

11 Qu'est-ce que la conformation des molécules ?

La **rotation** autour des liaisons simples carbone-carbone est possible : on obtient ainsi une infinité de **conformations** pour une même molécule.

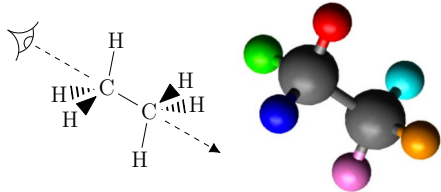
Définition

Les conformations d'une molécule sont les différents arrangements de ses atomes qui peuvent être obtenus sans rupture de liaisons.

Parmi l'infinité de conformations, certaines sont **énergétiquement plus stables** que les autres.

11.1 Conformations de l'éthane

1. Construire une molécule d'éthane $\text{CH}_3 - \text{CH}_3$.
2. L'observer dans l'alignement des deux atomes de carbone :



J'ai changé la couleur des atomes d'hydrogène pour les repérer plus facilement :

- rouge, vert et bleu pour les hydrogènes portés par l'atome de carbone de devant ;
- cyan, violet et orange pour les hydrogènes portés par l'atome de carbone de derrière.

Téléchargez Avogadro (<http://avogadro.cc>) pour construire et visualiser les modèles moléculaires. L'outil rotation permet de faire tourner la liaison C—C.



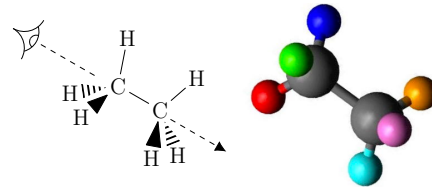
Disposer les atomes d'hydrogène en **conformation décalée** (0°).

Pourquoi est-ce la **conformation de plus basse énergie** ?

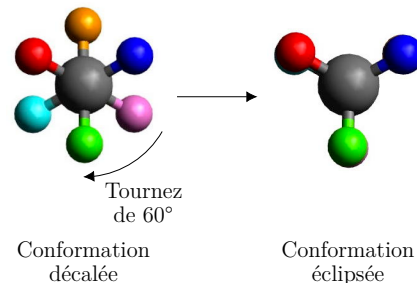


La gêne stérique entre hydrogènes est minimale. C'est la conformation la plus stable.

3. Disposer les atomes d'hydrogène en **conformation éclipsée** (60°) :



Lorsqu'on observe selon l'alignement des deux carbones, les hydrogènes que j'ai coloré en cyan, violet et orange disparaissent derrière les autres hydrogènes. On dit qu'ils sont éclipsés.

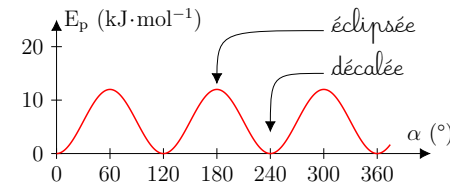


Pourquoi est-ce la **conformation de plus haute énergie** ?

La gêne stérique entre hydrogènes est maximale. C'est la conformation la moins stable.

Contrairement à ce que peut laisser penser le modèle moléculaire en bâton, les atomes d'hydrogène portés par les atomes de carbone sont très proches, et donc se gênent en conformation éclipsée.

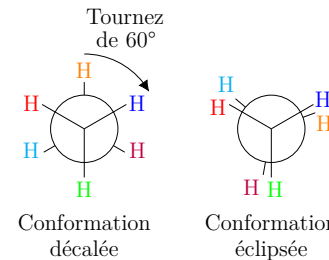
4. On trace la courbe représentant l'**énergie potentielle** des conformations de l'éthane en fonction des valeurs de l'angle α , en prenant comme référence de $E_p = 0 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ l'énergie potentielle de la conformation la plus stable.



Indiquer sur cette représentation les conformations éclipsées et décalées.

5. Afin de représenter les différentes conformations, on dessine la molécule en **projection de Newman** :

1. on regarde la molécule dans l'axe d'une liaison simple carbone-carbone ;
2. les liaisons du carbone au premier plan sont représentées par trois segments partant du même point, les angles entre chacun de ces segments sont de 120° comme dans la réalité ;
3. Le carbone en arrière plan est représenté par un cercle sur lequel on place les trois liaisons restantes.

