

SOMMAIRE

PREMIÈRE PARTIE : RECTO	13
PROLOGUE	15
1. Présentation	15
2. Pourquoi Recto ?	15
3. Du port de la blouse.....	16
I. LES GÉNÉRALITÉS	17
1. La présentation.....	17
2. Le carbone	17
3. Les autres atomes.....	17
4. Les liaisons chimiques (I)	18
5. Les liaisons chimiques (II).....	18
6. Les liaisons chimiques (III)	19
7. La formule brute (I).....	23
8. La formule brute (II).....	23
9. La détermination structurale	26
10. Les isomères	30
11. L'isomérie.....	31
12. La nomenclature	38
13. Les réactions	41
14. L'abécédaire électronique	42
II. LES RÉACTIONS (I) : LES DÉFINITIONS	49
1. Introduction.....	49
2. Réactions fondamentales	49
3. Réactions composées	50
4. Mécanisme	50
5. Rôle de la catalyse	51
III. LES RÉACTIONS (II) : DES EXEMPLES	53
1. ... Fondamentales.....	53
2. ... Composées	55

IV. LES RÉACTIONS D'ADDITION.....	57
1. Définition.....	57
2. Addition hétérolytique	57
3. Addition homolytique	58
V. LES RÉACTIONS D'ÉLIMINATION.....	61
1. Définition.....	61
2. Élimination E1.....	61
3. Élimination E2.....	62
VI. LES RÉACTIONS DE SUBSTITUTION.....	63
1. Définition.....	63
2. Substitution homolytique	63
3. Substitution hétérolytique.....	64
VII. LES RÉACTIONS DE TRANSPOSITION OU DE RÉARRANGEMENT.....	67
1. Définition.....	67
2. Transposition intégrale	67
3. Transposition avec perte d'eau	68
4. Transposition avec gain d'eau.....	68
VIII. LES RÉACTIONS D'OXYDATION	69
1. Définition.....	69
2. Valence de la fonction	69
3. Nombre d'oxydation	70
4. Attention !.....	71
5. Réaction composée ?.....	71
IX. LES RÉACTIONS DE RÉDUCTION	73
1. Définition.....	73
2. À partir de la valence de la fonction	73
3. À partir du nombre d'oxydation.....	73
4. Réaction composée ?.....	74
X. LA RÉTROSINTHÈSE.....	75
1. Définition.....	75
2. Exemple n° 1.....	75
3. Exemple n° 2.....	77

DEUXIÈME PARTIE : VERSO	79
PROLOGUE	81
1. Introspection	81
2. Pourquoi Verso ?	81
3. La substantifique moelle	81
4. Du port de la blouse (bis)	82
I. LES PRINCIPALES FONCTIONS ORGANIQUES	83
II. LES ALCANES.....	85
1. Introduction.....	85
2. Synthèse.....	86
3. Réactivité.....	87
III. LES CYCLOALCANES	89
1. Introduction.....	89
2. Isomérisie <i>cis-trans</i>	89
3. Conformations	90
4. Synthèse.....	91
5. Réactivité.....	91
IV. LES ALCÈNES	93
1. Introduction.....	93
2. Synthèse.....	94
3. Réactivité.....	95
4. Les polyènes	97
V. LES ALCYNES.....	101
1. Introduction.....	101
2. Synthèse.....	102
3. Réactivité.....	102
VI. LES ARÈNES	105
1. Définition.....	105
2. Le benzène.....	105
3. Les arènes.....	111
VII. LES HALOGÉNOALCANES.....	117
1. Introduction.....	117
2. Synthèse.....	118
3. Réactivité.....	119
VIII. LES ORGANOMAGNÉSIENS.....	121
1. Introduction.....	121
2. Synthèse.....	122

