle est bien entendu utilisée principalement dans l'industrie alimentaire en tant qu'arôme. Il s'agit de l'arôme le plus fabriqué dans le monde.

La plante de vanille, aussi appelée vanillier, fait partie de la famille des orchidées. Originaires du Mexique, elle se cultive dans un climat tropical, chaud et humide. Les Aztèques utilisaient déjà la vanille pour aromatiser leur boisson à base de cacao. Le Mexique conserve le monopole de la vanille jusqu'au 19^{ème} siècle, toutes les tentatives de production de vanille en dehors de ces régions se soldant par des échecs. Le belge Charles Morren, célèbre pour sa découverte de la fécondation artificielle de la vanille en 1836, est le premier à produire des gousses de vanille ailleurs qu'au Mexique. À l'heure actuelle, la pollinisation de la fleur de vanille est encore réalisée manuellement grâce au procédé mis au point en 1841 par Edmond Albius, employé dans une plantation de vanille sur l'île de la Réunion.

La saveur de la vanille provient de la vanilline (4-hydroxy-3-méthoxybenzaldéhyde), l'un des principaux constituants de la gousse de vanille, associée à de nombreux autres composés. Cette molécule n'est toutefois pas présente telle quelle dans la gousse verte de vanille sur la plante ; elle s'y trouve sous forme de glycoside et son extraction nécessite une procédure qui s'étale sur plusieurs mois. Alors que 12 000 tonnes de vanilline sont consommées chaque année, seulement 20 tonnes sont extraites naturellement des gousses de vanille. Il existe plusieurs méthodes de synthèse de la vanilline. La première a été développée en 1874 par Ferdinand Tiemann et Wilhelm Haarmann (qui fondèrent la compagnie *Haarmann and Reimer* pour en faire la production industrielle). Deux ans plus tard, la synthèse de la vanilline à partir de guaiacol (2-méthoxyphénol) est mise au point par Karl Reimer. Ce procédé est aujourd'hui le plus répandu pour la production industrielle de vanilline.

Références

S. Ramachandra Rao and G. Ravishankar, « Vanilla flavor: production by conventional and biotechnological routes – A review », *J. Sci. Food Agric.* 2000, 80, 289-304.

Charles Sell, « *The chemistry of fragrance: from perfumer to consumer, 2nd Edition* », RSC Publishing, Grande-Bretagne, 2006, p22-23.

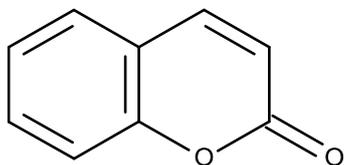
<https://en.wikipedia.org/wiki/Vanillin>

Images : V. Fromont

<http://www.photos-gratuites.org/photo-vanille.html>

Coumarine

Mots-clés : ester cyclique



Formule moléculaire : $C_9H_6O_2$

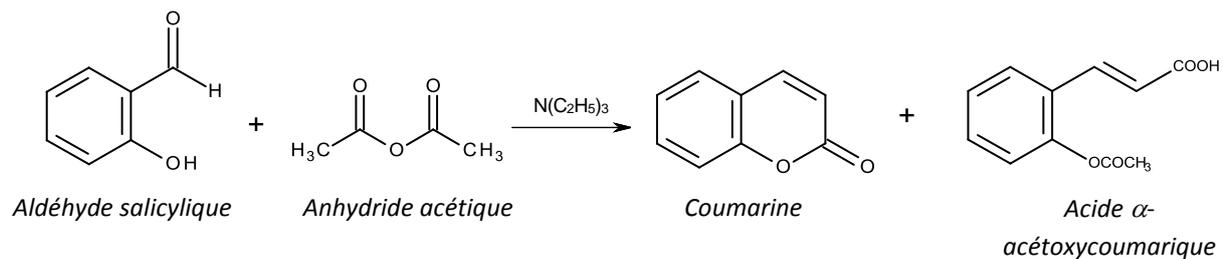


La coumarine (2H-1-benzopyrane-2-one) est une molécule présente dans les fèves tonka rappelant les odeurs de vanille ainsi que de foin fraîchement coupé. Elle fut utilisée dans le milieu de la parfumerie, mais son usage est aujourd'hui réglementé à cause d'effets néfastes pour le foie.