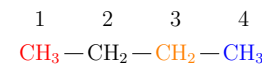


Remarque : la conformation éclipsée est très légèrement « tournée » afin de visualiser les atomes du second carbone plus facilement.

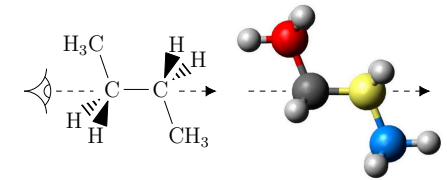
Cette représentation permet de visualiser aisément les effets d'**interactions stériques** entre des groupes portés par deux carbones adjacents.

11.2 Conformations du butane

1. Construire la molécule de butane.
2. On s'intéresse aux différentes conformations obtenues par rotation autour de la liaison entre les atomes de carbone n°2 et 3 de la chaîne carbonée :

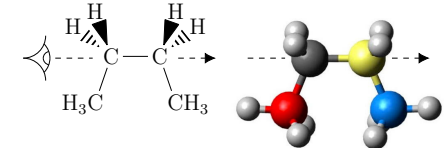


- la conformation la plus stable est celle pour laquelle les groupes méthyle $-\text{CH}_3$ sont à l'opposé (numérotée ④ par la suite).



Groupes méthyles diamétralement opposés.

- la conformation la moins stable est celle pour laquelle les groupes méthyle $-\text{CH}_3$ sont éclipsés (numérotée ①).

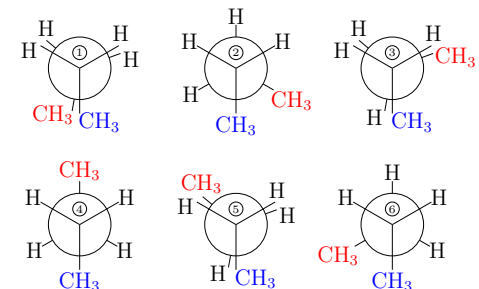


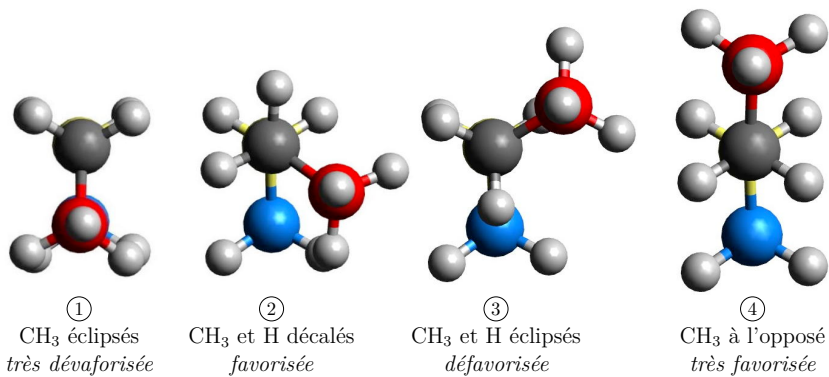
Groupes méthyles éclipsés.

- certaines conformations correspondent à des maxima locaux d'énergie ; ce sont celles pour lesquelles les groupes méthyle $-\text{CH}_3$ éclipsent un atome d'hydrogène (③ et ⑤).

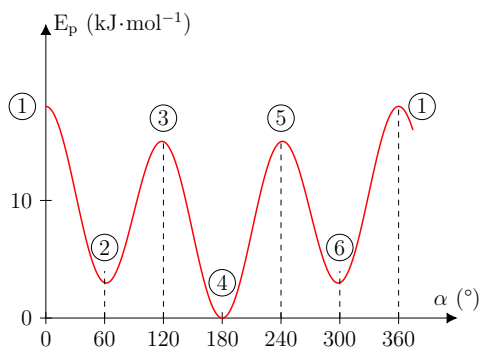
3. Représenter les conformations précédentes en projection de Newman.

Le méthyle $-\text{CH}_3$ sur le carbone n°2 tourne de 60° entre chaque figure.



