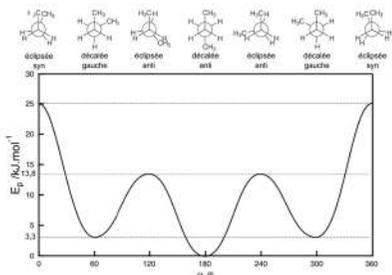
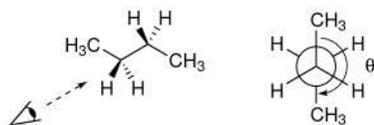


Comment... effectuer l'analyse conformationnelle d'une molécule linéaire ?

- Représenter la molécule en représentation topologique.
- Représenter la molécule en convention de Cram en développant la formule **uniquement autour des deux atomes** de la liaison choisie pour la représentation de Newman.
- Placer virtuellement l'œil de l'observateur le long de la liaison choisie et représenter la molécule en représentation de Newman.
- Chercher les conformations particulières parmi l'infinité de conformations existantes.
- Classer ces conformations par ordre d'énergie.
- Définir un angle de torsion θ .
- Tracer $E_p = f(\theta)$.

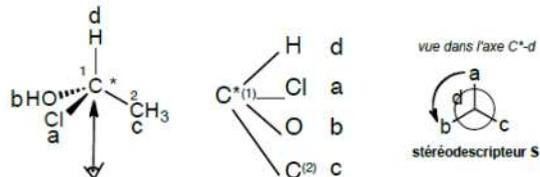


Exemple : Cas du butane

Comment... trouver le descripteur stéréochimique d'un C* ?

- Vérifier que le C choisi est bien asymétrique.
- Vérifier que la molécule est bien représentée en 3D !
- Numéroter les atomes de C.
- Utiliser les règles de Cahn, Ingold et Prelog pour classer les substituants : (a), (b), (c), (d).
- Regarder dans l'axe C*-(d).
- En fonction du sens de rotation (a)->(b)->(c), attribuer le descripteur stéréochimique R ou S :
 - Sens horaire : R
 - Sens anti-horaire : S

Exemple :



Comment... représenter une molécule connaissant sa configuration ?

- Donner la formule semi-développée de la molécule.
- Pour les carbones non-asymétriques, il n'y a qu'une seule configuration possible. Pour chaque carbone asymétrique, dessiner aléatoirement une configuration. Déterminer son descripteur stéréochimique. S'il s'agit de celui demandé, laisser cette configuration. S'il s'agit du mauvais descripteur stéréochimique, échanger 2 substituants.

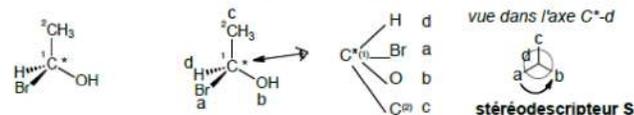
Exemple : On souhaite représenter le (R)-1-bromoéthanol



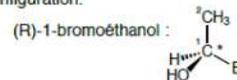
On identifie l'atome de carbone asymétrique (il n'y en a qu'un ici).

Détermination du stéréodescripteur :

1er essai de représentation :
(le H est placé derrière, ainsi la détermination du stéréodescripteur sera plus aisée.)



Il ne s'agit pas du stéréoisomère demandé, on échange donc deux substituants (n'importe lesquels) sur l'atome de C* pour changer sa configuration.



Comment...trouver tous les stéréoisomères d'un composé simple ?

❖ Combien y en a-t-il ?

S'il y a n centres stéréogènes (carbones asymétriques ou liaisons doubles pouvant être Z ou E), **il y a au maximum 2^n stéréoisomères de configuration** (la présence d'éléments de symétrie peut réduire ce nombre).

Attention : une double liaison incluse dans un cycle ne peut pas changer de configuration ! Ce n'est donc pas un centre stéréogène.



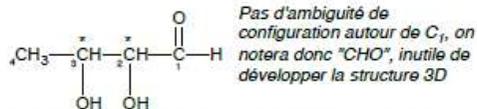
Exemple : La double liaison incluse dans le cycle est Z, elle ne peut pas changer de configuration. Il existe seulement deux stéréoisomères pour cette molécule : celui dessiné (Z, S) et son énantiomère (Z, R).

❖ Comment les trouver ?