La coumarine a été isolée en 1820 par A. Vogel dans les fèves tonka de l'arbre gaïac de Cayenne poussant en Amérique tropicale (arbre appelé *kumarú* dans une langue amérindienne, à l'origine du nom coumarine), puis synthétisée en 1868 par William Perkin, qui donna son nom à la réaction impliquée. La production industrielle de la coumarine commença dès 1886 au sein de la société *Harmann and Reimer*. La coumarine connut rapidement un vif succès dans le domaine de la parfumerie pour sa capacité à s'associer facilement avec d'autres arômes et produire des senteurs vanillée et de foin fraîchement coupé. Son utilisation dans la composition des parfums *Fougère Royale* de Houbigant en 1882 et *Jicky* de Guerlain en 1889 marque un tournant dans l'histoire des parfums et arômes de synthèse. À l'heure actuelle, la coumarine entre dans la composition de 90 % des parfums. Sa consommation dans les aliments et dans les parfums a été récemment réglementée par l'Agence Européenne de la Santé suite à la découverte d'une faible toxicité hépatique.

La réaction de Perkin consiste en la condensation d'un aldéhyde aromatique avec un anhydride acide (l'anhydride acétique) en présence d'un catalyseur basique (l'acétate de sodium ou de potassium, ou la triéthylamine). Le précurseur utilisé pour la synthèse de la coumarine est l'aldéhyde salicylique. La coumarine se présente sous forme de cristaux incolores à blancs à l'odeur caractéristique des gousses de vanille.

1) Descriptif des molécules du jeu de base



Références

Arthur I. Vogel, "A text-book of practical organic chemistry, 3rd Edition", Longman Group Ltd, Grande Bretagne, 1970, p706-708 ; p713.

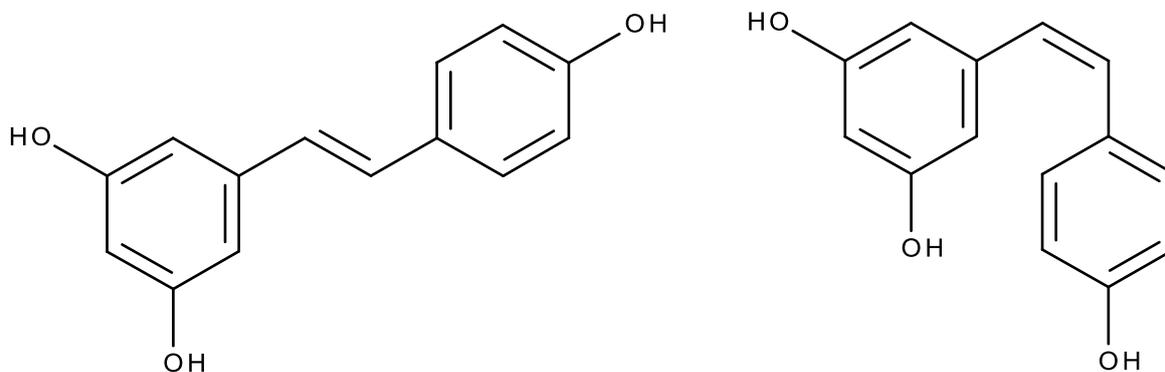
<https://fr.wikipedia.org/wiki/Coumarine>

