

**TP N° 2 : Analyse conformationnelle de molécules organiques**

L'ensemble des calculs sera réalisé en utilisant le champ de force MM+ à l'aide de logiciel Hyperchem 7.5

**Partie.1. Inversion de l'éthane et du butane:**

**a) Inversion de l'éthane:** D'un point de vue structural, la molécule d'éthane possède deux conformations: une forme décalée (d) et une forme éclipsée (e). Le passage de la forme décalée à la forme éclipsée correspond à la rotation d'un groupement méthyle d'un angle de  $60^\circ$ . Énergétiquement, la forme décalée correspond à un minimum absolu alors que la forme éclipsée est un maximum (état de transition).

Cette barrière de rotation est estimée expérimentalement à  $12 \text{ kJ.mol}^{-1}$  (Figure 1).

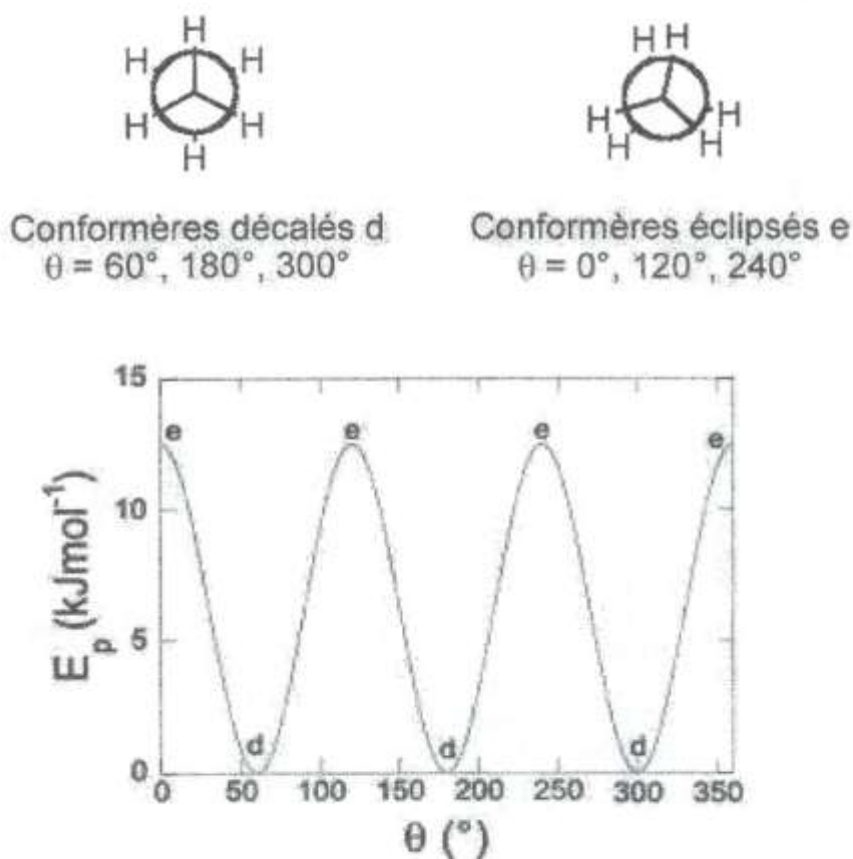
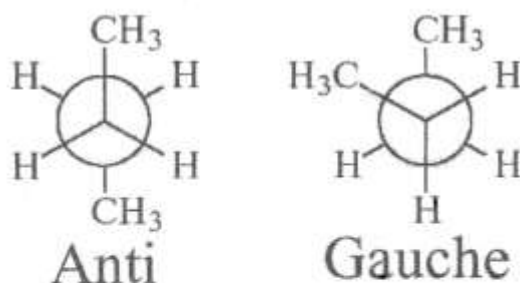


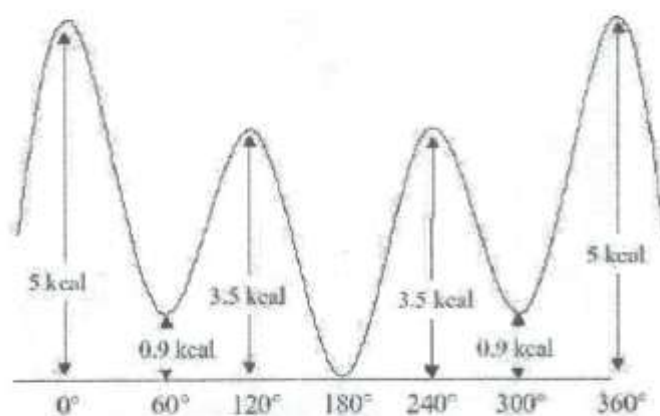
Figure 1: différence d'énergie expérimentale de l'éthane en fonction de l'angle de rotation.

