

LA STÉRÉOCHIMIE

ET LA REPRÉSENTATION DES MOLÉCULES

L'ÉCRITURE TOPOLOGIQUE //

L'ÉCRITURE SEMI-DÉVELOPPÉE

• Ex : 2-méthylcyclopentan-1-ol

• **En écriture semi-développée**

En écriture topologique

- **Avantages** : plus rapide à écrire, clarté de la représentation
- **Inconvénients** : on n'a plus la totalité des atomes et on peut écrire rapidement de grosses bêtises !

REPRÉSENTATION DANS L'ESPACE

- Représentation de **CRAM**

- Représentation de **NEWMAN**

**DÉFINITION : 2 MOLÉCULES
ISOMÈRES ONT....**

2 ISOMÈRES DE POSITION ONT...

2 ISOMÈRES DE FONCTION ONT...

2 ISOMÈRES DE CONSTITUTION ONT...

2 STÉRÉOISOMÈRES ONT...

DEFINITION STÉRÉOISOMÈRES

- Les **stéréoisomères de configuration** appelés par abus de langage «**stéréoisomères**»
- Les **stéréoisomères de conformation** appelés **conformères**



ETUDE DE LA CONFORMATION DES MOLÉCULES

ANGLE DIÈDRE ET LE RAYON DE VAN DER WAALS DES GROUPEMENTS

CONFORMATION DÉCALÉE ET ÉCLIPSÉE

ANALYSE CONFORMATIONNELLE

A thick, yellow, wavy line graphic that starts at the top left and curves downwards and to the right, ending near the bottom left. It has a white outline and is set against a dark brown background.

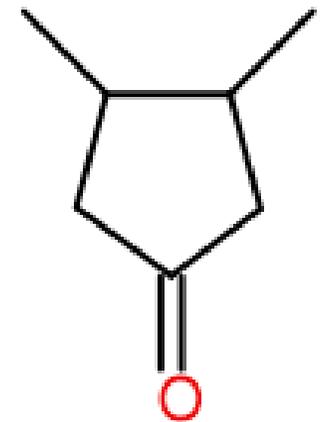
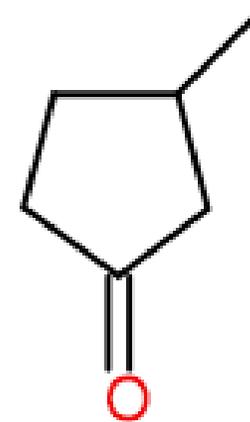
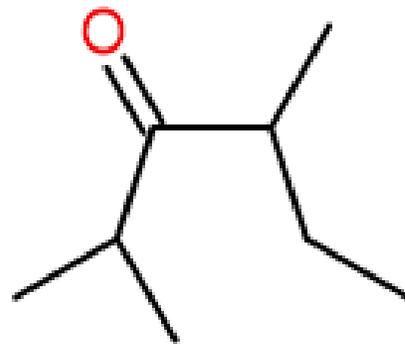
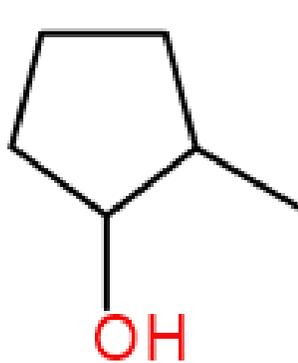
ETUDE DE LA CONFIGURATION DES MOLÉCULES

2 ÉNANTIOMÈRES SONT...

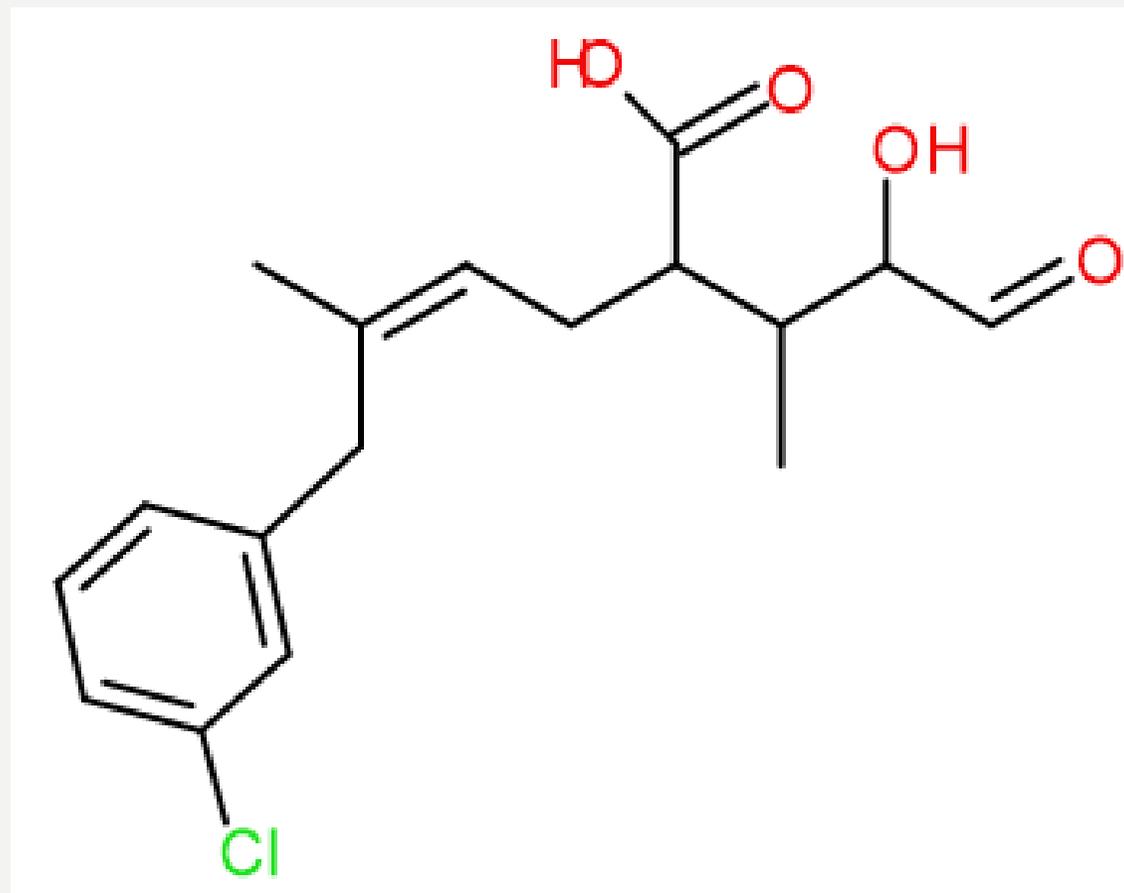
2 DIASTÉRÉOSIOMÈRES SONT...