3. Réactivité.....	122
4. Réactions de substitution.....	123
IX. LES ALCOOLS.....	125
1. Introduction.....	125
2. Synthèse.....	126
3. Réactivité.....	127
4. Les polyols	129
X. LES ÉTHERS-OXYDES.....	133
1. Introduction.....	133
2. Synthèse.....	134
3. Réactivité.....	134
XI. LES PHÉNOLS	135
1. Introduction.....	135
2. Le phénol	135
3. Les phénols	139
XII. LES ALDÉHYDES ET LES CÉTONES	143
1. Introduction.....	143
2. Synthèse.....	143
3. Réactivité commune	145
4. Réactivité de différenciation	149
5. Les polyaldéhydes et les polycétones.....	150
XIII. LES AMINES ALIPHATIQUES.....	153
1. Introduction.....	153
2. Synthèse.....	155
3. Réactivité.....	156
4. Les polyamines.....	157
XIV. LES AMINES AROMATIQUES.....	159
1. Introduction.....	159
2. L'aniline	159
5. Les amines aromatiques.....	163
XV. LES ACIDES CARBOXYLIQUES.....	167
1. Introduction.....	167
2. Synthèse.....	168
3. Réactivité.....	169
4. Les polyacides.....	170

XVI. LES ANHYDRIDES	173
1. Introduction.....	173
2. Synthèse.....	174
3. Réactivité.....	174
XVII. LES ESTERS.....	175
1. Introduction.....	175
2. Synthèse.....	175
3. Réactivité.....	176
XVIII. LES CHLORURES D'ACIDES	179
1. Introduction.....	179
2. Synthèse.....	179
3. Réactivité.....	180
XIX. LES AMIDES	181
1. Introduction.....	181
2. Synthèse.....	182
3. Réactivité.....	182
XX. LES NITRILES.....	185
1. Introduction.....	185
2. Synthèse.....	185
3. Réactivité.....	186
XXI. LES THIOLS.....	187
1. Introduction.....	187
2. Synthèse.....	188
3. Réactivité.....	188
XXII. LES HÉTÉROCYCLES	191
1. Introduction.....	191
2. Hétérocycles azotés	191
3. Hétérocycles oxygénés	193
4. Hétérocycles soufrés	195
5. Hétérocycles mixtes.....	196
XXIII. LES COMPOSÉS POLYFONCTIONNELS MIXTES.....	199
1. Introduction.....	199
2. Les composés halogénés insaturés	199
3. Les composés carbonyles insaturés	200
4. Les aldols ou cétoles.....	201
5. Les hydroxyacides.....	202
6. Les cétoacides.....	203
7. Les cétoesters	204

8. Les acides aminés.....	205
XXIV. LES GLUCIDES	211
1. Introduction.....	211
2. Les monosaccharides	211
3. Les polysaccharides	217
XXV. LES LIPIDES ET AUTRES	221
1. Introduction.....	221
2. Les lipides hydrolysables.....	221
3. Les lipides non hydrolysables	225
4. Les autres	226
XXVI. LES POLYMÈRES	229
1. Introduction.....	229
2. Les réactions.....	229
3. Les principaux polymères.....	233
4. Les propriétés.....	237
TROISIÈME PARTIE : EXOS.....	239
PROLOGUE	241
1. Bilan des connaissances	241
2. Pourquoi Exo ?	241
3. Être efficace.....	241
4. Du port de la blouse (pas encore).....	242
I. LES DÉTERMINATIONS DE STRUCTURES.....	243
II. LES ALCANES.....	247
III. LES ALCÈNES	251
IV. LES ARÈNES (OU DÉRIVÉS).....	257
V. LES HALOGÉNOALCANES	261
VI. LES ORGANOMAGNÉSIENS.....	265
VII. LES ALCOOLS	269
VIII. LES PHÉNOLS (OU DÉRIVÉS).....	273
IX. LES ALDÉHYDES ET LES CÉTONES	279
X. LES AMINES ALIPHATIQUES.....	283

