

Chapitre XI : Stéréochimie

Stéréoisomères de conformation ou conformères

Plan :

I- GENERALITES.....	2
1- Formule élémentaire et formule moléculaire ou formule brute.....	2
a- Analyse élémentaire et formule élémentaire	2
b- Insaturations.....	3
2- Représentation des molécule organique	4
a- Représentation plan.....	4
b- Représentation spatiale	4
3- Isomérisation et isomères	5
a- Définition	5
b- Types d'isomérisation	5
II- STEREOISOMERES DE CONFORMATION OU CONFORMERES	6
1- Définition	6
a- Définition	6
b- Equilibre conformationnel.....	6
c- Cas limite : atropoisomérisation.....	6
2- Etude énergétique de différents conformères	7
a- Molécule d'éthane	7
b- Molécule de butane.....	8
c- Cyclohexane (Programme de PCSI, Option PC)	9
d- Cyclohexane substitué (Programme de PCSI, Option PC).....	10

Chapitre XI : Stéréochimie

Stéréoisomères de conformation ou conformères

La **stéréochimie** porte sur l'étude de la position d'atomes ou groupes d'atomes dans l'espace autour d'un atome central, en général de carbone :

- soit **tétravalent** et donc de géométrie tétraédrique, car de type AX_4 d'après la théorie VSEPR ;
- soit **trivalent** (atome de carbone engageant une double liaison et 2 liaisons simples) et donc de géométrie trigonale plane, , car de type AX_3 d'après la théorie VSEPR.

On distingue deux types d'études stéréochimiques :

- la **stéréochimie statique** avec l'étude
 - des **stéréoisomères de conformation** ou **conformères**
 - et des **stéréoisomères de configuration** ;
- la **stéréochimie dynamique** qui porte sur l'étude de l'influence de la position de groupes d'atomes dans l'espace au cours d'une réaction chimique.

La **stéréochimie statique** fait l'objet du présent chapitre. La **stéréochimie dynamique** est étudiée à travers quelques mécanismes réactionnels en chimie organique. Elle est plus difficile à appréhender bien que plus importante car elle permet d'interpréter le déroulement à l'échelle moléculaire de la réaction chimique !

I- Généralités

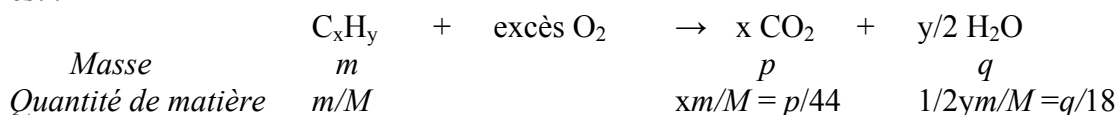
1- Formule élémentaire et formule moléculaire ou formule brute

a- Analyse élémentaire et formule élémentaire

L'**analyse élémentaire** d'un hydrocarbure (composé organique constitué de carbone et d'hydrogène pour l'essentiel) donne les **pourcentages pondéraux en masse** de chaque élément constituant la molécule, les principaux étant celui du carbone et de l'hydrogène.

Cette **analyse élémentaire** est obtenue par **combustion** avec un excès de dioxygène d'une masse connue d'un échantillon d'hydrocarbure de masse molaire M . Des filtres spécifiques fixent le dioxyde de carbone et l'eau formés lors de cette transformation chimique et permettent de mesurer les masses p et q de chacun de ces produits de combustion.

Ainsi pour un hydrocarbure de formule moléculaire C_xH_y l'équation de la réaction de combustion est :



On obtient alors :

$$x = \frac{p \times M}{44 \times m} \quad \text{et} \quad y = \frac{2 \times q \times M}{18 \times m}$$

La masse molaire M de l'hydrocarbure est mesurée par **spectrométrie de masse** (spectrométrie hors programme).

Pour les autres éléments éventuellement présents dans l'hydrocarbure, d'autres transformations chimiques sont nécessaires :

- pour l'azote : minéralisation, soit transformation en ammoniac NH_3 ou en diazote N_2 ;
- pour l'oxygène : conversion en monoxyde de carbone CO à haute température en présence d'un excès de carbone et sous atmosphère inerte ;
- pour un halogène : minéralisation en ions halogénure et dosage de ces ions ;
- pour le soufre : transformation en sulfate SO_4^{2-}

Cette étude permet alors de déterminer la **formule moléculaire ou formule brute** de l'hydrocarbure.

