

STRUCTURE ET CLASSIFICATION DES ESTERS

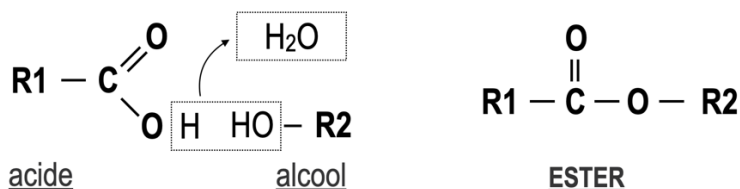
1. Définition et dénomination.....	1
2. Biosynthèse.....	1
3. Classification selon la partie acide.....	1
4. Classification selon la partie alcool.....	3
5. Classification des esters.....	4

1. Définition et dénomination

Les structures qui contiennent une liaison ester résultent de la fusion d'un acide [R1-COOH] sous forme d'anion [RCCO⁻] avec une dénomination qui se termine en (...ate) et d'un alcool [R2-OH] qui perd son hydroxyle pour ne laisser sous forme de cation [R2⁺] que son radical, c'est-à-dire son squelette carboné avec une dénomination qui se termine en (...yle). La réaction libère une molécule d'eau [H₂O].

La liaison formée est fortement polarisée.

La formule finale est [R1COO-R2].



Un ester porte de nom de ses deux composants. Le radical issu de l'acide (R1) porte de suffixe « ate » et le radical issu de l'alcool (R2) le suffixe « yle ». Exemple : acétate de linalyle.

2. Biosynthèse

Les esters se forment en présence d'un acide, d'un alcool et d'une enzyme permettant de les associer. Les précurseurs, acide et alcool, sont préalablement produits par le métabolisme de la plante. On trouve donc généralement des esters en lien avec les autres composants. En particulier, monoterpénols et esters monoterpéniques sont généralement associés, dans des proportions variables.

3. Classification selon la partie acide

On peut distinguer, schématiquement, quatre familles biochimiques de composant acide.

3.1a. Acides à chaîne linéaire courte (1 à 5 carbones)

Ce sont des structures simples, plus ou moins présentes dans le métabolisme général.

Leur formule générale est CH₃-(CH₂)_n-COOH

La structure à deux carbones, l'acide acétique, donnant l'acétate, est relativement fréquente, c'est la raison pour laquelle de nombreux esters sont des acétates.

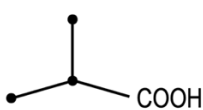
Nb de carbones	Noms de l'acide	Présence dans les HE
C1	acide formique ou méthanoïque	+
C2	acide acétique ou éthanoïque	+++++
C3	acide propanoïque ou propionique	+
C4	acide butanoïque ou butyrique	+
C5	acide valérique ou valérianique ou amylique ou pentanoïque	-

3.1b. Acides à chaîne courte ramifiée (4 ou 5 carbones)

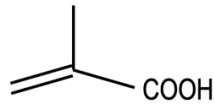
Ils sont proches des précédents, se différenciant par une chaîne qui n'est plus linéaire, mais ramifiée. Certains sont dérivés de l'isoprène, précurseur également des monoterpènes. Ils ont alors 5 carbones, une ramification et une insaturation.

Nb de carbones	Noms de l'acide	Présence dans les HE
C4	acide isobutyrique (isobutanoïque)	++
	acide méthacrylique (méthylpropénoïque)	+
C5 saturé	acide isovalérique ou isoamylique ou acide 3 méthyl butanoïque	+
	acide 2 méthyl butyrique	+
C5 + insaturation (isoprénoïque)	acide angélique ou acide 2 métylbut-2-énoïque (trans)	++
	acide tiglique ou tiglinique ou acide 2 métylbut-2-énoïque (cis)	+

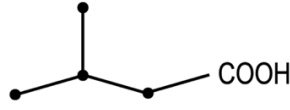
Il y a une certaine confusion avec la dénomination amylique qui désigne une chaîne en C5 linéaire ou ramifiée. Pour une cohérence de nomenclature, nous avons nommé isoamylique la chaîne branchée.