XI. LES AMINES AROMATIQUES (OU DÉRIVÉS).....	287
XII. LES ACIDES CARBOXYLIQUES (OU DÉRIVÉS)	291
XIII. LES COMPOSÉS POLYFONCTIONNELS	297
XIV. LES MASSES MOLAIRES ATOMIQUES DE QUELQUES ÉLÉMENTS (en g.mol ⁻¹).....	303
QUATRIÈME PARTIE : LABO	305
PROLOGUE	307
1. Introspection	307
2. Pourquoi Labo ?.....	307
3. Être efficace	307
4. Du port de la blouse (pour de vrai)	308
I. LES TECHNIQUES DE LABORATOIRE	309
1. Soi-même	309
2. Le décor.....	310
3. Le passage aux actes	320
4. Conclusion	328
5. Petite mise en bouche	329
II. LES RÉACTIONS D'ADDITION	333
1. Synthèse du 2-méthylpentèn-2-al	333
2. Synthèse de l'acide cinnamique	335
3. Synthèse du benzamide.....	337
4. Synthèse du 3-méthylbutan-2-ol.....	338
III. LES RÉACTIONS D'ÉLIMINATION	341
1. Synthèse du 2-méthylbut-2-ène	341
2. Synthèse de la 4-méthylpent-3-ène-2-one.....	343
3. Synthèse du cyclohexène	344
4. Synthèse du 2,4,4-triméthylpentène et du 2,4,4-triméthylpent-2-ène	346
5. Synthèse de la 1,5-diphénylpenta-1,4-diène-3-one	348
IV. LES RÉACTIONS DE SUBSTITUTION.....	353
1. Synthèse du nitrobenzène.....	353
2. Synthèse du chlorobenzène.....	355
3. Synthèse du 2-hydroxynaphtalène-1-diazobenzène	357
4. Synthèse de l'acide benzoïque.....	360
5. Synthèse du salicylate de méthyle.....	362
6. Synthèse de l'acétanilide.....	364

7. Synthèse de l'acide acétylsalicylique	366
8. Synthèse du triiodométhane.....	368
V. LES RÉACTIONS DE TRANSPOSITION.....	371
1. Synthèse de l'acide benzilique.....	371
2. Synthèse de la 3,3-diméthylbutan-2-one	373
3. Synthèse du 4-aminophénol.....	375
VI. LES RÉACTIONS D'OXYDATION	379
1. Synthèse du butanal.....	379
2. Synthèse de la propanone.....	381
3. Synthèse de l'acide benzoïque.....	382
4. Synthèse de l'anthraquinone	385
VII. LES RÉACTIONS DE RÉDUCTION	387
1. Synthèse du pentan-3-ol	387
2. Synthèse de l'aniline.....	389
3. Synthèse de la 3-nitroaniline	390
4. Synthèse de l'anthrone	392
VIII. LA SPECTROSCOPIE INFRAROUGE	395
IX. LA RÉSONANCE MAGNÉTIQUE NUCLÉAIRE DU PROTON H.....	397
INDEX	399

PREMIÈRE PARTIE

RECTO

PROLOGUE

1. Présentation

La chimie organique est une branche de la chimie, donc par définition une discipline expérimentale avec ses propres règles. Mais aussi elle possède un fort caractère théorique, qui lui-même peut se regarder sous deux optiques :

- la connaissance des causes et de l'intimité des réactions chimiques utilisées,
- la maîtrise des composés chimiques multiples par leur nombre et variés par leur classification.

Bref ! Il y a de quoi étudier et il est nécessaire d'avoir un peu de méthode et de rigueur pour s'en faire une *amie*.

2. Pourquoi Recto ?

Sans être un linguiste raffiné, *recto* peut s'extraire de *directement*. En traduisant plus clairement cela revient à aborder cette chimie de front. À savoir par sa trame, ses fondements. Ceux-ci permettront au ou à la futur(e) *organicien(ne)* d'en saisir toute la richesse et les subtilités.

Dans cette partie sont donc évoquées en premier les bases aussi bien atomistiques qu'électroniques voire moléculaires (§ I). Le classement peut sembler, microscopiquement ou chimiquement parlant, surprenant mais relève d'une grande logique dans l'assimilation de la corrélation entre électrons et réactivité.

Puis viennent les rites de passage, entre structures, que sont les réactions chimiques. Et elles sont aussi bien fondamentales que variées et autonomes les unes des autres (§ II et III).

Étudiées de manière séparée, passionnante est leur combinaison, car elles ne fonctionnent que peu souvent seules. En effet passer d'un composé organique X (notation adoptée tout au long de cet ouvrage) vers un composé Y demande de la réflexion. Dans le meilleur des cas, cela peut se faire d'un saut, ce qui est rare. À l'opposé cela peut demander une succession d'étapes élémentaires qu'il faut enchaîner. Du bon ordre de celles-ci (§ IV à IX), il est nécessaire de s'assurer, la commutativité mathématique n'étant pas de mise ici...

