



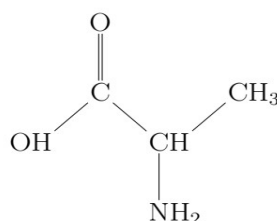
Activité  
expérimentale n°4

Stéréochimie : modèles moléculaires et  
programmation / CORRECTION

## I. Étude de stéréoisomères de configuration

➤ On étudie la molécule d'alanine (acide 2-aminopropanoïque).

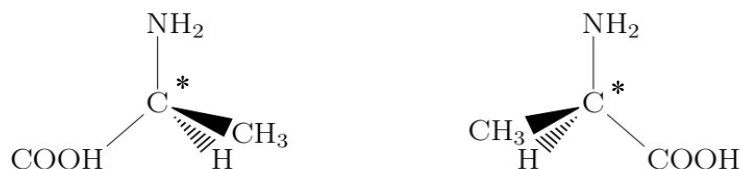
1. Représentation de la molécule en formule semi-développée :



2. Modèles moléculaires

3. Il n'est pas possible de superposer les deux molécules il s'agit bien de stéréoisomères de configuration.

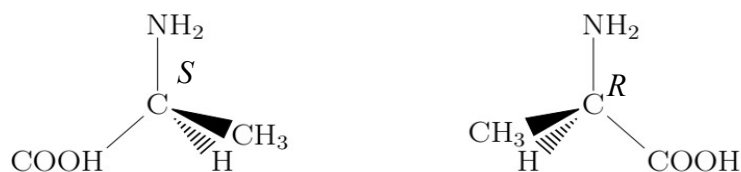
4. Représentation en projection de Cram de ces deux molécules :



5. La molécule d'alanine présente un seul atome de carbone stéréogène (\*), elle est donc chirale.

6. Comme il n'y a qu'un seul atome de carbone stéréogène les deux molécules sont forcément énantiomères.

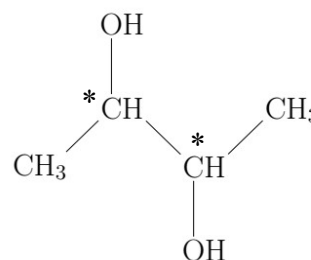
Pour le descripteur stéréochimique  $\text{NH}_2 > \text{COOH} > \text{CH}_3 > \text{H}$



➤ On étudie la molécule de butan-2,3-diol.

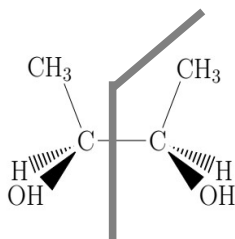
7. Représentation de la molécule en formule semi-développée.

8. La molécule présente 2 centres stéréogènes (\*). Théoriquement elle peut donc posséder  $2^2 = 4$  stéréoisomères de configuration au maximum.



9. Modèles moléculaires des stéréoisomères (2*S*,3*R*)-butan-2,3-diol et (2*R*,3*S*)-butan-2,3-diol. Les deux molécules sont superposables, elles sont identiques.

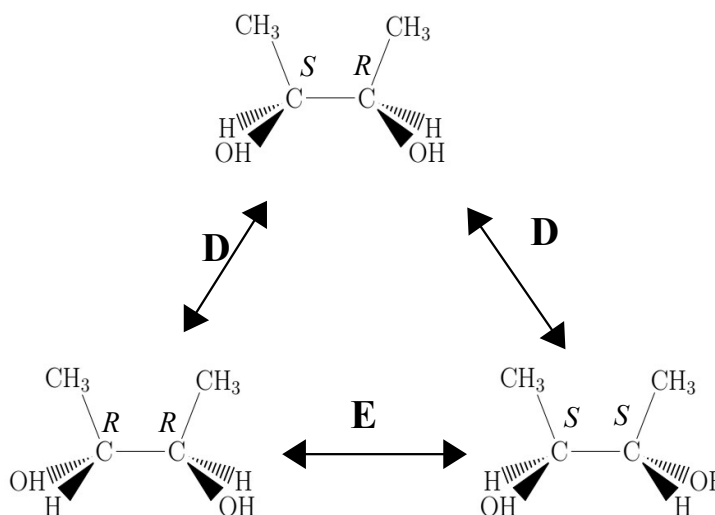
10. Ce composé est un composé méso : il possède 2 atomes de carbone stéréogènes et un plan de symétrie. Il est donc achiral. La molécule de butan-2,3-diol ne possède donc que 3 stéréoisomères de configuration.