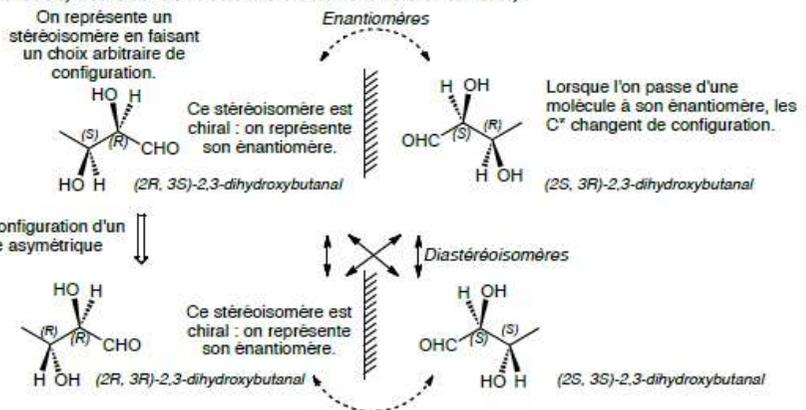
- S'il y n'y a qu'un seul C*, il y aura deux énantiomères : R et S.
- S'il n'y a qu'une seule double liaison pouvant être Z ou E, il y aura deux diastéréoisomères : Z et E.
- S'il y a deux C* et pas de doubles liaisons dont on peut changer la configuration :
 - a) Dessiner un des stéréoisomères.
 - b) S'il est chiral, dessiner son image par un miroir plan : on obtient son énantiomère.
 - c) Changer ensuite la configuration d'un seul C*. On obtient un diastéréoisomère des deux premiers.
 - d) Si cette molécule est chirale, dessiner son image par un miroir plan : on obtient son énantiomère.
- S'il y plus de 2 C*, répéter l'opération en changeant la configuration d'un seul C* à la fois.
- S'il y a une double liaison pouvant être Z ou E : on peut également changer la configuration de cette double liaison et obtenir des stéréoisomères supplémentaires.

Exemple 1 : le 2,3-hydroxybutanal

Formule semi-développée :

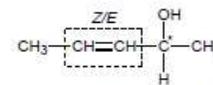


On identifie 2C*, soit 2 centres stéréogènes : il existera donc $2^2=4$ stéréoisomères de configuration au maximum (ici, il n'y a pas d'élément de symétrie donc on s'attend à exactement 4 stéréoisomères).

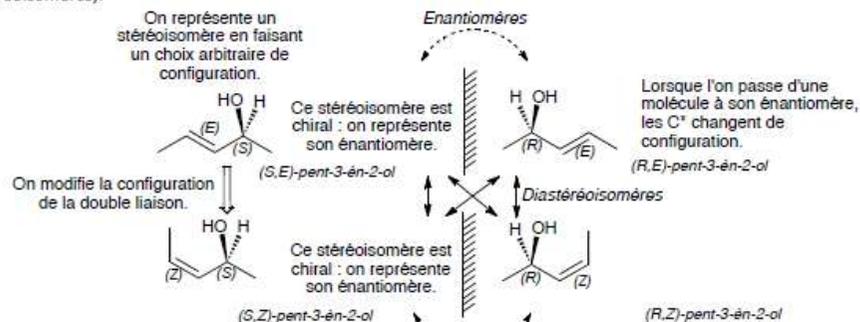


Exemple 2 : le pent-3-èn-2-ol

Formule semi-développée :

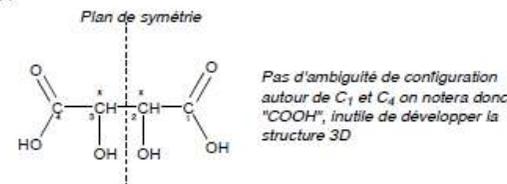


On identifie 1C* et 1double liaison pouvant être Z ou E, soit 2 centres stéréogènes : il existera donc $2^2=4$ stéréoisomères de configuration au maximum (ici, il n'y a pas d'élément de symétrie donc on s'attend à exactement 4 stéréoisomères).

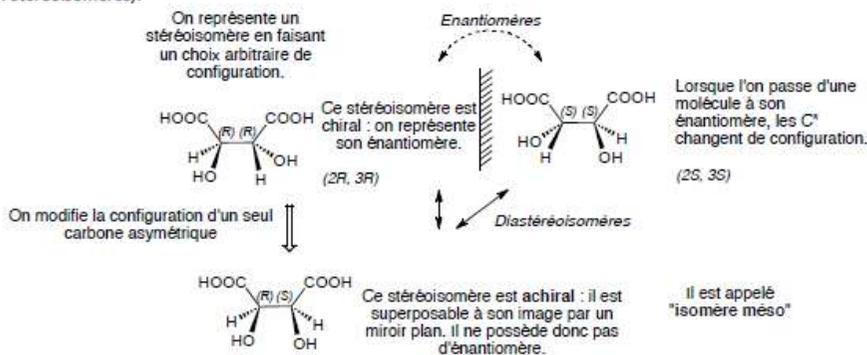


Exemple 3 : acide tartrique (acide 2,3-dihydroxybutan-1,4-dioïque)

Formule semi-développée :



On identifie 2C*, soit 2 centres stéréogènes : il existera donc $2^2 = 4$ stéréoisomères de configuration **au maximum** (ici, les deux carbones asymétriques sont identiquement substitués, il y a une symétrie dans la molécule : il y aura moins de 4 stéréoisomères).



Attention : pour une molécule à 2C* **identiquement substitués**, il n'y aura que 3 stéréoisomères de configuration, car l'un des stéréoisomères (l'**isomère méso**) est **achiral**. Astuce : il s'agira toujours du (R,S)

Définition : on appelle « isomère méso » une molécule **achirale** possédant plusieurs carbones asymétriques.