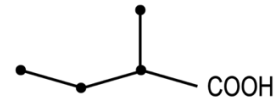
acide isobutyrique



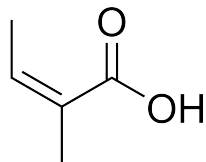
acide méthacrylique



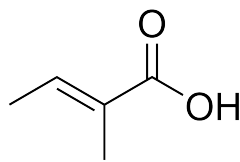
acide isovalérique
(isoamylique)



acide 2-méthylbutyrique



acide angélique (cis)



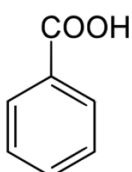
acide tiglique (trans)

Les acides valérique et tiglique sont les isolères cis et trans du dérivé de l'acide 2-méthyl-butérique ayant acquis une insaturation.

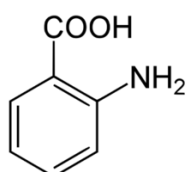
3.2. Acides aromatiques (C7)

Noms de l'acide	Présence dans les HE
acide benzoïque	++
acide anthranilique acide ortho aminobenzoïque	+
acide N-méthyl-anthranilique*	+
salicylate	+

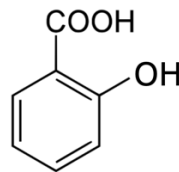
* structure en C8 avec un 8^{ème} carbone fixé sur l'azote donc hors de la chaîne principale



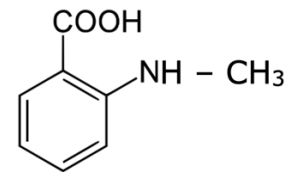
acide benzoïque



acide anthranilique

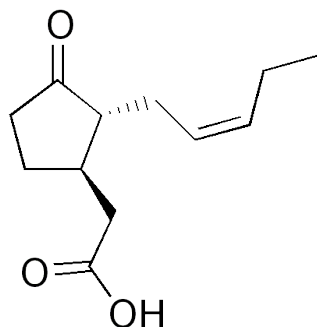


acide salicylique

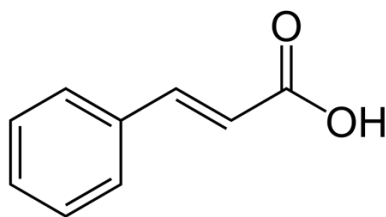


acide N-méthyl-anthranilique

3.3. Acides à chaîne > C8



acide jasmonique (C12)



acide cinnamique
(acide aromatique en C9)

4. Classification selon la partie alcool

On peut distinguer, schématiquement, quatre familles biochimiques pour le composant alcool. Certains composés simples ont le même squelette que les acides présentés précédemment.

4.1a. Alcools simples à chaîne linéaire courte saturée (1 à 6 carbones)

Nb de carbones	Noms de l'alcool et du radical		Présence dans les HE
C1	méthanol	méthyle	+++
C2	éthanol	acétyle	-
C3	propanol	propyle	-
C4	butanol	butyle	-
C5	pentanol	pentyle	+
C6	hexanol	hexyle	+

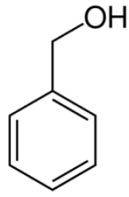
4.1b. Alcools à chaîne linéaire courte ramifiée (4 à 6 carbones)

Nb de carbones	Noms de l'alcool et du radical		Présence dans les HE
C4	alcool méthyl-allylique	méthyl-allyle	+
	alcool isobutylique	isobutyle	+
C5	2 méthyl-butanol	2 méthyl-butyle	+
	alcool isoamylique	isoamyle	+
C6	alcool méthyl-amylique	méthyl-amyle	+

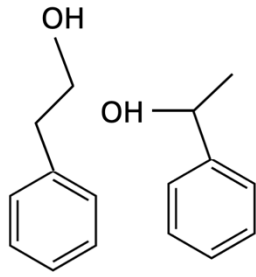
4.2. Alcools aromatiques

Ils ont dans leur structure un noyau benzène (C6 aromatique)

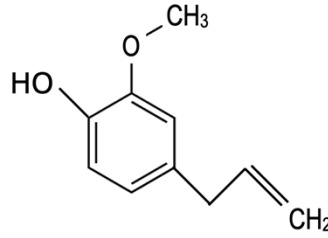
Nb de carbones	Noms de l'alcool et du radical		Présence dans les HE
C7	phényl-méthanol = alcool benzylique	phényl-méthyle = benzyle	+++
C8	phényl-éthanol	phényl-éthyle	+
C9	alcool cinnamique	cinnamyle	+
C10	eugénol	eugényle	+



