

Méthode pour calculer le nombre de cycles entrant dans la structure d'une combinaison organique

Par ALEXANDRE ALOYSE PONTET

Cette méthode permet de calculer le nombre de cycles qui entrent dans la combinaison d'une molécule organique. Comme il s'agit d'une formule mathématique, un renversement du raisonnement permet d'établir d'avance le degré de saturation de la combinaison chimique, ou bien, les valences anormales de la formule empirique.

Pour la théorie de la méthode, on classe les éléments de la formule empirique en deux catégories:

a) *Les membres externes* sont les atomes qui sont reliés à un autre atome par toutes leurs valences: ex.: l'oxygène dans le groupe cétonique.

Dans le groupe COOH, l'O du groupe hydroxyle n'est pas un membre externe, tandis que l'autre est un membre externe. Ainsi, dans la molécule de l'acide tartrique, $C_4H_6O_6$, les membres externes sont: H_6 , O_2 .

b) Les autres atomes sont considérés comme *membres internes*. Ceux-ci sont liés par leurs valences à plusieurs atomes différents ou de même catégorie.

On distingue aussi les valences liant les membres externes aux membres internes; les valences liant les membres internes entre eux; et les valences non saturées.

Les données suivantes sont nécessaires pour le calcul:

1° La formule empirique.

2° Le nombre d'atomes représentés dans les membres externes.

3° La mesure du degré de non saturation de la combinaison.

4° Les éléments à valences anormales, le nombre de leurs atomes et celui de leurs valences. On considère les valences suivantes comme normales: $C=4$, $H=1$, $O=2$, $N=3$, $P=3$.

Le calcul se fait de la manière suivante: Partant de la formule empirique, on compte le nombre total des atomes et le nombre total de leurs valences. Puis on compte le nombre d'atomes pour les membres externes

et le nombre de leurs valences. En déduisant du nombre total d'atomes celui des membres externes, on obtient le nombre d'atomes des membres internes. On fait de même pour les valences. Ensuite, on fait la somme des valences saturées liant les membres internes; pour cela on déduit du total des valences des membres internes, la somme des valences des membres externes et des valences non saturées. On divise par 2 le total des valences saturées pour obtenir le nombre de paires de valences; ces paires de valences ne peuvent être qu'un nombre entier, et s'il y a une fraction, un élément à valence anormale est contenu dans la molécule.

Le nombre de cycles (C) s'obtient en faisant la différence entre le nombre de paires de valences (P) et le nombre total des membres internes (M_i), plus un, soit:

$$C = P - M_i + 1.$$

Si le résultat est égal à 0, la combinaison est acyclique. Cette formule ne peut évidemment donner que des nombres entiers.

Exemples:

Ergostérol ($C_{27}H_{42}O$)

Formule empirique	$C_{27}H_{42}O$
Eléments des membres externes	H_{42}
Degré de non saturation (3 doubles liaisons)	6
Pas d'éléments à valence anormale	
Nombre total des atomes	70
„ „ des valences	152
„ „ d'atomes des membres externes	42
„ „ des valences des membres externes	42
„ „ d'atomes des membres internes	$70 - 42 = 28$
„ „ des valences des membres internes	$152 - 42 = 110$
Nombre des valences saturées des membres internes	$110 - (42 + 6) = 62$
Nombre de paires de valences	$62 : 2 = 31$
Nombre de cycles	$(31 - 28) + 1 = 4$
Ainsi la molécule d'ergostérol contient 4 cycles.	

Acide lactoflavine phosphorique

Formule empirique	$C_{17}H_{21}O_9N_4P$
Éléments des membres externes	H_{21}, O_9
Degré de non saturation	10
Éléments à valences anormales	P^{+5}
Nombre total des atomes	52
„ „ de leurs valences	124
„ „ des atomes des mem- bres externes	$21 + 3 = 24$
„ „ des valences des mem- bres externes	$21 + 6 = 27$
„ „ des atomes des mem- bres internes	$52 - 24 = 28$
„ „ des valences des mem- bres internes	$124 - 27 = 97$
„ „ des valences saturées des membres internes	$97 - (27 + 10) = 60$
Nombre de paires de valences	$60 : 2 = 30$
Nombre de cycles	$C = (30 - 28) + 1 = 3$

Dans le raisonnement inversé, le degré de non saturation s'obtiendra en déduisant du nombre total des valences des membres internes (V_i), la somme du nombre total des valences des membres externes (V_e) et du nombre des valences saturées (V_s), soit:

$$J \text{ (degré de non saturation)} = V_i - (V_e + V_s).$$

Enfin il est possible de déceler les éléments à valence anormale; pour cela, il faut calculer d'après la formule empirique la somme totale des valences normales, somme que l'on compare avec la somme effective (V_{ef}) des valences entrant dans la constitution structurale. Cette

Exemple:

Théobromino

Formule empirique	$C_7H_8O_2N_4$
Éléments des membres externes	H_8, O_2
Nombre total des atomes	21
„ „ des valences	52
„ „ des atomes des membres externes	10
„ „ des valences des membres externes	12
„ „ des atomes des membres internes	11
„ „ des valences des membres internes	40
Nombre de cycles	2
Nombre de paires de valences	$(2 + 11) - 1 = 12$
Nombre de valences saturées liant les mem- bres internes	$2 \times 12 = 24$
Degré de non saturation	$J = 40 - (12 + 24) = 4$

dernière valeur est la somme des valences saturées des membres internes (V_s), du nombre des valences des membres externes (V_e) multiplié par 2 et des valences non saturées (J), soit:

$$V_{ef} = V_s + (V_e \times 2) + J.$$

La présence d'éléments à valence anormale est révélée par une différence qui apparaît entre la somme des valences normales, calculée d'après la formule empirique, et la somme effective (V_{ef}) des valences entrant dans la constitution.

Ainsi, pour l'acide lactoflavine phosphorique, la formule empirique $C_{17}H_{21}ON_4P$ donne 122 valences totales tandis que le calcul des valences effectives donne 124. Il y a donc 2 valences anormales qui appartiennent au phosphore.