11. Les 3 stéréoisomères de configuration :

E = Enantiomères

D = Disatéréosiomères

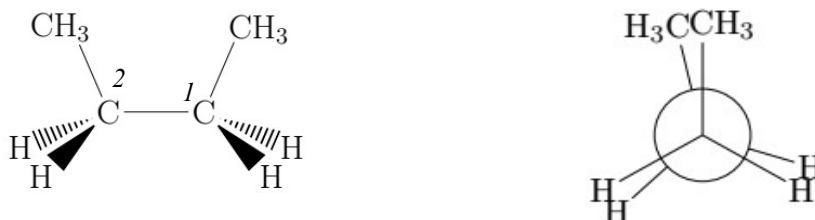


## II. Etude de stéréoisomères de conformation

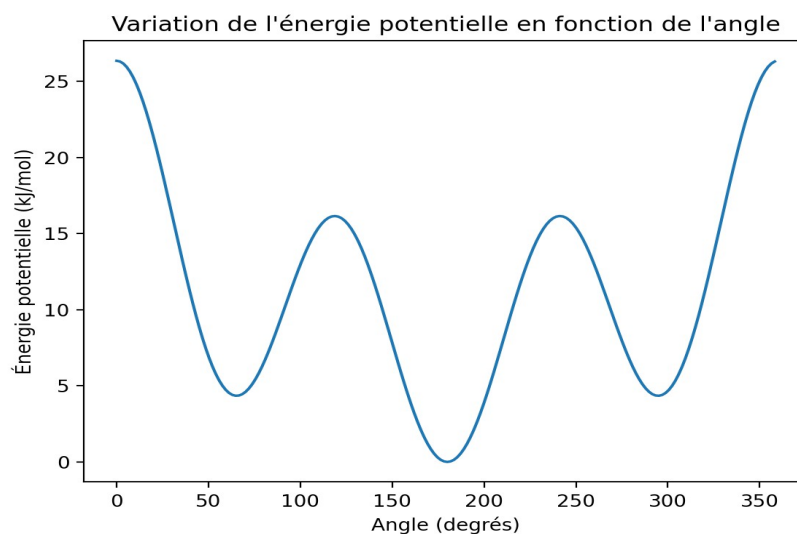
### 1/ Utilisation du programme sur un système connu

Pour vérifier le modèle fourni par le programme python nommée *Conformations*, la première étude porte sur la molécule de butane.

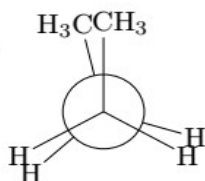
1. Représentation en projection de Newman selon l'axe C2-C1 du butane :



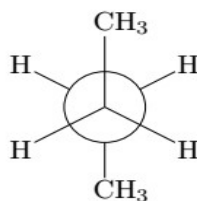
2. Courbe de l'énergie potentielle du butane qui correspond à celui théorique connu avec un maximum d'énergie ( $\Phi = 0^\circ$ ), un minimum ( $\Phi = 180^\circ$ ), deux minima identiques ( $\Phi = 60^\circ$  et  $300^\circ$ ) et deux maxima identiques ( $\Phi = 120^\circ$  et  $240^\circ$ ).



