

# Ch.10. RESUME. REPRESENTATION SPATIALE DES MOLECULES

## I. REPRESENTATION DES MOLECULES :

### 1) Les formules des molécules :

Formule brute	Formule développée	Formule semi-développée
$C_4H_{10}$	$  \begin{array}{cccc}  H & H & H & H \\    &   &   &   \\  H-C & -C & -C & -C-H \\    &   &   &   \\  H & H & H & H  \end{array}  $	$CH_3-CH_2-CH_2-CH_3$

**La formule topologique**



### 2) Isomères :

**Des isomères sont des molécules possédant la même formule brute mais des formules développées différentes.**

### 3) Formules spatiales des molécules

C'est la représentation dans un plan d'une molécule qui se développe dans l'espace (dans les 3 dimensions). Plusieurs conventions permettent de représenter une molécule dans l'espace, dont la représentation de Cram (1953).

**La représentation de Cram fait appel à la perspective** pour visualiser les molécules dans l'espace.

Règles de la représentation de Cram :

- Un trait plein (A—B) représente une liaison entre deux atomes A et B situés dans le plan de la feuille;
- Un triangle allongé plein (A B) représente une liaison avant de ce plan;
- Les liaisons en arrière du plan A B sont symbolisés par un triangle hachuré (ou parfois par un trait en pointillé).



## II. LA STEREOISOMERIE.

### 1) Stéréoisomérisation

Deux molécules sont stéréoisomères lorsqu'elles ont la même formule plane (semi développées ou développée) mais pas la même représentation spatiale. Ce sont des isomères de constitution.

On distingue 2 types de stéréoisomères:

- les stéréoisomères de conformation
- les stéréoisomères de configuration

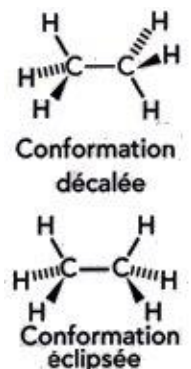
### 2) les stéréoisomères de conformation

Les conformations sont les différentes représentations spatiales d'une même molécule obtenus par libre rotation autour de liaisons simples. On dit que la molécule possède plusieurs stéréoisomères de conformation.

#### • Stabilité des conformations

La conformation la plus stable est celle qui correspond à une énergie minimale, cela correspond à un espacement maximal des groupes d'atomes portés par les carbones de la liaison simple autour de laquelle se fait la rotation.

• **Pour l'éthane**, (ci-contre), toutes les conformations ne sont pas équivalentes d'un point de vue énergétique, car les interactions répulsives entre les différents doublets de liaison ne sont pas les mêmes. Ces interactions sont d'autant plus intenses que les liaisons sont proches.



Les conformations décalées, où les liaisons C—H sont les plus éloignées possibles, sont plus stables que les conformations éclipsées où les liaisons C—H sont les unes en face des autres.

### 3) Stéréoisomérisation de configuration : cas des composés à un atome de carbone asymétrique

Un atome de carbone asymétrique est un atome de carbone tétraédrique lié à quatre atomes (ou groupes d'atomes) tous différents. On le note habituellement C\*. Une molécule possédant un seul atome de carbone asymétrique est toujours chirale.

Une molécule possédant un atome de carbone asymétrique peut exister sous 2 configurations différentes, image l'une de l'autre dans un miroir.

Les 2 stéréoisomères de configuration correspondant sont appelés des énantiomères.

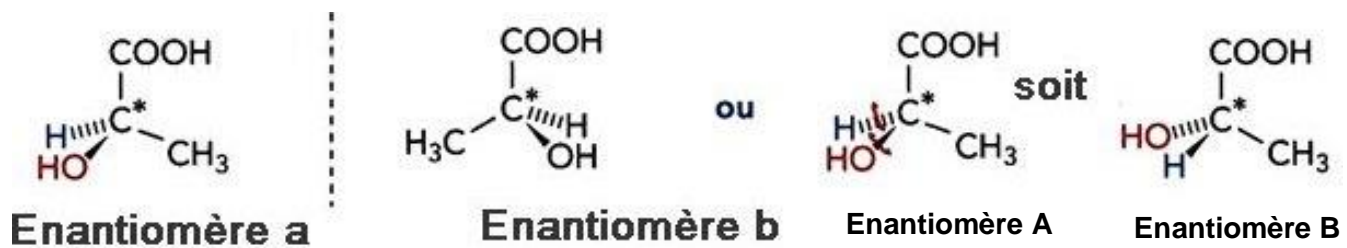
2 énantiomères possèdent des propriétés chimiques et physiques communes mais des propriétés biochimiques différentes.