Aussi pour conclure cette première partie très souvent abstraite, une approche de méthodologie expérimentalement éprouvée apporte les arguments pour confirmer le couplage *électronico-réactionnelle* et/ou réussir l'examen pratique de passage (au sens propre du terme) de X vers Y (§ X).

Bien sûr il n'est pas possible d'aborder toute la théorie de la chimie organique en quelques pages. Mais disons que les grandes notions sont évoquées, dans le but de faire saliver et de pousser à en connaître plus dans de doctes ouvrages.

Et affirmons que l'essentiel est quasi là afin de se lancer sans angoisse mais avec satisfaction dans l'aspect concret de la chimie organique.

3. Du port de la blouse

Déçu(e)s seront ceux ou celles à la fin de cette partie, car elle n'a que peu d'aspects expérimentaux. Mais se mettront en place dans l'inconscient chimique individuel une logique et une vision qui donneront envie d'enfiler le plus vite possible sa blouse...

I. LES GÉNÉRALITÉS

1. La présentation

La chimie organique est la chimie du carbone. En effet le qualificatif organique provient du mot organisme, donc de tout ce qui provient du monde vivant, ou pas !

Or le maillon central de cet univers est l'atome de carbone, seul comme dans le méthane, molécule mère de toute vie sur terre selon certaines théories, ou en *colonies*, comme dans des structures *plus évoluées* possédant des chaînes carbonées.

2. Le carbone

L'élément carbone a un numéro atomique Z de 6. Ce qui donne 6 électrons et un noyau à 6 protons plus quelques neutrons ! Mais peu importe le noyau.

Ces 6 électrons sont répartis sur deux couches ; contentons-nous du bon vieux modèle de Bohr, ici bien suffisant. Il y en a 2 dans la couche K et 4 dans la couche L. Par conséquent pour satisfaire la règle de l'octet, qui limite à 8 le nombre d'électrons dans la couche la plus extérieure L, l'atome de carbone peut admettre 4 liaisons covalentes avec d'autres atomes, qui eux aussi admettent une ou plusieurs liaison(s) covalente(s). Cette création se fait par mise en commun au moins de deux électrons, un provenant de chaque atome concerné.

3. Les autres atomes

Ils ne sont pas si nombreux que cela. Seuls les électrons de la couche périphérique seront déterminants pour le nombre de liaisons covalentes.

Par ordre alphabétique, en dehors d'autres atomes de carbone, il y a :

- l'atome d'azote N : $Z = 7$, 5 électrons sur la couche L, ce qui donne trois liaisons covalentes et un doublet non-liant,
- l'atome de brome Br: $Z = 35$, 7 électrons sur la couche N, ce qui donne une liaison covalente et trois doublets non-liants,
- l'atome de chlore Cl: $Z = 17$, 7 électrons sur la couche M, ce qui donne une liaison covalente et trois doublets non-liants,

- l'atome de fluor F: $Z = 9$, 7 électrons sur la couche L, ce qui donne une liaison covalente et trois doublets non-liants,
- l'atome d'hydrogène H: $Z = 1$, 1 électron sur la couche K, ce qui donne une liaison covalente,
- l'atome d'iode I: $Z = 53$, 7 électrons sur la couche θ , ce qui donne une liaison covalente et trois doublets non-liants,
- l'atome d'oxygène O: $Z = 8$, 6 électrons sur la couche L, ce qui donne deux liaisons covalentes et deux doublets non-liants,
- l'atome de phosphore P: $Z = 15$, 5 électrons sur la couche M, ce qui donne trois liaisons covalentes et un doublet non-liant,
- l'atome de soufre S: $Z = 16$, 6 électrons sur la couche M, ce qui donne deux liaisons covalentes et deux doublets non-liants,
- ...

En conclusion la part belle est faite à la liaison covalente mais le rôle du (ou des) doublet(s) non-liant(s) n'est pas à négliger. Il peut être question de liaison chimique intramoléculaire ou extramoléculaire selon le cas.