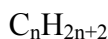
b- Insaturations

i- Définition

Une **insaturation** correspond à la présence d'une double liaison (voire triple si deux insaturations) ou d'un cycle. Cette **insaturation** induit un nombre d'atomes d'hydrogène inférieur à celui présent dans un hydrocarbure saturé (ne présentant ni double liaison, ni cycle).

ii- Alcane saturé

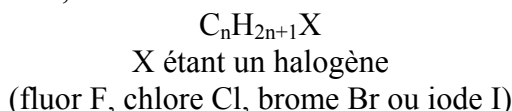
Ainsi un **alcane saturé** à n atomes de carbone est de formule moléculaire :



La présence d'une double liaison (**alcène**) ou d'un cycle (**cycloalcane**) conduit à l'absence de 2 atomes d'hydrogène pour un hydrocarbure à n atomes de carbone. Ainsi la formule moléculaire d'un **alcène** ou d'un **cycloalcane** est :



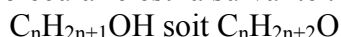
Pour un **halogénoalcane** saturé, la formule moléculaire est la suivante :



L'absence de 2 atomes d'hydrogène ou de $2x$ atomes d'hydrogène est synonyme de présence d'une ou x insaturations.

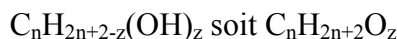
iii- Alcool saturé

Pour un **alcool** saturé, la formule moléculaire est la suivante :



L'absence de 2 atomes d'hydrogène ou de $2x$ atomes d'hydrogène est synonyme de présence d'une ou x insaturations.

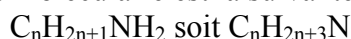
Pour un **polyol** saturé à z fonctions alcools de groupe hydroxyle OH, la formule moléculaire est la suivante :



L'absence de 2 atomes d'hydrogène ou de $2x$ atomes d'hydrogène est synonyme de présence d'une ou x insaturations.

iv- Amine saturée

Pour une **amine** saturée, la formule moléculaire est la suivante :



L'azote étant trivalent contrairement à l'oxygène divalent

L'absence de 2 atomes d'hydrogène ou de $2x$ atomes d'hydrogène est synonyme de présence d'une ou x insaturations.

On peut en déduire la formule générale suivante pour le calcul du nombre N d'insaturations :

$$N = \frac{2 \times n_{IV} + 2 + n_{III} - n_I}{2}$$

avec n_{IV} nombre d'atomes tétravalents (comme le carbone ou le silicium)

n_{III} nombre d'atomes trivalents (comme l'azote ou le phosphore)

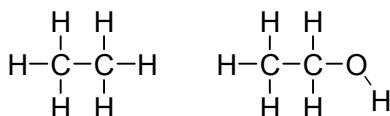
n_I nombre d'atomes monovalents (comme l'hydrogène ou un alcalin ou un halogène)

2- Représentation des molécule organique

a- Représentation plan

Il existe différents types de représentations planes des molécules organiques :

- **représentation développée** où toutes les liaisons sont écrites :



éthane

éthanol

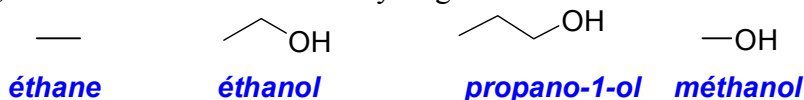
- **représentation semi-développée** où n'apparaissent que les liaisons C-C et C-hétéroatome (atome autre que carbone et hydrogène) :



éthane

éthanol

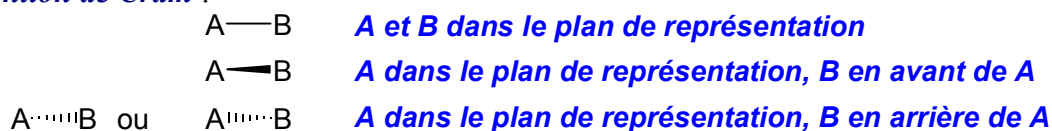
- **représentation topologique** où les symboles C et H des atomes de carbone et d'hydrogène ne sont plus écrits, sauf dans le cas d'atome d'hydrogène lié à des atomes autres que du carbone :



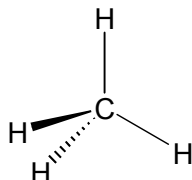
b- Représentation spatiale

Il existe différentes convention de représentation spatiale de molécules organiques dans un espace à deux dimensions :

- **convention de Cram** :



Ainsi la représentation spatiale du méthane est la suivante :



- **convention de Newman** :

- on regarde un axe de liaison selon $\text{C}_1\text{-C}_2$;
- le carbone C_1 est représenté par un cercle, les liaisons que ce carbone engagent partent du centre du cercle ;
- le carbone C_2 n'est pas représenté (masqué par le carbone de C_1), les liaisons que ce carbone C_2 engagent partent de la périphérie du cercle (en partie masquée par le carbone C_1) ;