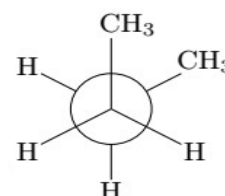
3. Représentation en projection de Newman de :



la conformation de plus haute énergie



la conformation de plus basse énergie

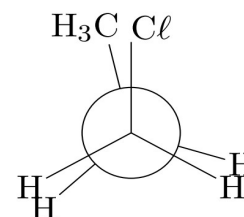


une des conformations décalées mettant en jeu le maximum d'interactions de type « butane gauche

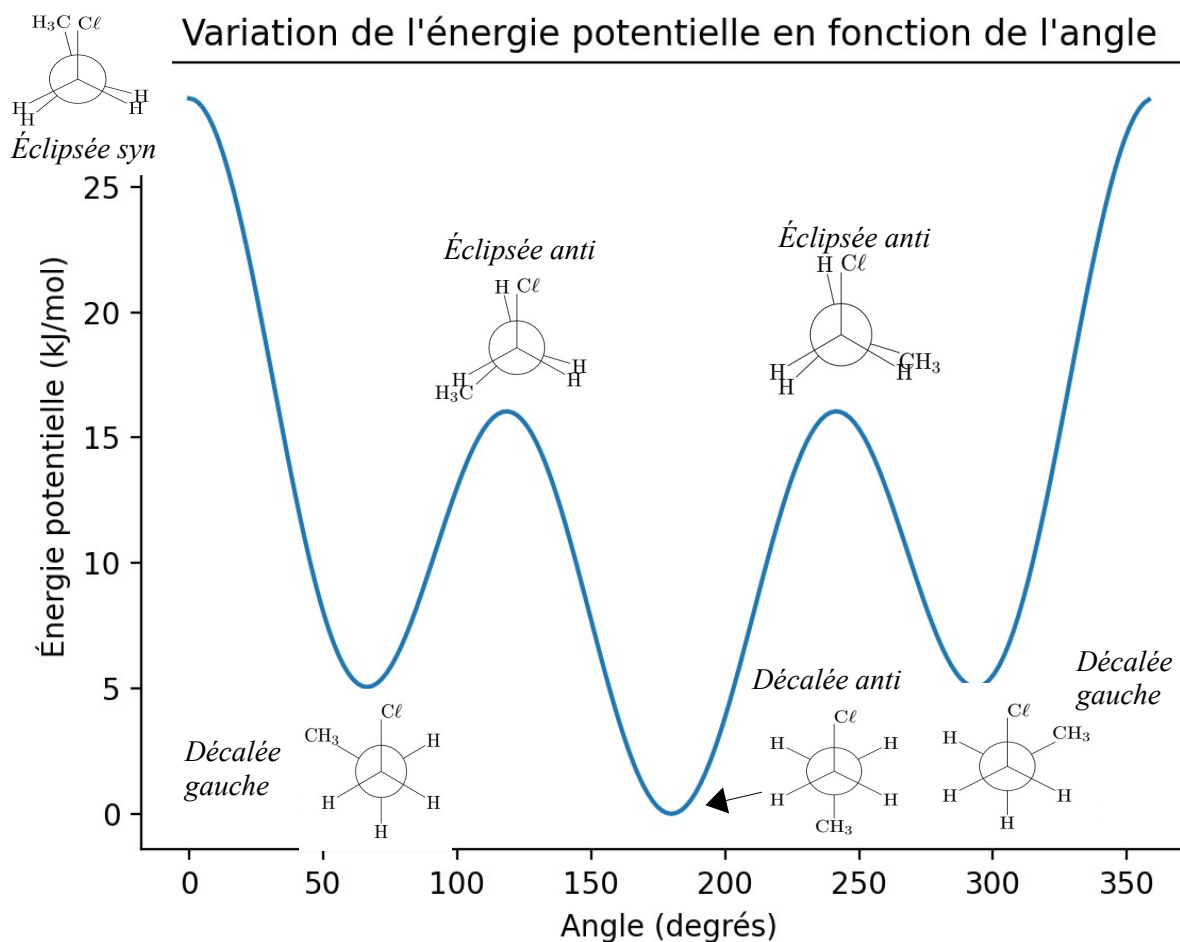
## 2/ Utilisation du programme pour étudier d'autres systèmes

➤ On étudie la molécule de 1-chloropropane.