4. Les liaisons chimiques (I)

Une liaison chimique, du premier type (soit intramoléculaire), est le ciment qui unit deux atomes entre eux. Elle peut être soit covalente, soit ionique. Dans la chimie de l'atome de carbone, elle est principalement covalente, même si certaine réaction s'explique par la formation de composé intermédiaire à faible durée de vie ayant une liaison chimique ionique affectant un atome de carbone. Il sera alors question de carbocation ou de carbanion, selon les atomes avoisinants.

5. Les liaisons chimiques (II)

a) La liaison covalente

Elle résulte de la mise en commun de deux à six électrons entre deux atomes provenant principalement de la partie droite du tableau périodique des éléments (excepté l'atome d'hydrogène).

En effet ces atomes peuvent difficilement gagner ou perdre des électrons pour donner naissance à des ions, afin de satisfaire la règle du duet (pour l'atome d'hydrogène) ou de l'octet (pour les autres atomes).

D'où cette mise en commun pour créer soit une liaison covalente simple (à deux électrons, un électron provenant de chaque atome), soit une liaison covalente

double (à quatre électrons, deux électrons provenant de chaque atome), soit une liaison covalente triple (à six électrons, trois électrons provenant de chaque atome).

La limite du nombre de liaison(s) covalente(s) pour un atome donné est fixée par la règle du duet ou de l'octet :

- une pour Br, Cl, F, H, I,
- deux pour O, S,
- trois pour N,
- quatre pour C,
- cinq pour P,
- ...

b) La liaison ionique

Elle résulte de la récupération ou de la perte d'électron(s) entre atomes des colonnes de droite et de gauche du tableau périodique des éléments. Les premiers se transforment en anions et les seconds en cations, avec apparition de forces d'interactions coulombiennes.

Le nombre d'électrons mis en jeu sera fixé aussi par la règle du duet ou de l'octet :

- un en plus pour Br, Cl, F, I,
- un en moins pour H, Na,
- deux en plus pour O, S,
- deux en moins pour Mg,
- ...

6. Les liaisons chimiques (III)

a) Les orbitales atomiques

Définition

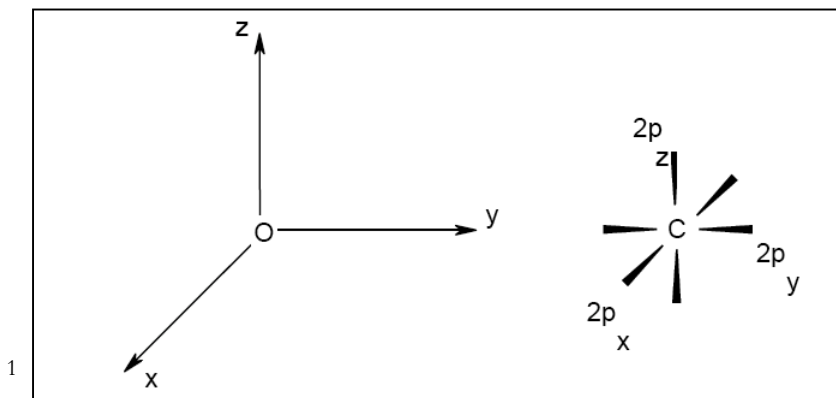
Une orbitale représente le nuage électronique où se situera l'électron concerné. Chaque orbitale peut admettre deux électrons.

De type s

De forme sphérique, cette orbitale tridimensionnelle concerne les électrons des niveaux 1s, 2s... Notons que le chiffre 1 se réfère à la couche K selon le modèle de Bohr, le chiffre 2 pour L, le chiffre 3 pour M...

De type p

De symétrie axiale (schéma 1), il y a trois orbitales symétriques une selon chaque axe : p_x , p_y et p_z . Elles concernent les niveaux 2p, 3p...



Exemples :

- L'atome d'hydrogène a un électron de type 1s, localisé dans une orbitale de type s. Après création d'une liaison covalente simple, cela donne un total de deux électrons en accord avec la règle du duet ;
- L'atome de carbone a six électrons dont la répartition peut être $1s^2 2s^2 2p^2$ ou $1s^2 2s^1 2p^3$; donc les 4 électrons de la couche périphérique seule concernée par la formation de liaisons covalentes peuvent être localisés dans des orbitales de type s et de type p (l'écriture $1s^2 2s^1 2p^3$ se justifie par la nécessité d'avoir les quatre électrons dans le niveau 2 disponibles aisément pour la création de liaisons covalentes).

b) Les orbitales moléculaires

La liaison covalente chez l'atome d'hydrogène

Elle apparaît par le recouvrement des orbitales atomiques pour faire apparaître une orbitale moléculaire qui joindra les noyaux des deux atomes, la distance entre ces noyaux sera la longueur de la liaison covalente.

