

Conformères d'alcane linéaires : statistiques et entropie conformationnelle

Énoncé :

Une chaîne polymère synthétisée à partir d'éthylène, ou un alcane linéaire sont constitués d'une chaîne hydrocarbonée aliphatique linéaire composée de N atomes de carbone.

Toutes les paires de liaisons successives forment le même angle, et tous les triplets de liaisons successifs sont caractérisés par un angle de torsion de 180° (anti), 60° (gauche +) ou -60° (gauche -). Dans le cas du butane, on observe donc trois isomères de conformation, justifiables sur base de schémas ainsi que d'une courbe calculée d'énergie potentielle :

1. Schématiser les trois isomères de conformation du Butane
2. Représenter la courbe d'énergie potentielle en fonction de l'angle de torsion
3. Sans rejeter a priori les conformères pour lesquels on observerait des superpositions d'atomes, combien de conformères existe-t-il pour le n-pentane ? Proposer une façon de lister et catégoriser leur ensemble. En particulier, comment partitionner ces conformations suivant les valeurs d'énergie et suivant les caractéristiques mécaniques (moments d'inertie) ?
4. Même question pour l'hexane
5. Combien de conformères existe-t-il pour l'alcane composés de N carbones ? Que peut-on en déduire comme valeur d'entropie conformationnelle ?
6. A très basse et à très haute température, que peut-on conclure quant à la forme globale adoptée par les alcanes de hautes masses moléculaires ? Que peut-on en déduire en ce qui concerne l'entropie conformationnelle à basse et à haute température ?

Résolution

From:

<https://dvillers.umons.ac.be/wiki/> - **Didier Villers, UMONS - wiki**

Permanent link:

https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:exos:conformeres_alcanes_lineaires

Last update: **2012/02/02 16:08**

