

Réactions péricycliques



Niveau d'étude
BAC +4



Composante
École Nationale
Supérieure des
Ingénieurs en
Arts Chimiques



Volume horaire
16h

En bref

> **Code:** LP196YTS

> **Ouvert aux étudiants en échange:** Oui

Présentation

Objectifs

- Identifier et de caractériser une réaction péricyclique dans la synthèse de molécules organiques complexes.
- Utiliser les règles généralisées de Woodward-Hoffmann et le modèle de Fukui pour déterminer le caractère permis/interdit et le produit d'une réaction péricyclique.
- Utiliser la simulation moléculaire pour analyser une réaction péricyclique (Spartan Student v9).

Pré-requis obligatoires

- Réactivité organique I et II
- Simulation moléculaire
- Liaison chimique et modélisation

Syllabus

- Présentation des cinq grandes classes de réactions péricycliques
- Caractérisation des processus électroniques (Woodward-Hoffmann)
- Introduction des modèles théoriques :
 - i. Rappels de chimie théorique (Hückel).

- ii. Les règles de Woodward-Hoffmann (conservation de la symétrie)
- iii. Le modèle perturbatif des orbitales moléculaires frontalières (Fukui)
- Applications :
 - i. Les réactions de Diels-Alder
 - ii. Les transpositions sigmatropiques
 - iii. Les électrocyclisations

Informations complémentaires

Enseignement hybride

- En présentiel
 - i. Cours magistral : discussion des points critiques non compris de la séance précédente.
 - ii. Travail en groupe accompagné par l'enseignant : lecture et compréhension du cours à l'aide d'exercices.
- En autonomie
 - i. Auto-évaluations individuelles sur Moodle.
 - ii. Exercices de cours en groupe.

Évaluation

- L'évaluation de 1^{ère} session :
 - i. Les exercices de cours en groupe (20%).
 - ii. Une épreuve écrite *sans document* (80%).
 - iii. Un bonus de 5% sur la note finale, si la note d'examen la plus basse du groupe est supérieure à 10/20.
- L'évaluation de 2^{ème} session : une *unique épreuve écrite sans document* (100%).

Bibliographie

En français

- Carey, F. A., Sundberg, R. J. Chimie Organique Avancée : Tome 1. Structures moléculaires et mécanismes réactionnels. Belgique : De Boeck Université, 1996. 840 p. ISBN 2-8041-2295-6.
- Carey, F. A., Sundberg, R. J. Chimie organique avancée. Tome 2. Réactions et synthèses. Belgique : De Boeck Université, 1997. 832 p. ISBN 2-8041-2349-9.
- Le Floch, P. Introduction à la chimie moléculaire par la théorie des orbitales frontières. France : Centre Poly-Média de l'Ecole Polytechnique, 2006. 259 p. ISBN 2-7302-1334-1.

En anglais

- Lowry, T. H., Schueller Richardson, K. Mechanism and Theory in Organic Chemistry, 1987. 1090 p. ISBN 0-06-044084-8.
- Anslyn, E. V., Dougherty D. A. Modern Physical Organic Chemistry. United States of America: University Science Books, 2006. 1099 p. ISBN 978-1-891389-31-3.