

CONFIGURATION ET CONFORMATION

I> Notion préalable :1> *Formules de constitution ou plane* :

On distingue :

- La formule de *Lewis* : voir chapitre précédent
- La formule *développée plane* : identique à celle de Lewis mais on omet les doublets libres
- La formule *semi - développée plane* : idem écriture précédente mais écriture simplifiée
- La formule *topologique* (Hors Prog.) : Nathan doc 4 page 199

Remarque : la formule brute n'est pas une formule de constitution car elle ne rend pas compte de la nature et de l'enchaînement des liaisons des atomes de la molécule.

2> *Formule spatiale : stéréochimie*

Les formules planes ne rendent pas compte de l'aspect tri - dimensionnel des molécules. On peut utiliser des modèles moléculaires *compacts* ou *éclatés*, ou des logiciels, mais sur le papier on utilise la représentation de *Cram* : Nathan page 203

3> *Isomères* :

Des *isomères* sont des composés de même formule brute mais dont les atomes sont disposés différemment.

Souvent une étude par formule plane suffit pour distinguer deux isomères mais lorsqu'il faut travailler en formule spatiale, on parle de *stéréoisomérisation*.

A cause de ces deux cas, plan et espace, on distingue :

- un isomérisation dans le plan : isomérisation de constitution
- deux dans l'espace : isomérisations de conformation et de constitution

II> Isomérisation de constitution :1> *Définition* :

Deux composés chimiques sont *isomères de constitution* s'ils ont même formule brute mais formules de constitution différentes.

Il est fondamentale de comprendre que des isomères de constitution sont des corps purs différents : ils ont des propriétés physiques et chimiques différentes.

2> *Isomérisation de chaîne ou de squelette* :

Ce sont des isomères qui ne diffèrent que par l'enchaînement des atomes de carbone : voir Nathan doc. 1 page 198

3> *Isomérisation de position* :

Ce sont des isomères ne diffèrent que par la position du groupe fonctionnel : voir Nathan doc. 2 et 3

4> *Isomérisation de fonction* :

Ce sont des isomères ne diffèrent que par la nature du groupe fonctionnel : voir Nathan doc. 5 page 199

Remarque : les propriétés physiques et chimiques sont peut différentes entre deux isomères de chaînes, d'avantage avec des isomères de position, totalement entre deux isomères de fonction.

5> Insuffisance de l'isométrie de constitution :

Voir doc. 14 page 203 : les molécules ont même formule plane mais elles sont différentes car elles sont non superposables. Ainsi, comme déjà écrit plus haut, l'isométrie de constitution ne permet pas de le voir et il faut travailler dans l'espace avec la stéréoisométrie.

On retient : deux stéréoisomères ont même formule brute mais des formules spatiales différentes.

III> Stéréoisométrie de conformation :

1> Définitions :

on appelle *conformations* d'une molécule, les différentes structures spatiales qu'elle peut prendre par suite de rotations autour de ses liaisons simples : il en existe une infinité.

Il est fondamental de comprendre que le passage d'une conformation à une autre se fait sans rupture des liaisons simples.

Des molécules identiques dans des conformations différentes sont des *stéréoisomères de conformation*.

2> Projection de Newman :

c'est une méthode qui facilite l'étude des conformations d'une molécule.

Principe : voir Nathan doc. 20 page 207 ainsi que son commentaire. L'angle α est appelé *angle de torsion*.

Remarque : dans cet ouvrage, c'est le « derrière » de la molécule qui bouge – cercle bleu-, le « devant » restant fixe mais cela peut changer d'un ouvrage à l'autre.

3> Exemple de l'éthane :

Réalisons le modèle moléculaire : voir doc. 17 et 18 page 206

En raison des répulsions entre les doublets liants, toutes les conformations ne sont pas équivalentes au niveau énergétique : plus les répulsions sont faibles, plus la molécule est stable et son énergie faible.

On rencontre alors deux situations particulières :

- *conformation éclipsée* : répulsion maximale, conformation instable, énergie maximale : voir doc. 20a et 21 pour les valeurs de α et de l'énergie
- *conformation décalée* : répulsion minimale, conformation stable, énergie minimale : voir doc. 20b et 21 pour les valeurs de α et de l'énergie

Entre ces deux états, on trouve une infinité de conformation dont l'énergie varie entre ces deux extrêmes, et ce en raison de la libre rotation autour de la liaison simple C-C.

. Inter conversion des molécules :

L'énergie nécessaire pour passer de décalée à éclipsée – voir doc. 21 – est suffisamment faible pour être apportée par l'agitation thermique : ainsi, à température ambiante, on ne peut séparer ou isoler des conformères de l'éthane.

Remarque : la conformation décalée, la plus stable, est toutefois la plus probable.

4> Cas du butane :

Réalisons le modèle moléculaire : voir doc. 22 page 206

Trois rotations sont maintenant possibles – voir doc. 23 flèches vertes – : on ne considère finalement que l'axe centrale C2C3.

Or, il faut maintenant prendre en considération les répulsions méthyle-méthyle plus fortes que méthyle – H, elles-mêmes plus fortes que les répulsions H-H.

Ainsi, on trouve d'avantage de conformations particulières résumées sur les documents 24 et 25 pour leur nom et les valeurs de α , et pour les énergies sur le documents 26.

. Inter conversion des molécules :

Mêmes conclusions que pour le butane.

Remarque : les conformations décalées, les plus stables, sont toutefois les plus probables.

IV> Stéréoisomérisation de configuration :

1> *Définition* :

Deux stéréoisomères sont dits de configuration quand, pour passer de l'un à l'autre, il faut briser au moins une liaison covalente.

Deux *isomères de configuration* sont deux molécules différentes – alors que des isomères de conformations sont des molécules identiques- .

. Inter conversion des molécules :

A la température ordinaire, la rotation autour d'une double liaison est bloquée, l'agitation thermique étant insuffisante.

Les isomères de configuration, corps chimiques différents, sont séparables et isolables car leurs propriétés physiques et chimiques peuvent très différentes.

2> *Exemple : isomérisation Z-E* :

Pour passer de l'un à l'autre, il faut briser la liaison double : ce sont bien des isomères de configuration, de propriétés physico-chimiques très différentes : voir exemples page 202.

V> Enantiomérisation : une autre isomérisation de configuration :

1> *Carbone asymétrique* :

Un atome de carbone *asymétrique* est un atome de C tétragonal lié à quatre atomes, ou groupes d'atomes, tous différents : on le note C*. Voir pages 203 et 204.

2> *Chiralité* :

Une molécule *chirale* est une molécule non superposable à son image dans un miroir plan : voir doc. 15 et 16. Dans le cas contraire, elle est dite *achirale*.

Une molécule possédant un seul atome asymétrique C* est toujours chirale, mais une molécule en possédant plusieurs n'est pas toujours chirale.

3> *Enantiomérisation* :

Deux stéréoisomères de configuration, non superposables, et images l'un de l'autre dans un miroir plan, sont appelés *énantiomères*.

Deux stéréoisomères non énantiomères sont appelés *diastéréoisomères*.

Ainsi, à toute molécule chirale correspond deux énantiomères, elle-même et son image.

Exemple : à développer sur votre feuille.

• Propriétés d'énantiomères chiraux :

Ils diffèrent par leur réactivité chimique, odeur, goût, propriétés biologiques et pharmacologiques.