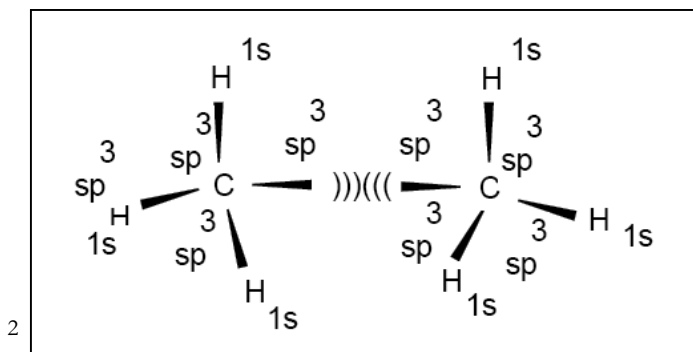
En faisant intervenir les orbitales de type s, la liaison covalente ainsi formée sera nommée σ (lettre grecque sigma).

La liaison covalente chez l'atome de carbone tétraédrique

En toute logique, les électrons concernés occupent des orbitales de type s et de type p. Ce qui doit donner des recouvrements différents lors de la formation de

liaisons covalentes avec d'autres atomes, donc des liaisons covalentes différentes, or ce n'est pas le cas !

En fait il y a combinaison des quatre orbitales du niveau 2 : $2s$, $2p_x$, $2p_y$ et $2p_z$ pour donner quatre orbitales hybrides identiques nommées sp^3 (schéma 2). C'est l'hybridation.



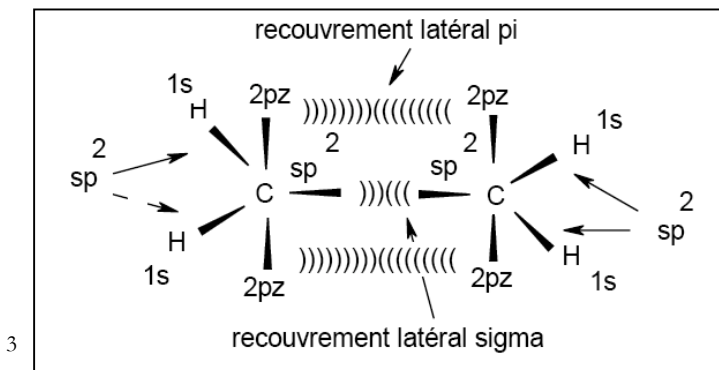
Chacune de ces quatre orbitales est dissymétrique et orientée de manière tétraédrique (en quatre dimensions, au lieu de trois avec les orbitales de base).

Ce recouvrement dit frontal (car selon le même axe) se fait avec les orbitales s d'atomes d'hydrogène dans le cas du méthane ou avec les orbitales sp^3 d'autres atomes de carbone dans le cas des alcanes.

Il est alors question de liaisons covalentes simples de type σ .

La liaison covalente chez l'atome de carbone non tétraédrique (1)

Il existe aussi l'hybridation sp^2 expliquant la formation de liaisons covalentes doubles. Dans ce cas les quatre orbitales du niveau 2 : $2s$, $2p_x$, $2p_y$ et $2p_z$ se combinent partiellement. En effet seules les trois premières sont concernées pour donner trois orbitales hybridées sp^2 (schéma 3) et seule l'orbitale $2p_z$ reste intacte mais joue un rôle cependant.