<https://en.wikipedia.org/wiki/Coumarin>

Images : <https://pixabay.com/>

Resvératrol

Mots-clés : alcène, stéréo-isomère, phénol



Trans-Resvératrol

Formule moléculaire : $C_{14}H_{12}O_3$

Cis-Resvératrol

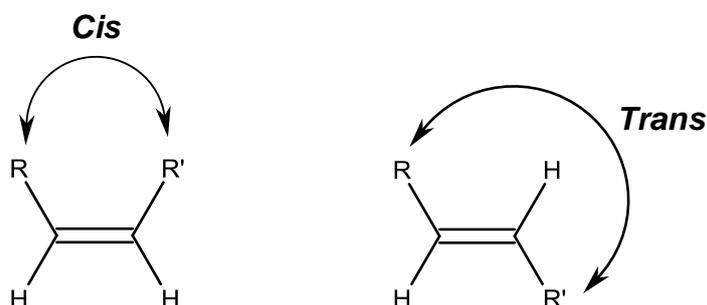


Le resvératrol est une molécule abondante dans le raisin, et donc également dans le vin qui en est produit. Il s'agit d'une molécule aux propriétés anti-oxydantes, c'est-à-dire qu'elle neutralise certaines molécules très réactives pouvant dégrader les protéines et les cellules dans l'organisme.

Le resvératrol a été identifié dans la peau de raisin dans les années '70 et mis en évidence dans le vin dans les années '90. Il s'agit d'un polyphénol (un phénol est un cycle benzénique substitué par un ou des groupes hydroxyles) qui existe sous forme de deux *stéréo-isomères* : le *trans*-resvératrol et le *cis*-resvératrol.

Les stéréo-isomères sont des isomères de même structure et connectivité (les atomes sont connectés dans le même ordre) mais qui diffèrent par leur arrangement spatial. Ainsi, dans le cas d'une double liaison disubstituée, les substituants peuvent se trouver du même côté de la double liaison ou du côté opposé. Le premier est l'isomère *cis* et le second l'isomère *trans*. Les isomères *cis* et *trans* ne peuvent être intervertis qu'en rompant des liaisons.

1) Descriptif des molécules du jeu de base



Le Resvératrol est une phytoalexine, c'est-à-dire une substance qui est produite en réponse à un stress environnemental (comme l'exposition à des rayons ultraviolets ou à l'ozone) ou à des agressions pathogènes (telles qu'une attaque fongique du mildiou) et dont le rôle est de contenir localement les dégâts de l'agression. Il fait partie de la classe des stilbènes et est connu pour ses propriétés anti-oxydantes. Les raisins et les fèves de cacao sont parmi les fruits les plus riches en resvératrol, faisant du vin et du chocolat les sources alimentaires principales de ce composé. Du fait de sa présence dans le vin, le resvératrol a d'ailleurs attiré l'attention des chercheurs sur ses propriétés anti-oxydantes et anti-coagulantes qui pourraient élucider le « French paradox », nom donné au phénomène observé dans les régions méditerranéennes où un faible taux de maladies cardiovasculaires coexiste avec une alimentation pourtant riche en graisse. L'isomère *trans* du resvératrol est le plus abondant dans les plantes et possède des propriétés anti-oxydantes supérieures à celles de la forme *cis*.

Références

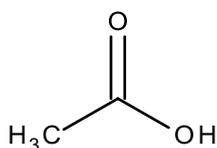
<https://fr.wikipedia.org/wiki/Resv%C3%A9ratrol>

<http://www.nutranews.org/sujet.pl?id=279>

Images : <https://pixabay.com/>

Acide acétique

Mots-clés : *acide carboxylique*



Formule moléculaire : $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$



L'acide acétique, l'un des plus simples acides carboxyliques, est le composant principal, après l'eau, du vinaigre. On le reconnaît facilement à son odeur piquante caractéristique.

Molécule-cible à imprimer : [Acide_acetique.pdf](#)

Réactifs suggérés : 1, 2, 6, 7, 9

« Acide acétique » est le nom courant de l'acide éthanoïque. Il dérive du mot latin *acetum* désignant le vinaigre, qui est produit naturellement lorsque des boissons alcoolisées comme le vin et la bière sont exposées à l'air.