Les 2 énantiomères du butan-2-ol	formule semi-développée
	<p style="text-align: center;">Butan-2-ol.</p> <p style="text-align: center;"><math>CH_3-CHOH-C_2H_5</math></p>

Les énantiomères présentent les mêmes caractéristiques physiques (température de changement d'état, masse volumique, etc.) et chimiques. Elles n'ont généralement pas les mêmes propriétés biochimiques.

Un mélange contenant les deux énantiomères en proportions égales (mélange équimolaire) est appelé mélange racémique.

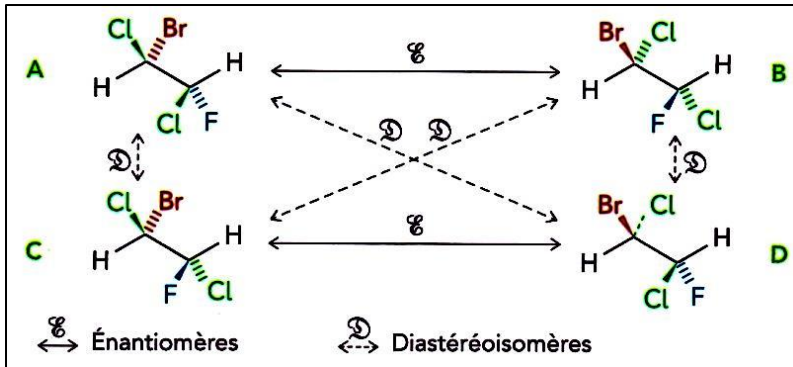
Ex : L'acide lactique existe donc sous forme de 2 énantiomères :



#### 4) Stéréoisomérisation de configuration : cas des composés à deux atomes de carbone asymétriques

La molécule de 1-bromo-1,2-dichloro-2-fluoroéthane ci-contre comporte deux atomes de carbone asymétriques.

Chacun de ces atomes de carbone asymétriques peut se trouver, indépendamment de l'autre, dans l'une des deux configurations possibles. Il existe ainsi 4 stéréoisomères de cette molécule.



Les molécules A et B, d'une part, puis C et D, d'autre part, sont images l'une de l'autre dans un miroir plan : ce sont des couples d'énantiomères. Tout autre couple envisagé est un couple de diastéréoisomères.

**Les diastéréoisomères sont des stéréoisomères de configuration qui ne sont pas énantiomères. Les diastéréoisomères présentent des propriétés physiques et chimiques différentes.**

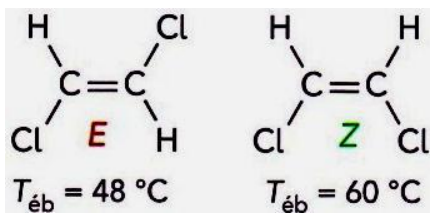
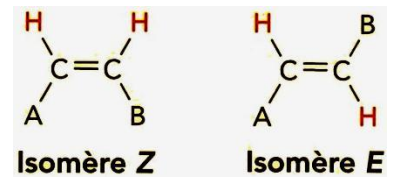
Sauf cas particulier, une molécule possédant deux atomes de carbones asymétriques présente 4 stéréoisomères.

#### 5) Stéréoisomérisation de configuration : diastéréoisomérisation Z/E

Il n'y a pas de rotation possible autour de la double liaison C=C. C'est pourquoi il existe une stéréoisomérisation Z et E.

Lorsque, de part et d'autre de la double liaison d'un composé de formule AHC=CHB, les groupements d'atomes A et B ne sont pas des atomes d'hydrogène H, il existe deux stéréoisomères de configuration appelés Z et E.

- dans le stéréoisomère Z, les deux atomes d'hydrogène se trouvent du même côté de la double liaison;
- dans le stéréoisomère E, ils se trouvent de part et d'autre de la double liaison.



**Deux diastéréoisomères Z et E ont des propriétés physiques et chimiques différentes.**

Ex : Les stéréoisomères Z et E du 1,2-dichloroéthène peuvent être séparés par distillation, car ils ont des températures d'ébullitions différentes.

**Deux isomères Z et E sont des diastéréoisomères.**