

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) :

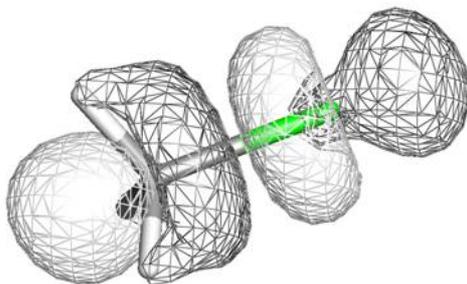
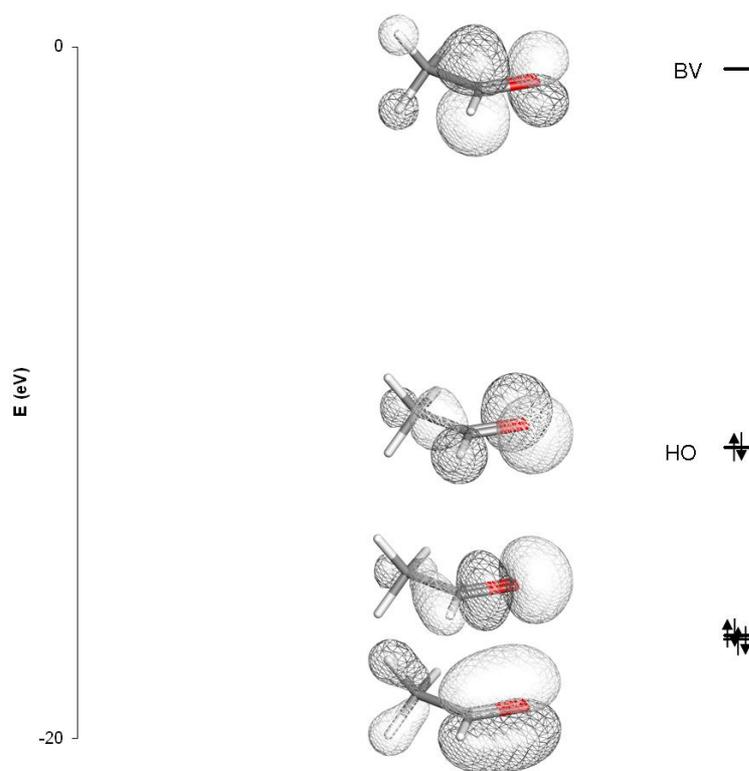
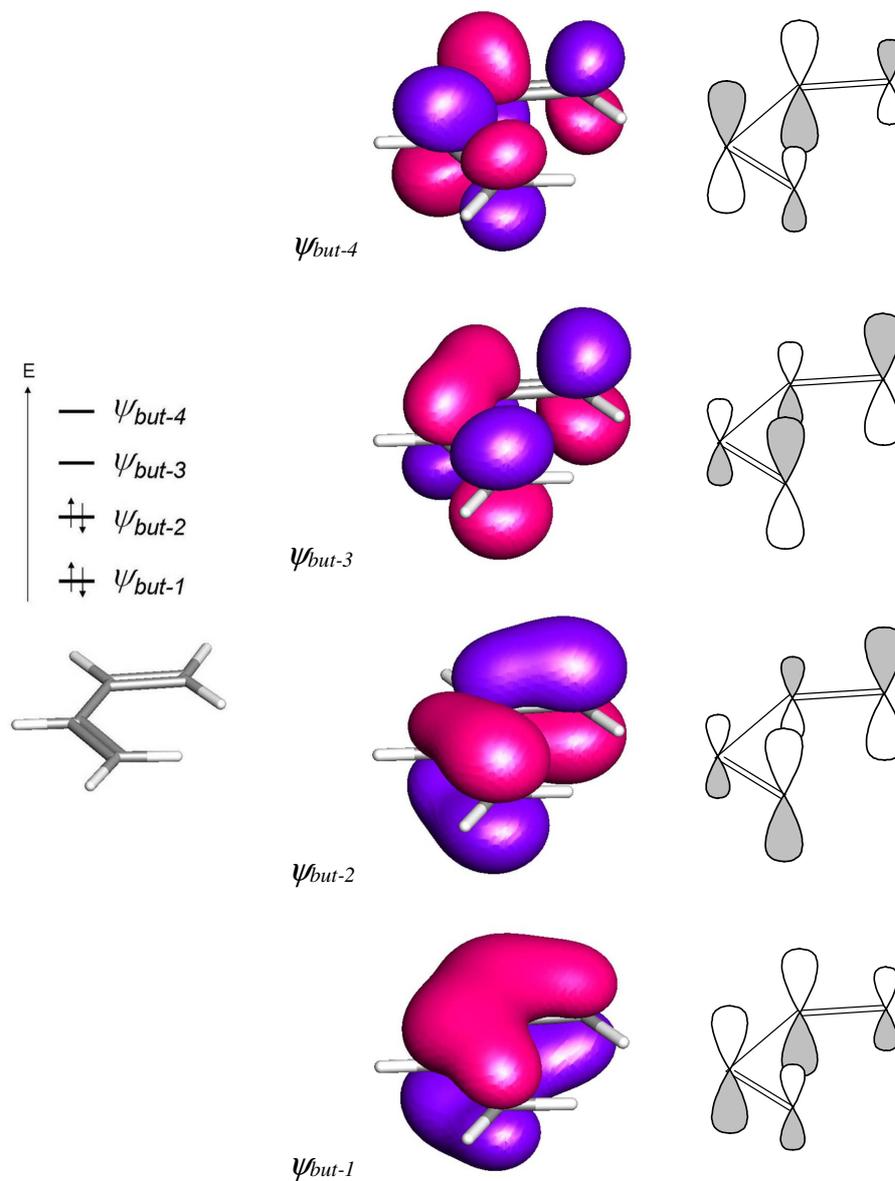
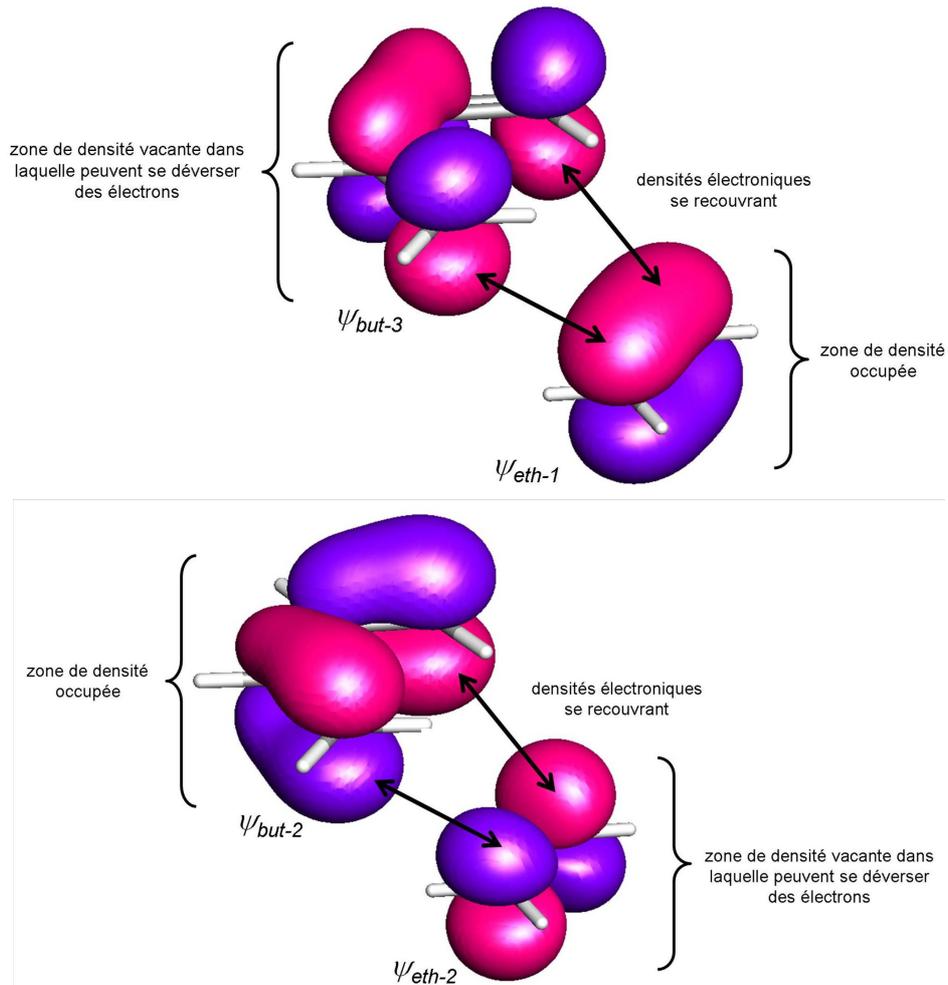


