

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°. Energétiquement, 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 kJ.mol⁻¹ (Figure 1).

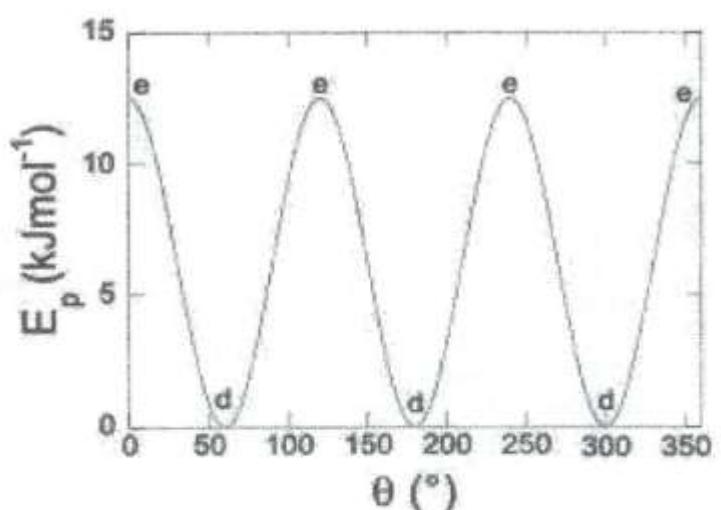


Figure 1: différence d'énergie expérimentale de l'éthane en fonction de l'angle de rotation.

- 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.

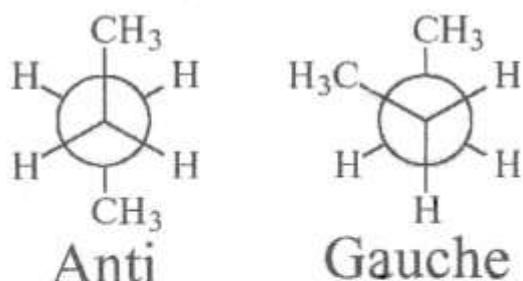


Figure 2: conformations décalées (Anti: 180° et Gauche: 60°) du butane.

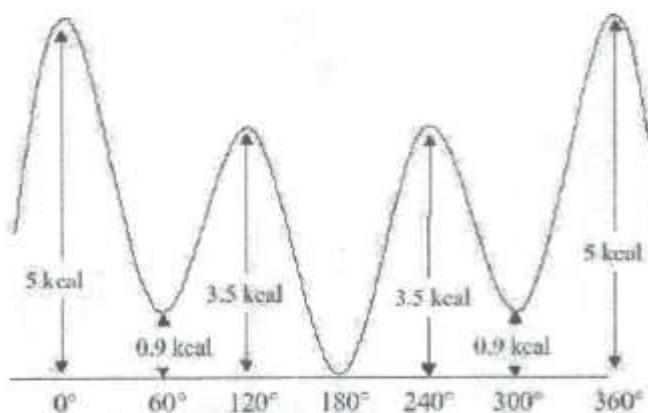


Figure 3: Différence d'énergie expérimentale du butane en fonction de l'angle de rotation.

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.

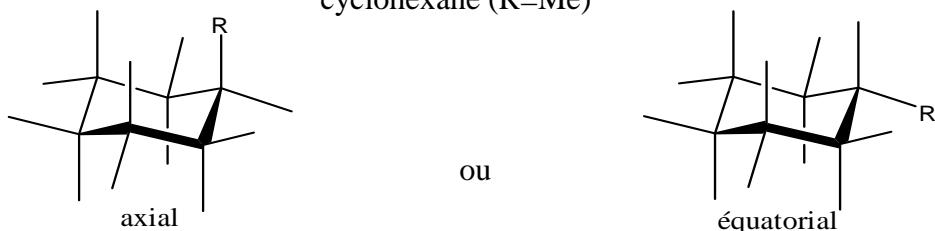
- Quelles sont les conformations du butane pour chaque minimum et chaque maximum d'énergie?

	E_{tot}	E_{st}	E_{bd}	E_{tors}	E_{es}	E_{vdw}

Partie 2. Analyse conformationnelle des cyclohexanes substitués.

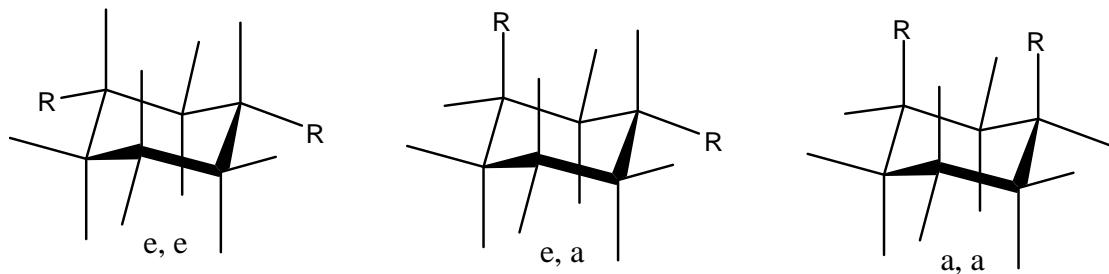
2.1. Les du

conformations (axiale/équatoriale) des dérivés $C_6H_{11}-R$
cyclohexane ($R=Me$)



	E_{tot}	E_{st}	E_{bd}	E_{tors}	E_{es}	E_{vdw}
ax						
eq						

2.2. Stabilité relative des conformères ee, ea et aa du 1,3-R₂-cyclohexane ($R=Me$)



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

3-Analyse conformationnelle du glucopyranose:

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

α -D-glucopyranose et β -D-glucopyranose (Figure4).

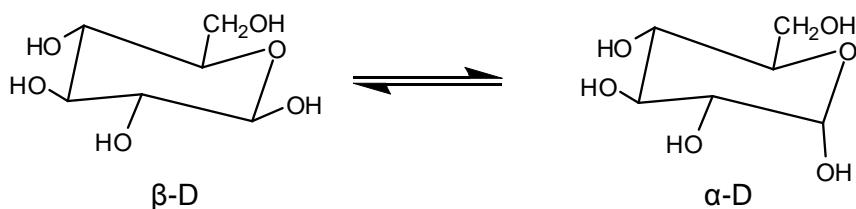


Figure4: équilibre entre α -D et β -D-glucopyranose.

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

	E_{tot}	E_{st}	E_{bd}	E_{tors}	E_{es}	E_{vdw}
α -D						
β -D						