

Calcul du nombre d'insaturations d'une molécule

C'est un calcul qui permet d'avoir quelques indications sur la structure d'une molécule. Nous limiterons l'étude aux seules molécules organiques.

Le nombre d'insaturation d'une molécule est le nombre de cycles et de liaisons multiples qu'elle comporte.

Une molécule organique qui possède n_C atomes de carbone est saturée lorsque elle possède $n_H=(2n+2)$ atomes d'hydrogène, ce qui correspond à la formule brute C_nH_{2n+2} de l'alcane acyclique en C_n .

Une molécule de formule C_nH_{2n} présente un déficit de 2 atomes H, soit une molécule de dihydrogène par rapport à la formule C_nH_{2n+2} : on dit qu'elle possède une insaturation.

Une insaturation correspond donc à un défaut de deux atomes d'hydrogène par rapport au composé saturé.

La présence d'une insaturation dans la molécule C_nH_{2n} indique que celle-ci possède une double liaison $C=C$ (éthène : C_2H_4 , propène : C_3H_6 ...) ou qu'elle est cyclique (cyclopropane : C_3H_6 , cyclohexane : C_6H_{12} ...). Il peut aussi s'agir d'une double liaison $C=O$ dans les composés contenant de l'oxygène.

Quand la molécule possède des atomes autres que C et H, on peut aussi évaluer le nombre d'insaturations :

Soit n_C le nombre d'atomes de carbone,
 n_H le nombre d'atomes d'hydrogène,
 n_N le nombre d'atomes d'azote (ou d'un autre élément trivalent comme P),
 n_O le nombre d'atomes d'oxygène (ou d'un autre élément divalent comme S),
 n_{Cl} le nombre d'atomes de chlore (ou d'un autre élément divalent comme F, Br ou I),

alors le nombre n_I d'insaturations est :

$$n_I = \frac{2n_C - n_H - n_{Cl} + n_N + 2}{2}$$

On remarquera :

1. que le nombre d'atome d'oxygène O, voire de soufre S, n' intervient pas dans ce calcul
2. qu'un atome d'halogène F, Cl, Br, I compte comme un atome d'hydrogène
3. qu'un atome d'azote, voir de phosphore P, compte comme un atome H « en moins »

Le calcul du nombre d'insaturation d'une molécule est facile à évaluer et permet tout de suite de valider ou d'infirmer l'existence de liaisons multiples ou de cycles dans une molécule.

Par exemple :

Une insaturation peut correspondre à :

- Une double liaison compte pour une insaturation
- Un cycle compte pour une insaturation
- Une triple liaison compte pour deux insaturations

Deux insaturations peuvent correspondre à :

- Une liaison triple
- Deux doubles liaisons
- Deux cycles
- Une double liaison et un cycle.

Exercice

Trouver le nombre d'insaturations que possèdent les composés correspondant aux formules brutes suivantes :

Formule brute (ou moléculaire)	Se traite comme L'hydrocarbure :	Alcane de même nombre d'atome C que cet hydrocarbure	Nombre d'insaturations
C_4H_8			
C_6H_{14}			
C_6H_{12}			
C_6H_6			
$C_{16}H_{35}Cl_2NOS$			
$C_5H_8O_2$			
$C_4H_6O_2$			