Diagramme d'OM de l'éthanal au voisinage des orbitales frontalières (calcul Jimp2) :

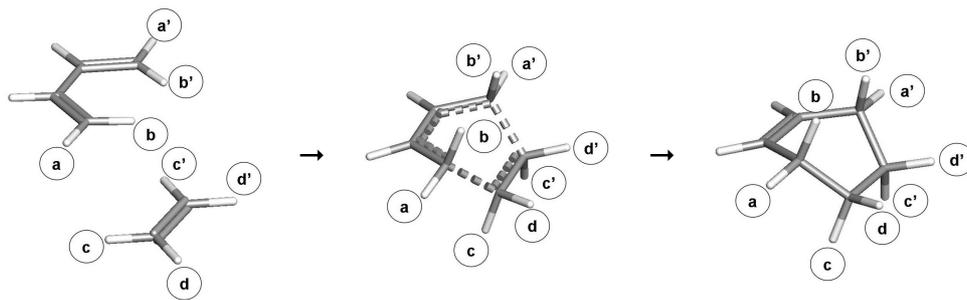


Orbitales moléculaires du butadiène :





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

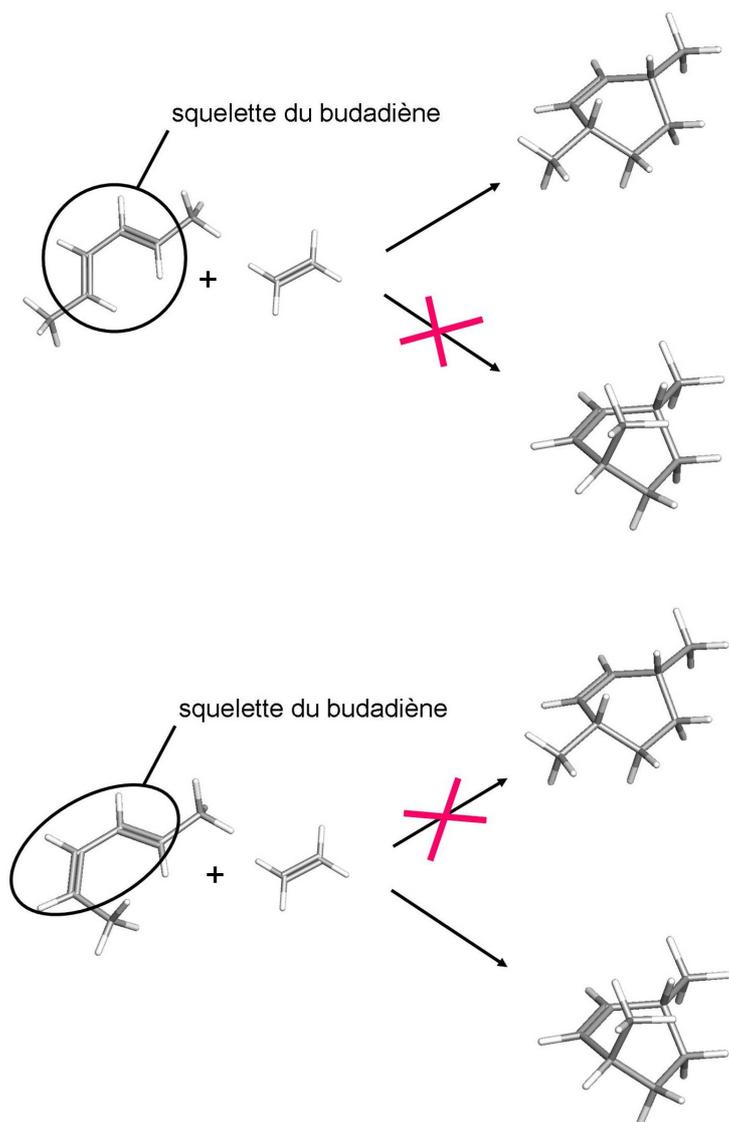


réactifs

état de transition

produit

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.