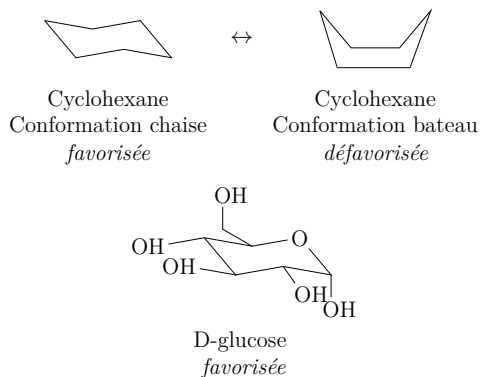


4. On trace la courbe représentant l'énergie potentielle des conformations du butane en fonction des valeurs de l'angle α , en prenant comme référence de $E_p = 0 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ l'énergie potentielle de la conformation la plus stable. Repérer sur cette représentation les conformations précédentes (les numéroter).



11.3 Blocage de certaines conformations

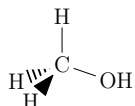
Certaines conformations de molécules sont très défavorisées, voir même bloquées, en raison d'une gêne stérique importante. C'est le cas du cyclohexane C₆H₁₂ ou même du D-glucose, dont les conformations en forme de « chaise » sont très favorisées.



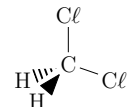
Correction des exercices du chapitre 17 (suite)

17.1 N° 3 p. 294 – Représentation de Cram

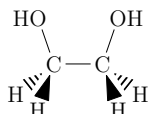
a. Méthanol CH₃OH :



b. Dichlorométhane CH₂Cl₂ :

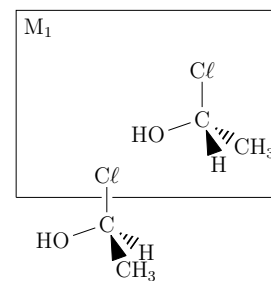


c. Éthane-1,2-diol CH₂OH—CH₂OH :



17.2 N° 17 p. 298 – Représentation de Cram

a. À gauche, la molécule proposée dans le texte ; à droite, son image dans un miroir M₁ :



b. Image dans le miroir M₂ :

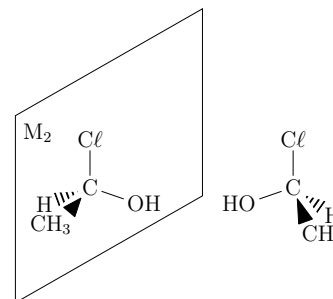
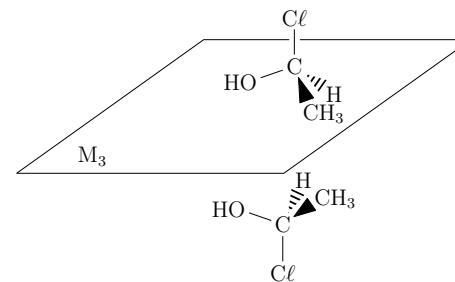


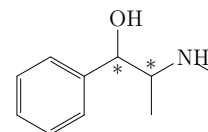
Image dans le miroir M₃ :



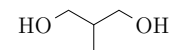
c. Les trois molécules dessinées sont toutes les trois identiques, car ce sont toutes les énantiomères de la molécule de départ.

17.3 N° 6 p. 294 – Carbones asymétriques

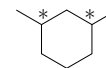
a. Deux carbones asymétriques C* :



b. Aucun carbone asymétrique :



c. Deux carbones asymétriques C* :

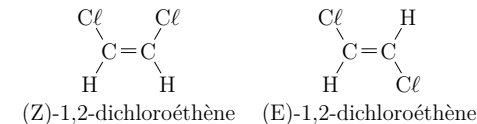


d. Aucun carbone asymétrique :



17.4 N° 9 p. 295 – Diastéréoisomères

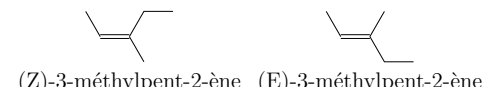
a. Deux diastéréoisomères :



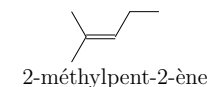
b. Deux diastéréoisomères :



c. Deux diastéréoisomères :



