

Cours N°1 /3

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^{er} cas : équilibres non atteints
 - b 2^{ème} cas : équilibres atteints
- 3 Influences du temps et de la température
- 4 Conclusion

II Rationalisation du produit obtenu sous contrôle cinétique

- 1 Préviation 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

Cours N°2 /3

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^{er} cas : équilibres non atteints
 - b 2^{ème} 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

Cours N°3 /3

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^{er} cas : équilibres non atteints
 - b 2^{ème} 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**