ET UNE MOLÉCULE CHIRALE EST...

LE CARBONE ASYMÉTRIQUE : COMMENT LES TROUVER SUR UNE REPRÉSENTATION TOPOLOGIQUE ?



ET SUR UNE MOLÉCULE PLUS... GROSSE ??



**PEUT-ON AVOIR DES
DIASTÉRÉOISOMÈRES SANS
CARBONE ASYMÉTRIQUE ?**

**COMBIEN DE STÉRÉOISOMÈRES
POSSIBLES EN FONCTION DU NOMBRE DE
C* ET DU NOMBRE DE LIAISON DOUBLE ?**

**2 MOLÉCULES DIASTÉRÉOISOMÈRES
SONT-ELLES FORCÉMENT CHIRALES ?**

PROPRIÉTÉS DES ÉNANTIOMÈRES

- **2 énantiomères ont les mêmes propriétés physiques** (température de changement d'état, solubilité...) mais **elles n'ont pas toujours les mêmes propriétés chimiques et elles ont des propriétés biologiques différentes** car elles interagissent différemment avec d'autres molécules chirales.
- **Seule l'activité optique différencie deux énantiomères.**

PROPRIÉTÉS DES DIASTÉRÉOISOMÈRES

- **Toutes leurs propriétés physiques sont différentes, activité optique comprise.**



COMMENT IDENTIFIER UN STÉRÉOISOMÈRE C₁

**IL NOUS FAUT IDENTIFIER LA POSITION
DES LIAISONS DANS L'ESPACE D'UN
CARBONE ASYMÉTRIQUE OU D'UNE
DOUBLE LIAISON :**

↔ IDENTIFIER SA CONFIGURATION.

LES RÈGLES DE **CAHN INGOLD PRELOG**

- 4 substituants différents appelés a, b, c et d : atomes ou groupement d'atomes
- **On définit des priorités pour a, b, c et d.**
-
- On prend ici : **a>b>c>d** ↔(a prioritaire devant b...)
- **priorité donnée par le numéro atomique Z de l'atome lié .**
- Ici $Z(a) > Z(b) > Z(c) > Z(d)$
- S'il y a **deux atomes liés identiques**, alors on regarde le **numéro atomique le plus grand parmi les atomes de deuxième rang**. On continue ainsi jusqu'à trouver une différence.
- Classification particulière de quelques groupements :
- Un doublet libre a une priorité zéro ;
- Pour deux isotopes, celui qui a le A le plus grand est prioritaire ;
- L'alcène E sera prioritaire sur l'alcène Z.
- On arrive ainsi à une classification $a > b > c > d$ quelque soient les groupements d'atomes portés.

CONFIGURATION ABSOLUE D'UN C*

- On regarde **TOUJOURS** du **carbone asymétrique noté C* vers d**, le substituant de moindre priorité.
- On regarde **le sens de rotation en tournant de a vers b vers c.**
- **Configuration R**

Configuration S

REGLES CIP POUR UNE LIAISON DOUBLE

- Pour chaque carbone, C_a et C_b , on affecte des **priorités N°1 et N°2** aux substituants en fonction **du numéro atomique de l'atome lié** puis des atomes des rangs suivants jusqu'à établir une différence.
-
- Si les deux groupements prioritaires N°1 des deux carbones C_a et C_b sont **du même côté de l'alcène**, alors l'alcène est dit **Z**.
- Si les deux groupements prioritaires N°1 des deux carbones C_a et C_b sont sur **les côtés opposés de l'alcène**, alors l'alcène est dit **E**.