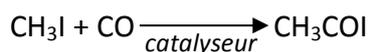
L'acide acétique est majoritairement produit de manière synthétique pour l'industrie chimique par *carbonylation du méthanol*. Toutefois, l'acide acétique destiné à la fabrication du vinaigre est obtenu par le processus naturel de fermentation bactérienne.

Le procédé de carbonylation du méthanol consiste en la réaction du méthanol avec le monoxyde de carbone pour former l'acide acétique : $\text{CH}_3\text{OH} + \text{CO} \longrightarrow \text{CH}_3\text{COOH}$. Il se déroule en 3 étapes.

1°) Formation de l'intermédiaire iodométhane



2°) Réaction de carbonylation



3°) Formation de l'acide acétique



La deuxième étape du procédé, la réaction de carbonylation, requiert la présence d'un catalyseur. Le procédé d'origine, connu sous le nom de « procédé Monsanto », fait intervenir un complexe métallique à base de rhodium. Actuellement, il a été complètement supplanté

2) Extensions

par le « procédé Cativa », plus économique et plus respectueux de l'environnement, qui est un procédé similaire où le catalyseur à base de rhodium a été remplacé par un complexe à base d'iridium.

Pur, il est appelé *acide acétique glacial*. Il s'agit d'un liquide incolore caractérisé par une température de fusion de 16,6 °C et une température d'ébullition de 117,9 °C. Il s'agit d'un acide faible dont le pKa vaut 4,74.

Références

https://fr.wikipedia.org/wiki/Acide_ac%C3%A9tique

James F. Roth, "The Production of Acetic Acid – Rhodium catalyzed carbonylation of methanol", *Platinum Metals Rev.* 1975, 19(1), 12-14.

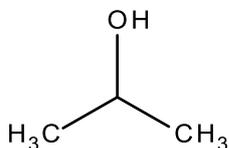
Jane H. Jones, "The Cativa™ Process for the Manufacture of Acetic Acid", *Platinum Metals Rev.* 2000, 44(3), 94-105.

Peter Vollhardt and Neil Schore, "Traité de chimie organique, 2^e Édition – Traduction de Paul Depovere », De Boeck Université, Italie, 1995, « Chapitre 19 : Les acides carboxyliques » p719.

Image : <https://pixabay.com/>

Iso-propanol

Mots-clés : alcool, isomère de constitution (position)



Formule moléculaire : $\text{C}_3\text{H}_8\text{O}$



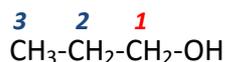
L'iso-propanol, ou alcool iso-propylique, a de nombreuses applications pharmaceutiques (comme désinfectant) et industrielles (comme solvant). C'est également un très bon dégraissant.

Molécule-cible à imprimer : Isopropanol.pdf

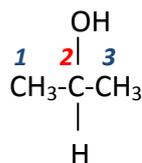
Réactifs suggérés : 1, 2, 3, 4

Le propan-2-ol, couramment appelé iso-propanol ou encore alcool isopropylique, est le plus simple des alcools secondaires. Il est un *isomère de constitution* du propan-1-ol (propanol ou alcool propylique).

Les isomères de constitution (ou de structure) ont la même formule moléculaire mais ils présentent des différences dans l'enchaînement des atomes (connectivité différente). L'alcool de formule moléculaire $\text{C}_3\text{H}_8\text{O}$ existe sous forme de deux isomères : le propan-1-ol (communément appelé propanol) qui possède le groupement hydroxyle sur l'un des carbones terminaux et le propan-2-ol qui porte la fonction alcool sur le carbone central. Il s'agit de deux isomères de constitution différant par la *position* du groupement fonctionnel alcool. Afin de localiser les positions tout au long de la chaîne, les atomes de carbone sont numérotés en commençant par l'extrémité la plus proche du groupement OH.



Propan-1-ol



Propan-2-ol

2) Extensions

Les propriétés physiques des isomères de constitution sont différentes. Ainsi, le propanol a une température de fusion de $-126,5\text{ °C}$ et une température d'ébullition de $97,4\text{ °C}$; ces températures sont respectivement de $-89,5\text{ °C}$ et $82,4\text{ °C}$ pour l'isopropanol.

