

# **CQ3 – Orbitales moléculaires et réactivité**

## **1. Contrôle des réactions : rappels**

***1.1. Contrôle thermodynamique***

***1.2. Contrôle cinétique***

***1.3. Quelques profils de réaction***

## **2. Contrôle orbitalaire**

***2.1. Définition***

***2.2. Approximation des orbitales frontalières***

***2.3. Règles de réactivité***

***2.4. Électrophilie & nucléophilie***

## **3. Exemples de réactions sous contrôle orbitalaire**

***3.1. Substitution nucléophile***

***3.2. Addition nucléophile***

***3.3. Réaction de Diels-Alder***

3.3.1. Notion de cycloaddition – considérations expérimentales

3.3.2. Mécanisme et interprétation orbitalaire

3.3.3. Stéréosélectivité

3.3.4. Régiosélectivité

Orbitale BV de  $\text{CH}_3\text{-Cl}$  (calcul Jimp2) :

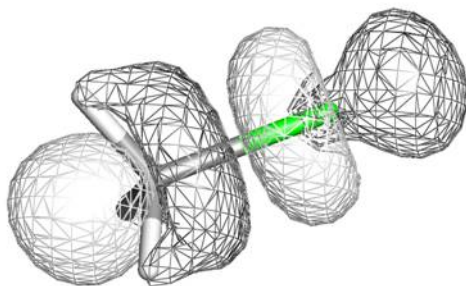
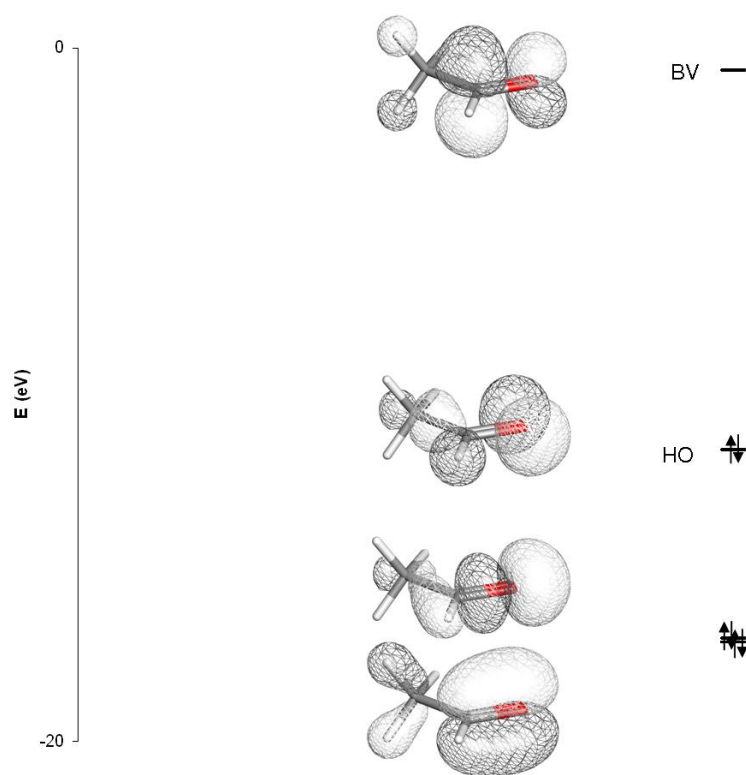
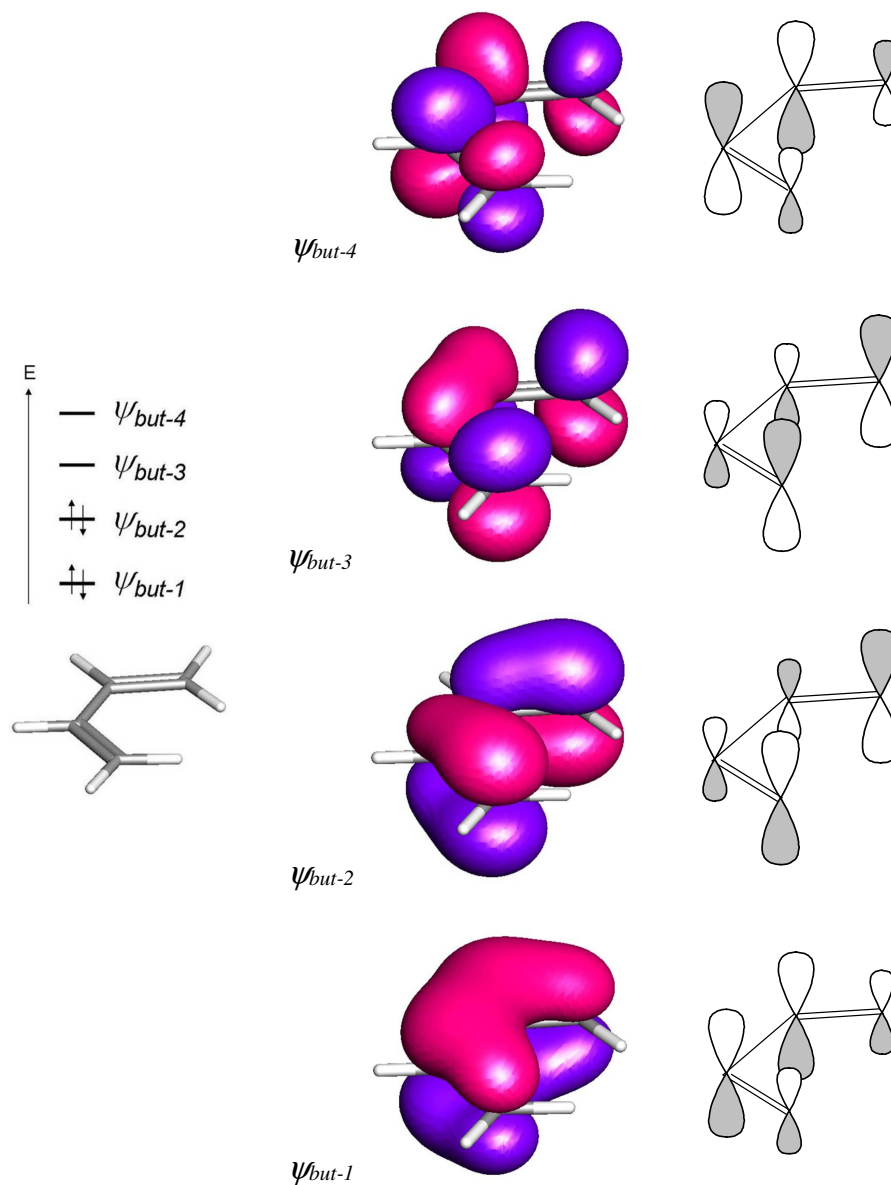
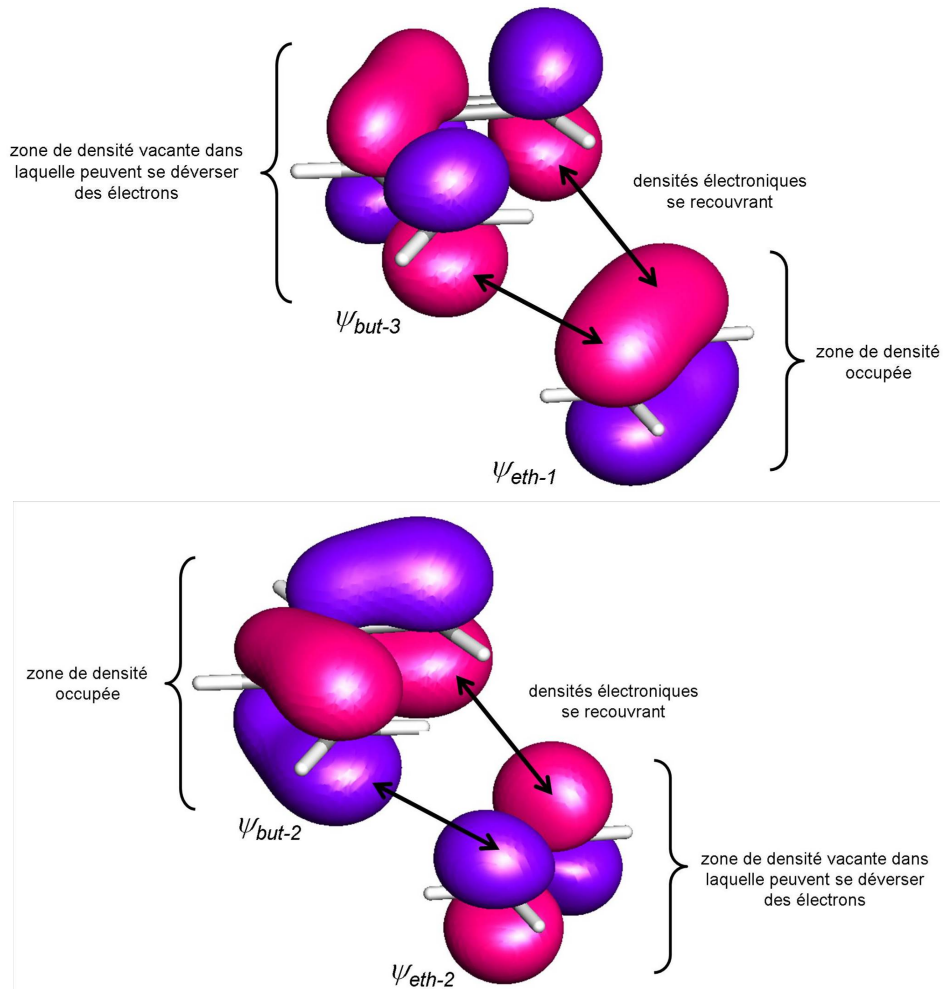


