## 3.3 Analyse conformationnelle de la molécule de cyclohexane

## 3.3.1 Représentation du cyclohexane

La représentation la plus utilisée du cyclohexane est la projection plane. Dans cette représentation, il faut faire particulièrement attention à respecter quelques règles :

- Les liaisons C-C qui sont en faces l'une de l'autre doivent être parallèles.
- Les substituants en position "haute" sur un carbone en position "haute", ou en position "basse" sur un carbone en position "basse" sont verticaux. On dit qu'ils sont en position **axiale**.
- Les autres substituants sont en position **équatoriale**, la liaison doit être parallèle aux liaisons C-C du cycle mettant en jeu les quatre carbones les plus proches.

Remarque: On peut également, au besoin, utiliser la représentation de NEWMAN pour représenter le cyclohexane.

Dans cette conformation, le cyclohexane est dit en **conformation chaise**. C'est le conformère le plus stable du cyclohexane.

## 3.3.2 Diagramme énergétique

Le cyclohexane possède 4 conformations différentes : les conformations chaise, bateau, croisée, et enveloppe.

Pour le cyclohexane, il n'existe pas de coordonnée réactionnelle évidente, on représente donc un diagramme énergétique sans axe d'abscisse.

Remarque: La barrière d'énergie à franchir pour passer d'une forme chaise à l'autre est donc de l'ordre de  $43 \,\mathrm{kJ} \cdot \mathrm{mol}^{-1}$ . En ajoutant des substituants autour du cycle carboné, il est donc possible de favoriser un conformère chaise par rapport à l'autre.

## 3.3.3 Cyclohexane monosubstitué

Lorsque le cyclohexane est substitué, le **conformère chaise le plus stable** est obtenu en plaçant ce substituant dans la **position équatoriale**.

On peut mesurer une différence d'énergie potentielle d'environ  $7.3\,\mathrm{kJ\cdot mol^{-1}}$  entre les deux conformères substitués par un groupement méthyle.

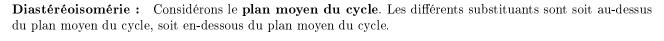
Remarque: Cette différence d'énergie potentielle peut être expliquée en comparant le cyclohexane monosubstitué au butane. Lorsque le substituant est en position **axiale**, il se forme deux interactions **décalée** *gauche*  $(= 2 \times 3, 6 = 7, 2 \,\mathrm{kJ \cdot mol^{-1}})$ , tandis que lorsque le substituant est en position **équatoriale**, il se forme deux interactions **décalée** *anti*.

Remarque : La différence d'énergie potentielle entre les deux conformères dépend de la nature du substituant introduit.

Différence d'énergie potentielle entre les deux confomères chaise du cyclohexane monosubstitué pour différents substituants.

Groupe -X	$-\mathrm{CH}_3$	$-\mathrm{CH}(\mathrm{CH}_3)_2$	$-\mathrm{C}(\mathrm{CH_3})_3$	-Cl	-CN	$-\mathrm{CO_2H}$
$Ep \; (kJ \cdot mol^{-1})$	7,3	9,2	20	$^{2,5}$	0,8	5,9

3.3.4	Cyclohexane	disubstitué
0.0.1	C, Clolic Aulic	aisabsutac



Deux substituants sont en **position relative** *cis* s'ils pointent tous les deux du même côté **du plan moyen du cycle**. Ils sont en **position relative** *trans*, s'ils pointent de part et d'autre **du plan moyen du cycle**.

Étude des 1,4-diméthylcyclohexane Si les deux méthyles sont en position cis, les deux conformères chaises sont équivalents. En revanche, en position trans, il existe une différence d'énergie potentielle de  $14,6\,\mathrm{kJ}\cdot\mathrm{mol}^{-1}$  entre les deux conformères, à cause de l'apparition de quatre interactions  $butane\ gauche$ .

Étude des 1,2-diméthylcyclohexane Si les deux méthyles sont en position trans, on mesure une différence d'énergie potentielle de  $11,5 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$  entre les deux conformères.