4. Représentation en projection de Newman de la conformation éclipsée syn de cette molécule.



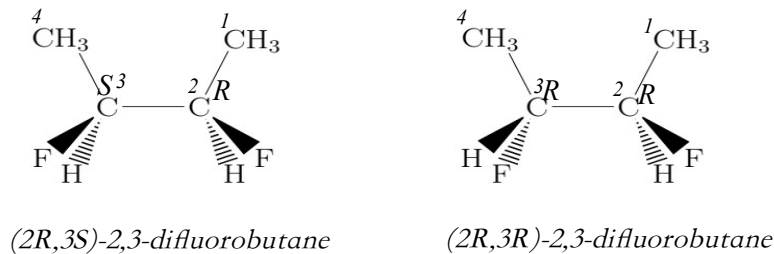
5. Courbe de l'énergie potentielle du 1-chloropropane.



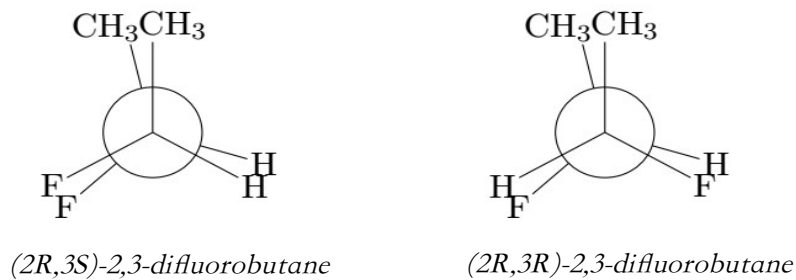
6. On rappelle que plus la conformation correspond à un maximum d'énergie plus cette conformation est instable et inversement. Les conformations éclipsées sont moins stables que les conformations décalées à cause de la répulsion électronique entre les électrons des liaisons plus forte en conformation éclipsée. Par ailleurs la conformation décalée anti est plus stable que les conformations décalées gauche car dans ces deux dernières il y a une interaction de type « butane gauche » déstabilisante entre le  $\text{CH}_3$  et le  $\text{Cl}$ , tous les deux volumineux. Pour finir la conformation éclipsée syn est moins stable que les deux conformations éclipsées anti car dans la conformation syn les deux groupe  $\text{CH}_3$  qui sont très volumineux sont très proches spatialement ce qui génère un important encombrement stérique défavorable.

➤ On étudie la molécule de 2,3-difluorobutane.

7. Ces deux stéréoisomères sont diastéréoisomères car seul le descripteur stéréochimique du carbone 3 est modifié en passant de l'un à l'autre. Ils sont stéréoisomères de configuration non énantiomères car non superposables à leur image dans un miroir.

