Enseigner « l'analyse conformationnelle » en premier cycle ? *

par Alain Dumon

*(GREDIC et ** Groupe de Recherche en Didactique de la Chimie, Université de Pau, Faculté des Sciences, Avenue Philippon, 64000 Pau.)*

Avant-propos

Cet article, comme celui qui est paru en octobre 1979 sur l'introduction à l'étude des orbitales atomiques (1), est destiné, comme la note de bas de page l'indique, à présenter un multimédia et non un article sur le contenu d'un enseignement sur l'analyse conformationnelle. C'est une analyse détaillée, sur un exemple précis, d'une méthode pédagogique dont les principes ont été développés par M. Gomel dans L'actualité chimique *(2).*

Nous espérons que cette publication pourra développer la réflexion pédagogique, et faciliter l'évaluation des différents documents.

(1) N. Lumbroso-Bader, Jolivet, Cabrol, L'actualité chimique *1979,* **8** *(octobre), 40.*
(2) M. Gomel, L'actualité chimique, *1980,* **2** *(février), 44.*

R. Viovy.
Président de la Division Enseignement de la chimie de la SCF.

Lors de la présentation de notre document à l'occasion des diverses rencontres RECODIC, certains enseignants nous ont fait part de leur scepticisme sur l'utilité d'aborder de telles notions au niveau du premier cycle universitaire. Il nous semble pourtant qu'en fixant des objectifs limités et en se donnant les moyens d'atteindre ces objectifs, il est possible et même souhaitable de compléter les cours de stéréochimie, généralement dispensés à ce niveau, par un tel enseignement (durée prévue pour le thème : 5 h.) dont l'une des finalités est de contribuer à l'interprétation de la réactivité des composés.

De très nombreuses illustrations (en particulier 48 diapositives en couleurs) se sont avérées utiles à l'enseignement du thème de stéréochimie envisagé ici. Nous renonçons cependant à les reporter dans le cadre de cet article car l'impression « noir et blanc » en trahirait la qualité des graphismes et des couleurs.

** Cet article présente le Multimédia « Analyse conformationnelle » (48 fiches, 48 diapositives, 22 transparents, 1 cassette) réalisé par A. Dumon, F. Metras, A. Lichanot, P. Iratcabal (Université de Pau), avec la collaboration de J. Monteau (Université de Poitiers), et qui est actuellement diffusé par le CUDNME (Université de Poitiers, Faculté des Sciences, 40 avenue du Recteur Pineau, 86022 Poitiers Cedex).*
*** Le GREDIC de l'Université de Pau est l'un des groupes rattachés au Laboratoire Interuniversitaire de Recherche en Didactique de la Chimie (LIRDIC).*

1. Objectifs

A la fin de l'étude de ce thème l'étudiant doit être capable :
1.1. de différencier dans une série de représentations schématiques de composés simples les isomères de configuration et les isomères de conformation et de trouver, pour un composé simple, les différents conformères les plus caractéristiques, puis de les représenter en projection de Newman ;
1.2. d'indiquer quels sont les isomères de conformation d'un même composé qui ont le plus de chance d'exister à partir de considérations énergétiques ;
1.3. de déterminer à partir de la connaissance de la constante de l'équilibre conformationnel la population des différents conformères à l'équilibre et inversement de déterminer la constante et les grandeurs thermodynamiques relatives à l'équilibre à partir de la connaissance des populations des conformères (obtenue à l'aide de méthodes physicochimiques).
1.4. d'interpréter les propriétés chimiques d'un composé en fonction des propriétés chimiques de ses conformères privilégiés.

Ces objectifs exigent que l'étudiant ait acquis, au préalable, des notions de :
- stéréochimie élémentaire ;
- thermodynamique élémentaire ;
- cinétique élémentaire ;
- moment dipolaire.

Pour ces raisons le multimédia « Analyse conformationnelle » ne pourra être utilisé qu'après que ces notions aient été exposées (2e année de premier cycle de préférence).

Par l'intermédiaire de ce thème on pourra également atteindre deux objectifs secondaires :

1.5. les notions élémentaires de stéréochimie, thermodynamique et cinétique, qui sont pré-requises, ont généralement été étudiées au préalable sous forme de « chapitres » séparés entre eux. On constatera alors que l'étude de l'analyse conformationnelle qui est proposée ci-dessous peut présenter l'intérêt de relier sur ce thème, « stéréochimie et thermodynamique » (modules 2 et 3), et « stéréochimie et cinétique » (module 4).

1.6. un certain nombre d'exemples choisis pour servir de support à l'étude des concepts envisagés ont été l'objet d'études physico-chimiques relativement récentes (par exemple influence du solvant sur l'équilibre conformationnel) *. Ce point, s'il est signalé aux étudiants, nous paraît être l'une des formes concrètes susceptibles de lier avantageusement, dès le niveau du 1er cycle, enseignement et recherche.

2. Comment atteindre ces objectifs ?

L'étude du thème a été découpée en 4 modules correspondants aux 4 objectifs à atteindre. Pour chaque module l'enseignant dispose :

- **de fiches,** notées dans ce qui suit, fiches (A) et fiches (B) :

(A) à caractère axiomatique, contenant l'essentiel des notions à communiquer à l'étudiant ;

(B) d'application, destinées à aider l'étudiant dans l'approfondissement des notions de base et à le conduire à la découverte de notions nouvelles.

Les fiches (B) sont systématiquement accompagnées des corrigés (donnés in extenso) qui peuvent permettre de susciter l'autonomie intellectuelle de l'étudiant en l'orientant progressivement vers des situations « d'auto-enseignement ».