Diagramme d'OM de l'éthanal au voisinage des orbitales frontalières (calcul Jimp2) :

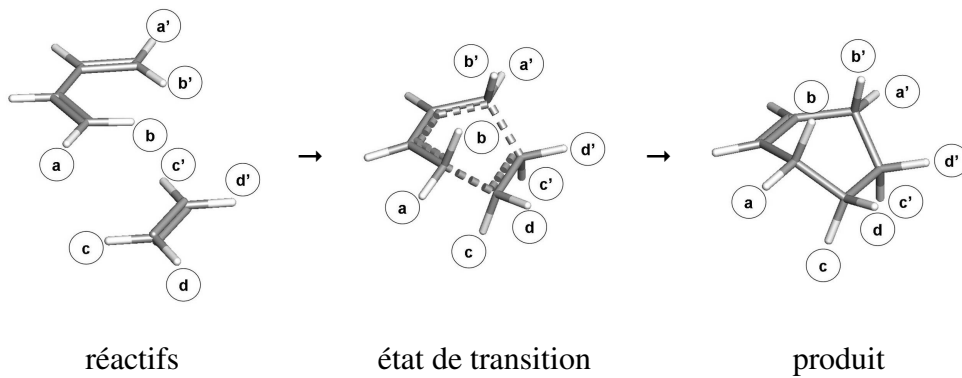


Orbitales moléculaires du butadiène :

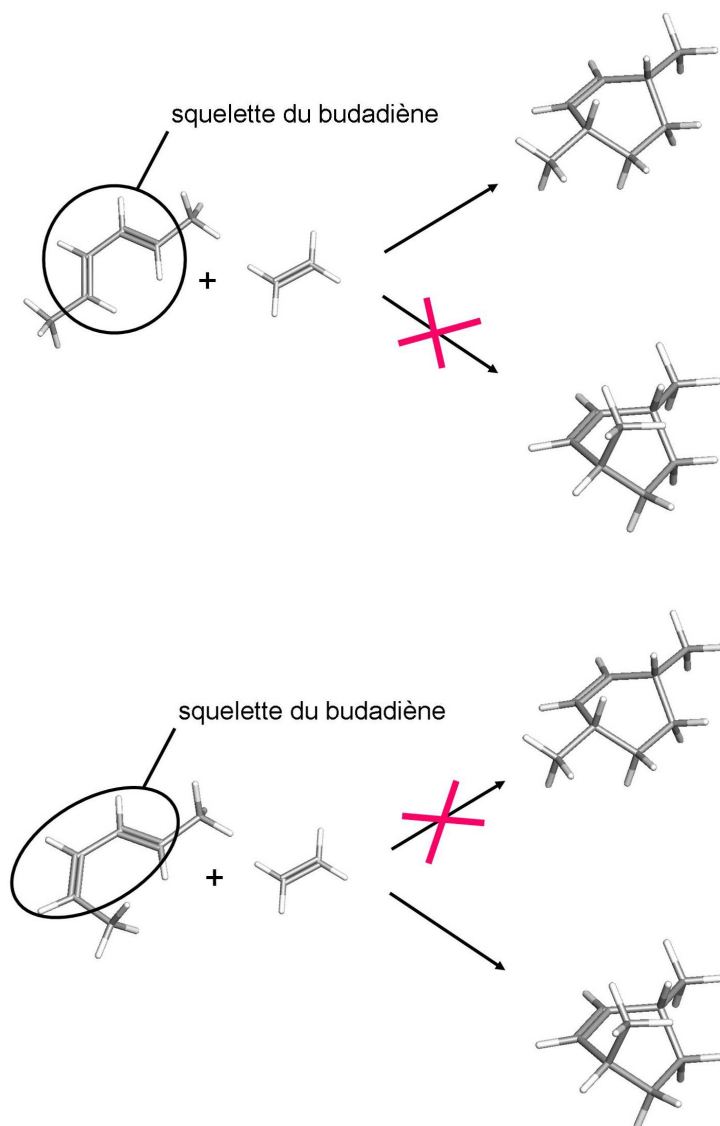




Interactions entre orbitales frontières dans la réaction de Diels-Alder.



Évolution géométrique des atomes au cours de la réaction de Diels-Alder.



Géométries finales de la réaction de Diels-Alder à partir de dérivés du butadiène.