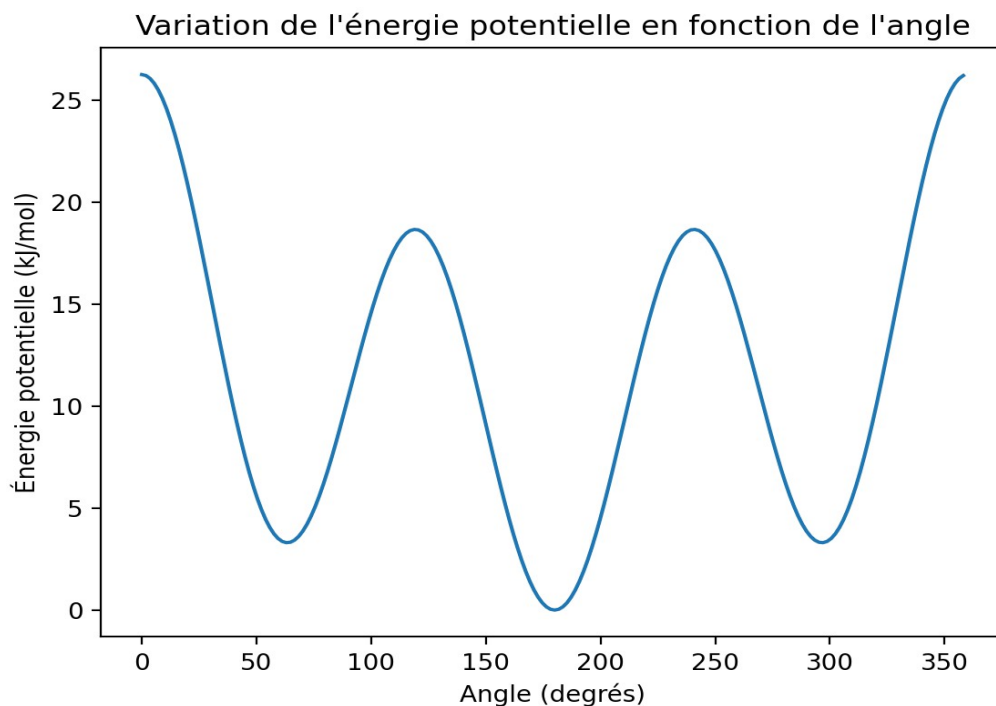


8. Représentation en projection de Newman selon l'axe C3-C2 des stéréoisomères A et B.

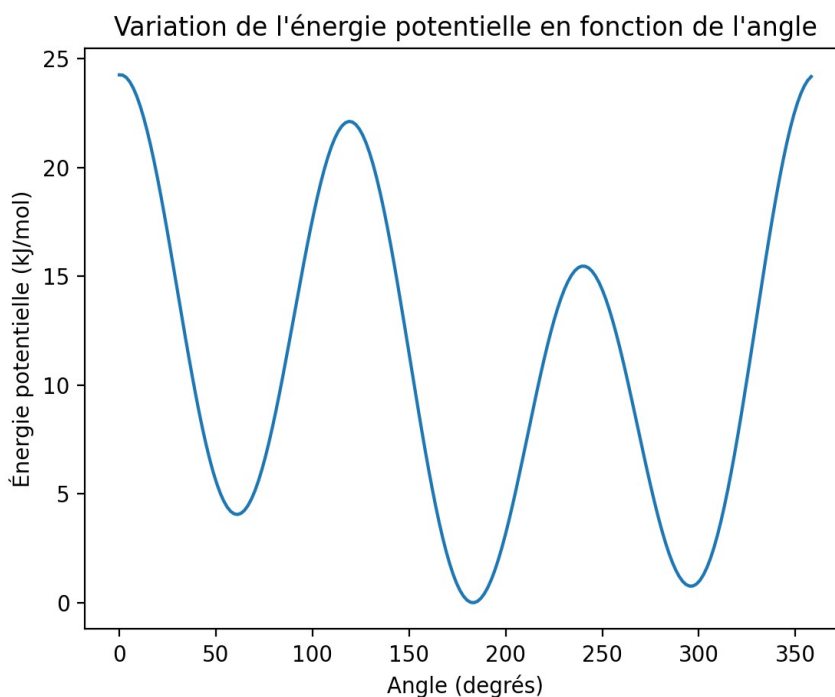


9. Courbe de l'énergie potentielle de chacun des stéréoisomères.

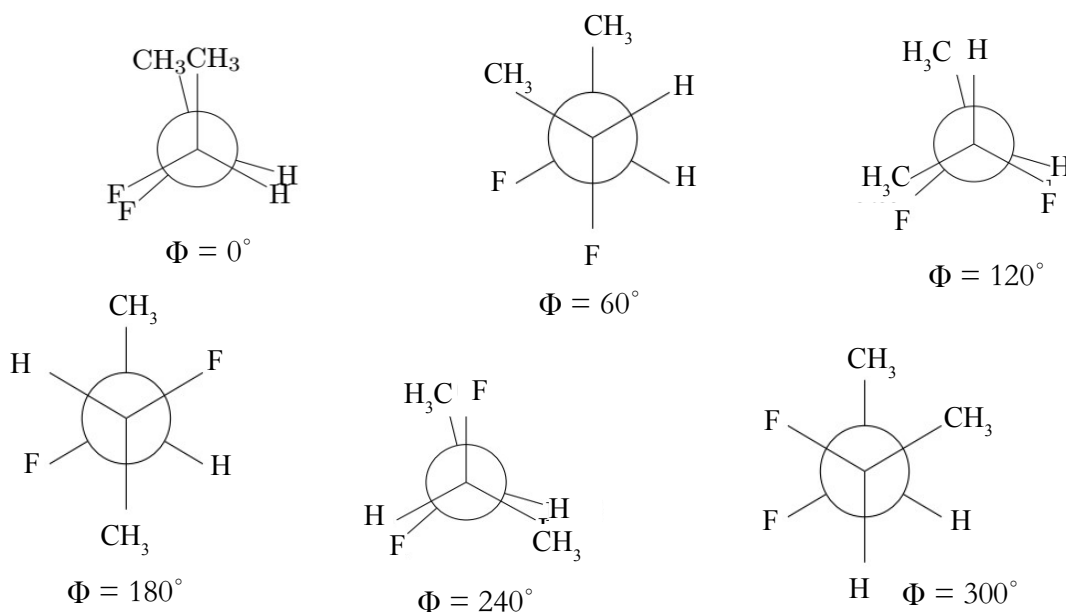
$(2R,3S)$ -2,3-difluorobutane



(2*R*,3*R*)-2,3-difluorobutane



10. La courbe du (2*R*,3*S*)-2,3-difluorobutane ressemble à celle du butane avec une conformation éclipsée syn ( $\Phi = 0^\circ$ ) la plus défavorable, une conformation décalée anti ( $\Phi = 180^\circ$ ) la plus favorable pour les mêmes raisons que celles expliquées à la question 6. Les **deux conformations décalées gauche sont identiques** ( $\Phi = 60^\circ$  et  $300^\circ$ ). Elles présentent 3 interactions de type « butane gauche » : la plus grande entre les 2 groupes  $\text{CH}_3$ , une deuxième plus faible entre  $\text{CH}_3$  et F et une troisième encore plus faible entre deux atomes F. L'interaction impliquant le groupe  $\text{CH}_3$  est la plus déstabilisante car sa répulsion stérique est de  $2.10^{-10}$  m contre  $1,3.10^{-10}$  m pour F. **Les deux conformations éclipsées anti ( $\Phi = 120^\circ$  et  $240^\circ$ ) sont également identiques.**