- **d'auxiliaires didactiques**

En effet, l'une des principales difficultés rencontrées par les étudiants dans un tel enseignement, comme d'ailleurs dans le cas des enseignements de stéréochimie et de structure cristalline, consiste en la « visualisation » dans l'espace de représentations à deux dimensions au tableau. Nous avons donc réalisé des auxiliaires pédagogiques, transparents et diapositives, dont l'utilisation, combinée avec la manipulation par les étudiants de modèles moléculaires, permet de résoudre bien des problèmes d'interprétation.

3. Description des modules

Le module 1 assure essentiellement un premier approfondissement des notions antérieures de stéréochimie des conformations. Le module 2 permet un second niveau d'approfondissement et commence à assurer la liaison de ces notions aux notions élémentaires de thermodynamiques acquises par ailleurs.

Les modules 3 et 4 peuvent éventuellement être considérés comme « facultatifs » dans une telle structure modulaire ; ils assurent en effet la liaison plus profonde entre stéréochimie et thermodynamique et cinétique déjà évoquée ci-dessus.

Module 1 : notion de conformation

(A) *. La suite infinie de structures engendrées par rotation d'atomes ou groupes d'atomes autour de liaisons simples et l'existence de conformations particulières sont mises en évidence grâce aux exemples de l'éthane et du bromo-1, chloro-2, éthane (1 fiche, 1 transparent, 4 diapositives).

Le cas de la conformation des composés cycliques est ensuite abordé avec l'exemple du cyclohexane : sont introduites les notions de formes chaise et bateau, de positions axiales et équatoriales (1 fiche, 1 transparent, 5 diapositives).

(B). Parmi une série de composés représentés en projective, projection de Newman, perspective, représentation de Fisher, l'étudiant doit distinguer les isomères de configuration et les conformères (3 fiches, 3 transparents). De plus, l'étude de la tribromo-2,3,6 cyclohexanone conduit à distinguer les atomes en positions axiales et équatoriales (1 fiche, 1 transparent, 4 diapositives).

Module 2 : stabilité des conformères

(A). Les notions d'angle dièdre et de variation de l'énergie d'une molécule en fonction de cet angle dièdre sont introduites avec l'exemple de l'éthane (2 fiches, 1 transparent, 4 diapositives).

L'étude du cyclohexane permet de mettre en évidence deux conformations chaises énergétiquement équivalentes et une conformation bateau d'énergie supérieure **. Une représentation simplifiée de la courbe de variation de l'énergie de la molécule lors de l'interconversion entre les 2 formes chaises est donnée (2 fiches, 2 transparents, 3 diapositives).

(B). Après avoir travaillé la notion d'angle dièdre (θ) sur le dibromo-2,3 butane et le dichloro-1,2 éthane, l'étudiant doit donner l'allure de la courbe de variation $E = f(\theta)$ pour le deuxième composé et situer sur une courbe $E = f(\theta)$ les conformères du bromo-2, méthyl-4 cyclohexane.

Les notions d'encombrement stérique, d'interactions substituant (s)-substituant(s) et substituant(s)-cycle sont découvertes lors de ces exercices (4 fiches, 6 transparents, 5 diapositives).

Module 3 : équilibre conformationnel

(A). L'introduction aux équilibres conformationnels s'effectue rapidement avec l'exemple du cyclohexane (1 fiche).

(B). Une approche détaillée du problème est effectuée à partir de l'étude thermodynamique « théorique » de l'équilibre conformationnel forme gauche ⇄ forme *trans* du dichloroéthane et est complétée par une étude expérimentale basée sur la mesure du moment dipolaire. l'étudiant est alors amené à découvrir l'influence de la température et du solvant sur la constante d'équilibre (3 fiches, 2 transparents, 10 diapositives).

Le cas de l'équilibre en solution entre les isomères axial et équatorial de la chloro-2, cyclohexanone complète cette étude et permet d'introduire la notion de « formes bloquées », formes qui permettent l'obtention des grandeurs physico-chimiques des formes limites (2 fiches, 1 transparent).

Module 4 : conformation et réactivité

(A). L'influence de la conformation sur la réactivité est introduite à partir de l'analyse des vitesses de réaction appliquée à la transformation cyclohexanol ⇄ cyclohexanone.

Les constantes de vitesses ka et ke sont obtenues grâce aux « formes bloquées » (2 fiches, 2 transparents, 1 diapositive).

(B). Après avoir démontré la relation $k = x_a ka + x_e ke$, l'étude de la cinétique de la réaction de saponification du cyclohexane carboxylate d'éthyle est effectuée (3 fiches, 2 transparents).

4. Le document « analyse conformationnelle » a-t-il été testé ?

Ce document résulte déjà d'un travail collectif réalisé par des enseignants chercheurs (voir liste des auteurs au début de cet article) dont plusieurs travaillent sur le thème de recherche : conformation et réactivité. Ils ont été testé dans l'Université où ils ont été créés avant d'être communiqués aux réunions du réseau des Recherches Coopératives en Didactique de la Chimie (RECODIC) où ils ont été l'objet d'une série de critiques et suggestions *. Ces suggestions ont permis l'élaboration d'une version destinée à la diffusion, dont les éléments ont été réalisés en collaboration avec le CUDNME.

Actuellement des collègues appartenant à 16 universités ont commandé, et utilisé, ce Multimédia.

* *Les auteurs remercient notamment Mme Berçot (Université de Perpignan), Melle Germa (Université Paul Sabatier de Toulouse), M. Gomel (Université de Poitiers), M. Ourisson (Université Louis Pasteur de Strasbourg).*

* *Étude de cyclohexanones halogénées en α et αα' : attribution des fréquences de vibration et problèmes d'isomérie. J. Petrissans, Thèse d'État, Pau, 1968.*

* *Ces notations indiquent la nature des fiches concernées.*

** *L'existence des formes « croisées » est mentionnée.*