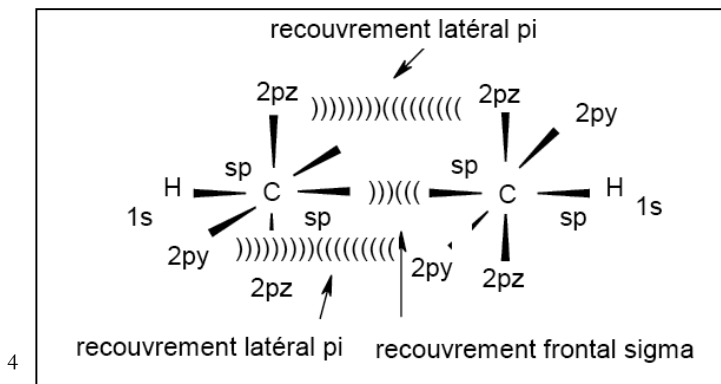


Avec un autre atome de carbone il y a un double recouvrement : celui frontal de deux orbitales sp² pour former une liaison σ et celui latéral (car selon deux axes parallèles) des deux orbitales 2p_z pour donner une liaison Π (lettre grecque pi).

Il y a création de liaisons covalentes doubles (σ + Π) avec mises en commun de quatre électrons (deux fois deux).

La liaison covalente chez l'atome de carbone non tétraédrique (II)

Il existe aussi l'hybridation sp expliquant la formation de liaisons covalentes triples. Seules les orbitales 2s et 2p_x sont concernées pour donner deux orbitales hybridées sp (schéma 4) et les orbitales 2p_y et 2p_z restent intactes.



Avec un autre atome de carbone il y a un triple recouvrement : celui frontal de deux orbitales sp pour former une liaison σ et celui doublement latéral des quatre orbitales 2p_y et 2p_z pour donner deux liaisons Π.

Il y a création de liaisons covalentes triples (σ + 2Π) avec mises en commun de six électrons (deux fois trois).

Avant d'exploiter ces notions dans la connaissance détaillée d'une structure, il est indispensable d'en connaître les contenants nommément et numériquement.

7. La formule brute (I)

C'est le premier renseignement quant à l'identification d'un composé organique, donnant des informations sur les compositions qualitative et quantitative. Qualitative quant à la nature des atomes présents, quantitative quant au nombre de chacun d'entre eux présents.

Son écriture sera $C_xH_yO_z$ ou C_xH_yBr ou C_xH_yN ou $C_xH_yN_zO_w...$ ou C, H, O, N... sont les symboles et x,y,z... sont les nombres associés aux atomes présents dans la molécule.

Exemples :

CH_4 signifie que cette molécule contient du carbone et de l'hydrogène, avec un atome pour le premier et quatre atomes pour le second.

$C_4H_8O_2$ signifie que cette molécule contient du carbone, de l'hydrogène et de l'oxygène, avec quatre atomes pour le premier, huit atomes pour le second et deux atomes pour le troisième.

$C_8H_9NO_2$ signifie que cette molécule contient du carbone, de l'hydrogène, de l'azote et de l'oxygène, avec huit atomes pour le premier, neuf atomes pour le second, un pour le troisième et deux atomes pour le quatrième.

8. La formule brute (II)

a) La masse molaire

C'est la masse d'une mole (de molécules) en grammes par mole ($g \cdot mol^{-1}$) associée à la formule brute.

Symbole : **M**.

Elle se calcule à partir de la formule brute en additionnant les produits des masses molaires atomiques par le nombre de chaque atome (noté ici A) :

$$M = \sum n_A \times M_A$$

Exemples :

- $C_4H_8O_2$: $M = 4 \times 12 + 8 \times 1 + 2 \times 16 = 88 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$.
- $C_8H_9NO_2$: $M = 8 \times 12 + 9 \times 1 + 1 \times 14 + 2 \times 16 = 151 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$.

Si la formule brute n'est pas connue, il en est de même pour la masse molaire **M**. Mais elle peut se calculer à partir de la densité de vapeur d_{vap} : densité du composé organique à l'état de vapeur (chiffre sans unité) :

$$\mathbf{M} = 29 \times d_{\text{vap}}$$

où le chiffre 29 correspond à la « masse molaire moyenne de l'air ».

b) La composition centésimale

C'est un pourcentage associé à chaque atome présent (noté ici A) dans la formule brute. Il représente sa proportion en masse ou massique par rapport à la masse molaire **M** :

$$\%_A = n_A \times 100 \times (\mathbf{M}_A / \mathbf{M}),$$

Ce pourcentage par atome permet de passer de la masse molaire au nombre d'atomes de chaque sorte présents, et donc de déterminer sans ambiguïté la formule brute.