Le stéréoisomère (2*R*,3*R*)-2,3-difluorobutane ne présente pas une courbe symétrique comme celle du (2*R*,3*S*)-2,3-difluorobutane. La conformation éclipsée syn ( $\Phi = 0^\circ$ ) reste la plus défavorable, et la conformation décalée anti ( $\Phi = 180^\circ$ ) la plus favorable. Par contre il semble que les conformations décalées gauche et éclipsées anti soient différentes en fonction de l'angle dièdre. La conformation décalée gauche à  $\Phi = 60^\circ$  présente 3 interactions de type « butane gauche » : une prédominante entre deux groupes  $\text{CH}_3$  et deux autres plus faibles entre  $\text{CH}_3$  et F alors que la conformation décalée gauche à  $\Phi = 300^\circ$  présente seulement 2 interactions de type « butane gauche » : la prédominante entre deux groupes  $\text{CH}_3$  et une plus faible entre deux atomes F. Par conséquent cette dernière conformation décalée est plus stable, son énergie est donc plus basse que celle à  $\Phi = 60^\circ$ . De même la conformation éclipsée anti à  $\Phi = 120^\circ$  est plus haute en énergie que celle à  $\Phi = 240^\circ$  car plus déstabilisée à cause de deux interactions stériques entre F et  $\text{CH}_3$  que n'a pas la configuration à  $\Phi = 240^\circ$  (seulement des interactions  $\text{CH}_3/\text{H}$  ou F/F).