- Nous nous proposons donc de déterminer la valeur de cette barrière de rotation au moyen de l'outil théorique
- A l'aide de Hyperchem, Optimisez les deux géométries.  
Calculez et analysez les paramètres géométriques
- Calculez la différence d'énergie entre ces deux formes de l'éthane. Comparez cette donnée avec l'expérience.

**b) Inversion du butane:** D'un point de vue structural, la molécule de butane est un peu plus compliquée que l'éthane. En effet, il existe deux conformations décalées: le conformère gauche et le conformère anti correspondant à la rotation autour de la liaison carbon-carbone centrale (Figure 2) et deux conformations éclipsées.



**Figure 2:** conformations décalées (Anti:  $180^\circ$  et Gauche:  $60^\circ$ ) du butane.



**Figure 3:** Différence d'énergie expérimentale du butane en fonction de l'angle de rotation.

L'énergie expérimentale du butane en fonction de l'angle de rotation autour de la liaison centrale carbone-carbone est donnée dans la figure 3.

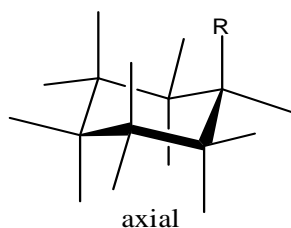
- Quelles sont les conformations du butane pour chaque minimum et chaque maximum d'énergie?

	$E_{\text{tot}}$	$E_{\text{st}}$	$E_{\text{bd}}$	$E_{\text{tors}}$	$E_{\text{es}}$	$E_{\text{vdw}}$

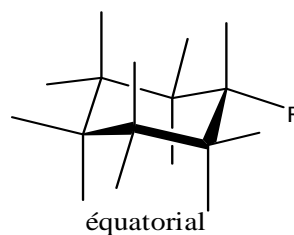
## Partie 2. Analyse conformationnelle des cyclohexanes substitués.

2.1. Les  
du

conformations (axiale/équatoriale) des dérivés  $\text{C}_6\text{H}_{11}\text{-R}$   
cyclohexane ( $\text{R}=\text{Me}$ )

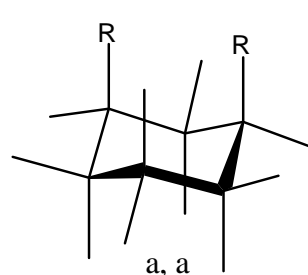
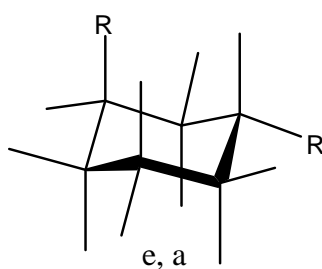
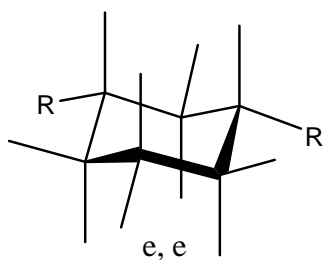


ou



	$E_{\text{tot}}$	$E_{\text{st}}$	$E_{\text{bd}}$	$E_{\text{tors}}$	$E_{\text{es}}$	$E_{\text{vdw}}$
ax						
eq						

2.2. Stabilité relative des conformères ee, ea et aa du 1,3- $\text{R}_2$ -cyclohexane ( $\text{R}=\text{Me}$ )

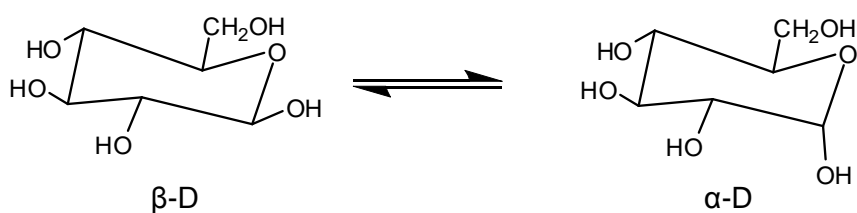


	$E_{\text{tot}}$	$E_{\text{st}}$	$E_{\text{bd}}$	$E_{\text{tors}}$	$E_{\text{es}}$	$E_{\text{vdw}}$
e, e						
e, a						
a, a						

### 3-Analyse conformationnelle du glucopyranose:

- a)  $\alpha$ -D versus  $\beta$ -D-glucopyranose: le glucopyranose est l'une des formes prédominantes du glucose. Cette molécule existe principalement sous deux formes:

$\alpha$ -D-glucopyranose et  $\beta$ -D-glucopyranose (Figure4).



**Figure4:** équilibre entre  $\alpha$ -D et  $\beta$ -D-glucopyranose.

- Optimisez la géométrie des deux isomères, quel est la forme la plus stable?

	$E_{\text{tot}}$	$E_{\text{st}}$	$E_{\text{bd}}$	$E_{\text{tors}}$	$E_{\text{es}}$	$E_{\text{vdw}}$
$\alpha$ -D						
$\beta$ -D						