La somme des pourcentages doit faire 100.

Exemples :

- $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$: %C = 55, %H = 9 et %O = 36.
- $\text{C}_8\text{H}_9\text{NO}_2$: %C = 64, %H = 6, %N = 9 et %O = 21.

c) La détermination de la formule brute

Le lien entre la composition centésimale pour un atome donné A et son nombre d'atome(s) présent(s) dans la formule brute est le suivant :

$$n_A = (\%_A / 100) \times (\mathbf{M} / \mathbf{M}_A),$$

où $\%_A$ est la composition centésimale de l'atome A (sans unité), **M** est la masse molaire du composé organique (en grammes par mole), **M_A** est la masse molaire atomique de A (en grammes par mole).

Exemples :

- **M** = 88 g.mol⁻¹ et %C = 55, %H = 9 et %O = 36 :
 $n_{\text{C}} = (55/100) \times (88/12) = 4,$
 $n_{\text{H}} = (9/100) \times (88/1) = 8,$
 $n_{\text{O}} = (36/100) \times (88/16) = 2,$
donc $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$.

- $M = 135 \text{ g.mol}^{-1}$ et $\%C = 71$, $\%H = 7$, $\%N = 10$ et $\%O = 12$:
 $n_C = (71/100) \times (135/12) = 8$,
 $n_H = (7/100) \times (135/1) = 9$,
 $n_N = (10/100) \times (135/14) = 1$,
 $n_O = (12/100) \times (135/16) = 1$,
 donc C_8H_9NO : ce composé noté \underline{M} va servir par la suite de lien dans la détermination d'une structure.

d) La formule générale

Certaines formules brutes présentent des similarités au niveau de leurs formules brutes.

Exemples :

- C_4H_8 , C_6H_{12} , $C_{12}H_{24}$... où il y a deux fois plus d'atomes d'hydrogène que d'atomes de carbone, donc du type C_nH_{2n} .
- C_2H_4O , C_3H_6O , $C_6H_{12}O$... où il y a deux fois plus d'atomes d'hydrogène que d'atomes de carbone et à chaque fois un atome d'oxygène, donc du type $C_nH_{2n}O$.
- C_2H_7N , C_3H_9N , $C_6H_{15}N$... où il y a deux fois plus d'atomes d'hydrogène plus trois que d'atomes de carbone et à chaque fois un atome d'azote, donc du type $C_nH_{2n+3}N$.

...

C_nH_{2n} , $C_nH_{2n}O$, $C_nH_{2n+3}N$... sont des formules générales et chacune correspond à des composés organiques ayant des propriétés physiques et chimiques similaires.

e) La fonction organique

Il est alors question de fonction organique (une et une seule) associée à chaque formule générale. D'où la distinction entre un composé monofonctionnel (servant de point de départ à l'étude d'une fonction organique) et un composé polyfonctionnel.

Aussi C_nH_{2n} correspond à la (et une) fonction alcène, $C_nH_{2n}O$ à la (et une) fonction aldéhyde ou à la (et une) fonction cétone, $C_nH_{2n+3}N$ à la (et une) fonction amine...

Il existe ainsi un grand nombre de fonctions organiques regroupant chacune des composés organiques ayant des propriétés physiques ou chimiques similaires.

Chacune d'entre elles se caractérise par un groupe fonctionnel, c'est-à-dire un ensemble d'atomes dont la disposition est commune aux composés organiques de la fonction organique.

Pour la compréhension de chaque groupe, il est nécessaire de se remémorer les conditions de liaisons covalentes prévues pour chaque atome : quatre pour l'atome de carbone, deux pour l'atome d'oxygène, trois pour l'atome d'azote...

Exemples :

- la fonction C_nH_{2n} comprend le groupe $\begin{array}{c} | \quad | \\ -C=C- \end{array}$,
- la fonction $C_nH_{2n}O$ avec le groupe $\begin{array}{c} | \\ -C=O \end{array}$,
- la fonction $C_nH_{2n+3}N$ avec le groupe $\begin{array}{c} | \\ -C-N- \\ | \quad | \end{array}$.