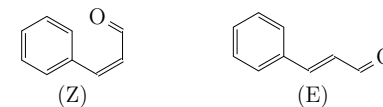
d. Une seule molécule, pas de stéréoisomère :



e. Deux diastéréoisomères :

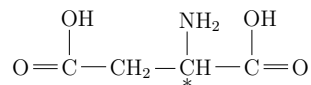


f. Deux diastéréoisomères :

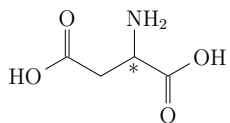


17.5 N° 11 p. 295 – Acide α-aminé

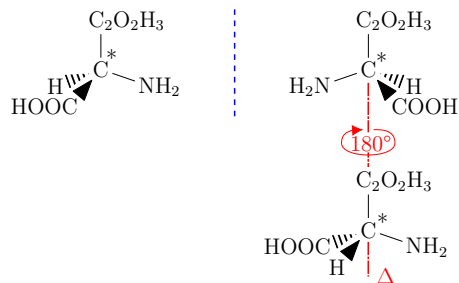
a. Les groupes carboxyles -COOH sont en bout de chaîne, et le groupe amino -NH₂ porté en alpha (α), c'est-à-dire sur le carbone adjacent à l'un des deux groupes carboxyles. Formule semi-développée :



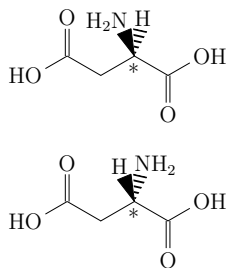
On vérifie bien l'adéquation avec la formule brute $\text{C}_4\text{H}_7\text{O}_4\text{N}$. Formule topologique :



- b. L'atome de carbone asymétrique C^* est indiqué sur les deux formules précédentes. On a donc deux énantiomères :



Nonobstant le fait que la molécule n'est pas plane, on peut utiliser la représentation de Cram uniquement pour le carbone asymétrique :

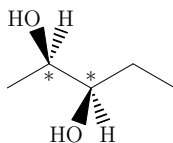


17.6 N° 15 p. 297 – Diol

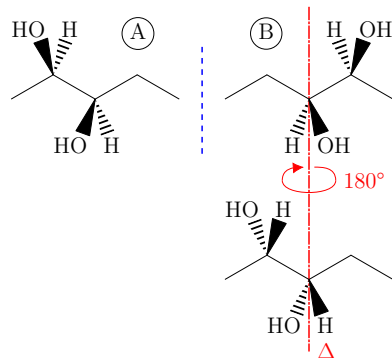
- a. La molécule a la même racine que le pentane, en raison de sa chaîne carbonée comptant cinq atomes de carbone.

Deux groupes hydroxyles sont portés par les carbones 2 et 3 de la chaîne carbonée, la molécule est un double alcool, d'où la terminaison -ol précédée d'un di- : il s'agit d'un diol.

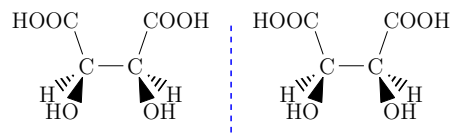
Les atomes de carbone numérotés 2 et 3 sont asymétriques C^* :



- b. Les molécules A et B sont images l'une de l'autre dans le miroir : ce sont des énantiomères. Elles sont chirales. Elles ne sont pas superposables.



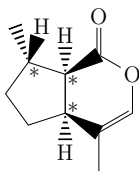
- c. Cette molécule porte deux carbones asymétriques. On forme son image dans un miroir :



La molécule est identique à son image dans un miroir : les deux molécules sont superposables, la molécule n'est pas chirale, en raison de l'existence d'une symétrie dans la molécule. Cette molécule est une forme *méso*.

17.7 N° 19 p. 298 – Nepetalactone

- a. Comme indiqué dans le texte, seule la molécule A est dotée de l'effet « remarquable » sur les chats.
b. Les carbones asymétriques C^* de la molécule A sont marqués :



- c. A et B sont images l'une de l'autre dans un miroir. Ce sont des énantiomères.