

# Contrôle cinétique et contrôle thermodynamique

## Application à la chimie organique

### I Enoncé des lois de contrôle

- 1 Position du problème
- 2 Aspect théorique
  - a 1<sup>er</sup> cas : équilibres non atteints
  - b 2<sup>ème</sup> cas : équilibres atteints
- 3 Influences du temps et de la température
- 4 Conclusion

### II Rationalisation du produit obtenu sous contrôle cinétique

- 1 Prévission de la réactivité chimique
  - a Divers facteurs
  - b Raisonnement à tenir
- 2 Exemples
  - a Raisonnement sur les réactifs (ET précoce)
    - i Interactions stériques
    - ii Interactions électrostatiques
    - iii Interactions orbitales
  - b Raisonnement sur l'IR (ET tardif)
- 3 Stratégie de synthèse (C/O alkylation)
  - a Effet de solvant
  - b Effet de cation
  - c Effet de groupe partant

### III Utilisation du contrôle thermodynamique en chimie organique

- 1 Pour le déplacement d'équilibre
- 2 Pour l'obtention sélective d'un produit
- 3 Obtention du produit le plus stable... sous contrôle cinétique

### IV Compétition entre contrôle cinétique et contrôle thermodynamique : stratégie de synthèse

- 1 Exemple
- 2 Stratégie de synthèse
  - a Influence du temps de réaction
  - b Influence de la température
  - c Influence des réactifs
  - d Influence du mode opératoire

**Bibliographie :**

- Chimie organique*, A. Durupthy et al., Hachette supérieur, **1997**  
*Chimie organique avancée vol.1 et 2*, Carey-Sundberg, DeBoeck université, **1997**  
*Contrôle cinétique et contrôle thermodynamique des réactions*, C. Agami, **BUP 678 p229**  
*Understanding product optimisation*, K.C. Lin, *J. Chem. Educ.* , 66, 10, **1988**, 857  
*Chimie organique*, B. Mercier-James, Bréal, **1998**  
*Effets du milieu en synthèse organique*, A. Loupy A. Haudrechy, Masson,**1996**  
*Orbitales frontières : manuel pratique*, N.T. Anh, **1995**  
*Manipulations commentées de chimie organique*, J. Drouin, DeBoeck Université, **1999**  
*Mécanismes réactionnels en chimie organique*, R. Brückner, DeBoeck Université, **1999**  
*Physical Organic Chemistry*, N. S. Isaacs, Longman Scientific & Technical, **1995**