Références

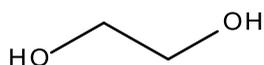
https://en.wikipedia.org/wiki/Isopropyl_alcohol

Peter Vollhardt and Neil Schore, *“Traité de chimie organique, 2^e Édition – Traduction de Paul Depovere »*, De Boeck Université, Italie, 1995, « Chapitre 8 : Le groupe fonctionnel hydroxyle » p238.

Image : <https://pixabay.com/>

Éthylène glycol

Mots-clés : diol



Formule moléculaire : C₂H₆O₂



L'éthylène glycol est composé de deux atomes de carbone possédant chacun un groupement -OH. Il est très utilisé dans le secteur automobile pour ses propriétés d'antigel.

Molécule-cible à imprimer : Ethylene_glycol.pdf

Réactifs suggérés : 1, 2, 3, 4

L'éthylène glycol, ou éthane-1,2-diol, fait partie des glycols, des composés qui possèdent deux groupements hydroxyles, également appelés diols. Si les deux hydroxyles sont portés par le même atome de carbone, le diol est dit « géminal » ; si les deux OH se trouvent sur deux atomes de carbone adjacents, il est dit « vicinal ». L'éthylène glycol est le plus simple des diols vicinaux.

Il a été synthétisé pour la première fois en 1856 par le chimiste français Charles Wurtz qui nomma ce nouveau composé « glycol » car il présentait des propriétés proches à la fois de l'éthanol et de la glycérine, entre lesquels il se situait. L'éthylène glycol ne trouva des applications qu'au cours de la seconde guerre mondiale comme remplaçant de la glycérine pour la fabrication de certains explosifs. Sa production industrielle et sa commercialisation se développèrent alors au profit des fabricants de dynamite. Par la suite, l'éthylène glycol prit une place importante dans l'industrie automobile grâce à ses propriétés antigel notamment et dans l'industrie du plastique comme précurseur pour la synthèse du polyéthylène téréphtalate (utilisé pour fabriquer les bouteilles en plastique).

Références

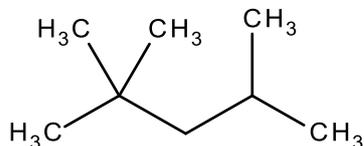
https://en.wikipedia.org/wiki/Ethylene_glycol#cite_note-10

<http://antifreeze-science.weebly.com/>

Images : <https://pixabay.com/>

Iso-octane

Mots-clés : *alcane, isomère de constitution (chaîne)*



Formule moléculaire : C_8H_{18}



L'iso-octane est composé uniquement d'atomes de carbone et d'hydrogène reliés entre eux par des liaisons simples. Étant très résistant à l'auto-inflammation, c'est l'un des meilleurs carburants.

Molécule-cible à imprimer : [Isooctane.pdf](#)

Réactifs suggérés : 1, 2, 6, 7

Il fait partie de la classe des alcanes, c'est-à-dire les hydrocarbures qui ne contiennent que des liaisons simples, de formule générale C_nH_{2n+2} . C'est un alcane dit « ramifié » de même formule moléculaire que l'octane, alcane à chaîne linéaire. Il s'agit donc d'un *isomère de constitution* de l'octane.

Les isomères de constitution (ou de structure) ont la même formule moléculaire mais ils présentent des différences dans l'enchaînement des atomes (connectivité différente). Les alcanes ramifiés dérivent des systèmes à chaîne linéaire: un atome d'hydrogène d'un groupe méthylène est remplacé par un groupe alkyle. Le nombre d'isomères augmente fortement quand n (le nombre d'atomes de carbone) augmente (voir tableau ci-dessous).

n	Nombre d'isomères	n	Nombre d'isomères
1	1	6	5
2	1	7	9
3	1	8	18
4	2	9	35
5	3	10	75

