

3 STÉRÉOCHIMIE DE CONFORMATION

Deux structures moléculaires qui ne diffèrent que par la rotation autour d'une ou plusieurs liaisons simples sont deux **conformations** différentes de la molécule.

3.1 Analyse conformationnelle de la molécule d'éthane

L'ensemble des conformations est obtenu en faisant tourner les deux groupes méthyle (CH_3) de 360° l'un par rapport à l'autre autour de la liaison C-C. Pour analyser ces conformations, on représente la molécule en projection de NEWMAN, et on utilise l'**angle dièdre** ω .

Dans le cas de l'éthane, on observe deux conformations particulières :

- Dans les cas $\omega = 0; 120; 240^\circ$, les atomes d'hydrogène portés par l'atome de carbone avant "cachent" les atomes d'hydrogène portés par l'atome de carbone arrière. La conformation s'appelle **conformation éclipsée**.

- Dans les $\omega = 60; 180; 300^\circ$, les atomes d'hydrogène portés par l'atome de carbone avant sont le plus éloignés possible des atomes d'hydrogène portés par l'atome de carbone arrière. La conformation s'appelle **conformation décalée**.

En considérant l'angle dièdre comme une coordonnée réactionnelle (C.R.), on peut tracer l'évolution de l'énergie potentielle de l'éthane en fonction de ω .

Un **conformère** (ou isomère de conformation) est une conformation particulière d'une molécule, qui représente un minimum local sur la courbe d'énergie potentielle molaire. Un maximum local correspond à un **état de transition**.

La différence d'énergie potentielle molaire entre un maximum local et un minimum local consécutif sur la courbe d'énergie potentielle s'appelle une **barrière de rotation**. C'est l'**énergie d'activation** pour passer d'un conformère à un autre.

3.2 Analyse conformationnelle de la molécule de butane

L'ensemble des conformations est obtenu en considérant la rotation autour de la liaison C^2-C^3 , toutes les autres rotations étant bloquées.

Dans le cas du butane, on observe quatre conformations particulières :

- Dans les cas $\omega = 0^\circ$, le groupement méthyle porté par l'atome de carbone avant "cache" le groupement méthyle porté par l'atome de carbone arrière. La conformation s'appelle **conformation éclipsée *syn***. C'est la conformation de plus faible énergie, car les groupements méthyles sont les plus proches.
- Dans les $\omega = 60; 300^\circ$, on retrouve la conformation décalée de l'éthane, mais les deux méthyles sont du même côté du plan horizontal. La conformation s'appelle **conformation décalée *gauche***. Dans cette conformation, les méthyles sont en **interaction butane gauche**.
- Dans les $\omega = 120; 240^\circ$, on retrouve une conformation de type éclipsée, mais les deux méthyles sont de part et d'autre du plan horizontal. La conformation s'appelle **conformation éclipsée *anti***.
- Dans les $\omega = 180^\circ$, on retrouve une conformation de type décalée, mais les deux méthyles sont de part et d'autre du plan horizontal. La conformation s'appelle **conformation décalée *anti***. C'est la conformation de plus faible énergie, car les groupements méthyles sont les plus éloignés.

Comme précédemment, en considérant l'angle dièdre comme une coordonnée réactionnelle (C.R.), on peut tracer l'évolution de l'énergie potentielle du butane en fonction de ω .