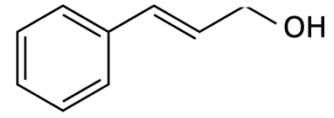
alcool benzoïque
phényl-méthanol



phényl-éthanol
(2 isomères)



eugénol



alcool cinnamique

4.3. Monoterpénols

Les monoterpénols ou alcool monoterpéniques sont des dérivés de monoterpènes (à 10 carbones), linéaires ou cycliques, qui sont par eux-mêmes des principes actifs en aromathérapie. Ils peuvent aussi entrer dans la composition d'esters.

Structure	Noms de l'alcool et du radical		Présence dans les HE
linéaire	linalol	linalyle	++++
	géraniol	géranyle	++++
	citronello	citronnelyle	+
	nérol	néryle	++
	lavandulol	lavandulyle	+
	myrcénol	myrcényle	+
cyclique	bornéol	bornyle	++++
	terpinéol	terpényle	++
	menthol	menthyle	+
	myrténol (2 pinène-10-ol)	myrtényle	+

4.3. Sesquiterpénols

Les sesquiterpénols ou alcools sesquiterpéniques sont des dérivés de sesquiterpènes (à 15 carbones), linéaires ou cycliques, qui sont par eux-mêmes des principes actifs en aromathérapie. Ils peuvent aussi entrer dans la composition d'esters ; beaucoup plus rarement que les monoterpénols.

Structure	Noms de l'alcool et du radical		Présence dans les HE
linéaire	farnésol	farnésyle	+
cyclique	vétinénol	vétinényle	+

5. Classification des esters

En théorie, toutes les combinaisons sont possibles.

En pratique, on ne trouve que certains esters, néanmoins nombreux, puisqu'on en compte plusieurs dizaines dans les huiles essentielles.

On remarque que les acides à chaîne courte (formiate et acétate) sont toujours associés à des alcools à chaînes longues : monoterpénols ou sesquiterpénols.

Inversement, les alcools à chaîne courte donnant les groupements méthyle, butyle, amyle... sont toujours associés à des acides ayant plus de 5 carbones.

Ainsi, les esters ont toujours une taille d'au moins 8 carbones.

Il est impossible de classer de manière rigoureuse les esters des huiles essentielles, leur diversité est trop grande. Il y a deux manières de les classer :

- Selon le nombre de carbone de la composante acide : de C1 à C9
- Selon la nature du radical issu de la composante alcool, qui fait émerger quatre grandes tendances.
 1. Les esters simples, ne contenant ni structure terpénique, ni cycle aromatique : acide 1 et alcool 1.
Ex : angélates d'isoamyle, d'isobutyle ou d'isoallyle : isobutyrates d'amyle, d'hexyle ou de méthylallyle.
 2. Les esters aromatiques : acide 2 et/ou alcool 2
Ex : benzoate de méthyle, benzoate de benzyle, tiglate de phényl-éthyle, salicylate de méthyle, anthranilate de méthyle.
 3. Les esters monoterpéniques : acide 1 et alcool 3
Ex : acétate de linalyle, bornyle, terpényle, géranyle... formiate de géranyle ou citronellyle.
 4. Les esters sesquiterpéniques : acide 1 et alcool 4. Ils sont rares.
Ex : acétate de vétivényle ou de farnésyle.

Les esters plus courants :

- acétate de linalyle
- acétate de bornyle
- acétate et formiate de géranyle
- acétate de néryle
- acétate de terpényle
- acétate et formiate de citronellyl
- acétate de benzyle
- benzoate de benzyle

Certains esters sont spécifiques à certaines huiles essentielles

- salicylate de méthyle (Gaulthérie)
- N-méthylantranilate de méthyle (Petit grain mandarine)
- angélates d'isoamyle, d'isobutyle, de méthylallyle, de méthylamyle... (Camomille noble)
- tiglates de géranyle, de phényl-éthyle (Géranium)
- isovalérate et isobutyrate d'amyle (Khella)