2) Extensions

Comment nommer les alcanes ramifiés ? Une nomenclature systématique a été établie par l'IUPAC (*International Union of Pure and Applied Chemistry*) et se base sur l'application de quatre règles successives :

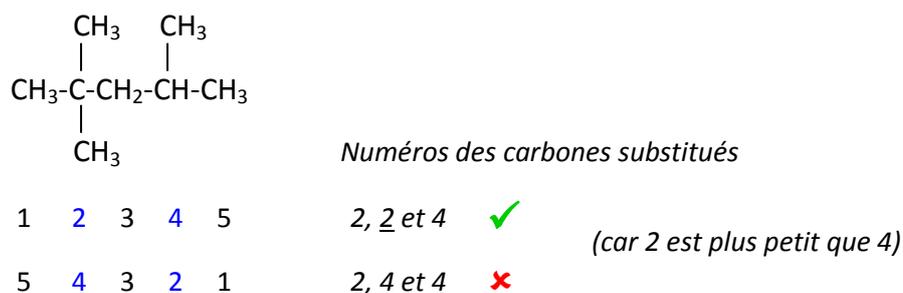
1°) Repérer la plus longue chaîne carbonée ;

2°) Trouver les noms de tous les groupes alkyles portés par cette chaîne ;

3°) Numérotter la chaîne en commençant par l'extrémité la plus proche d'un substituant. En cas de deux substituants à égale distance des extrémités, on se base sur l'ordre alphabétique des substituants pour décider du sens de numérotation de la chaîne. Si il y a 3 ou plus de substituants, on numérote la chaîne dans le sens qui fournit le plus petit chiffre au niveau de la première différence entre les deux numérotations possibles (principe de la différence au premier niveau) ;

4°) Nommer l'alcane (la chaîne la plus longue) en le précédant des noms des substituants classés par ordre alphabétique et eux-mêmes précédés du numéro de l'atome auxquels ils sont fixés.

Ainsi, « isooctane » est le nom courant du 2,2,4-triméthylpentane.



La réaction de combustion des alcanes libère une grande quantité de chaleur, faisant d'eux des composés privilégiés comme carburants.

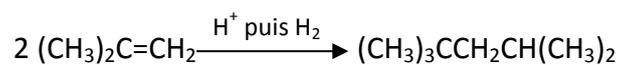


L'essence est un mélange de plusieurs alcanes. Cependant, la plupart des alcanes, surtout les alcanes linéaires, s'enflamment en explosant dans les moteurs. Le bruit de cognement est caractéristique de la mauvaise combustion du carburant. Généralement, les alcanes ramifiés ont tendance à brûler plus doucement. Lorsque l'isooctane est utilisé seul, le cognement disparaît complètement. Il est à la base de l'*indice d'octane* qui évalue le pouvoir antidétonant de l'essence. Une valeur de 100 a été attribuée à l'isooctane, qui brûle sans détonner, tandis que la valeur 0 est donnée par l'heptane qui ne fait que détonner en brûlant. Une essence ayant un indice d'octane de 95 se comporte comme un mélange composé de 95 % d'isooctane et 5 % d'heptane.

L'essence est principalement obtenue par la technique de craquage du pétrole : le pétrole est soumis à une pyrolyse à température élevée en présence de catalyseurs pour casser les alcanes en de plus petits fragments. L'isooctane peut également être synthétisé par la

2) Extensions

dimérisation de l'isobutène en présence d'acide suivie par l'hydrogénation des produits formés.



Références

https://en.wikipedia.org/wiki/2,2,4-Trimethylpentane#cite_note-5

Peter Vollhardt and Neil Schore, *Traité de chimie organique, 2^e Édition – Traduction de Paul Depovere* », De Boeck Université, Italie, 1995, « Chapitre 2 : Alcanes » p41.

John H. Richards, Donald J. Cram, George S. Hammond, « *Éléments de chimie organique – Traduction Philibert L'Écuyer* », McGraw-Hill, Montréal, 1968, p242.

Image : <https://pixabay.com/>