

DM 2

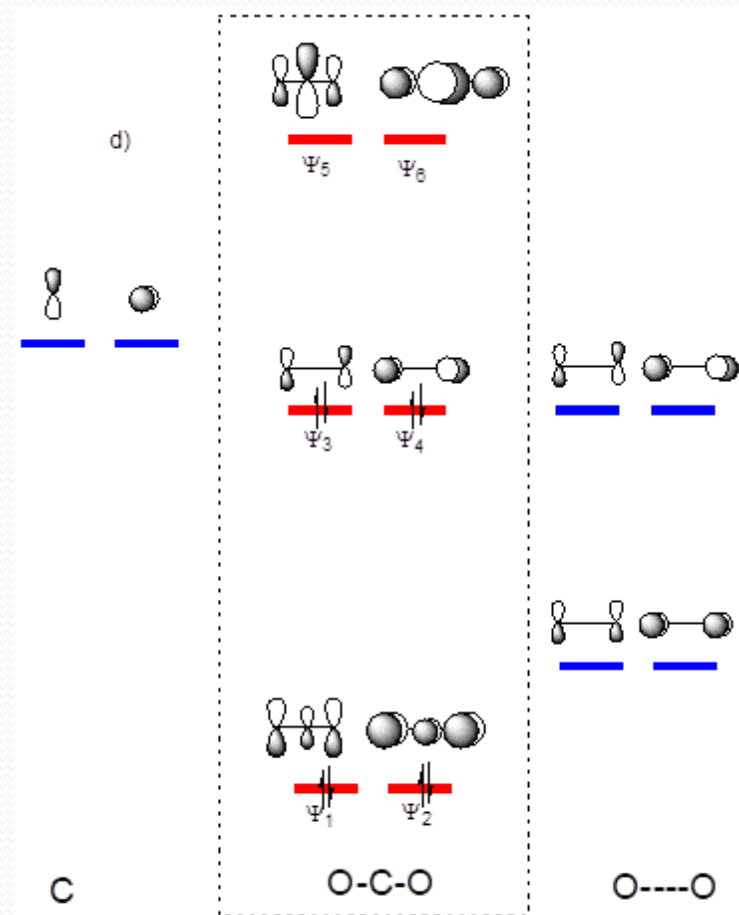
Ex 1

- 3- Quels sont les plans de symétrie de CO_2 , en utilisant le même repère que celui donné en 1^{ière} partie. En étudiant la symétrie des orbitales fragments, en déduire quelles sont les OA du carbone qui peuvent interagir par symétrie avec les OM π de O_2 ?

- Les 3 plans $x\text{Oz}$, $y\text{Oz}$ et $x\text{Oy}$ sont plans de symétrie des fragments $\text{O}_\text{A}-\cdot-\text{O}_\text{B}$ et $\cdot-\text{C}-\cdot$ et de la molécule finale $\text{O}_\text{A}-\text{C}-\text{O}_\text{B}$.

OA	2s	2px	2py	2pz	π_x	π_y	π_x^*	π_y^*
Oxz	S	S	A	S	S	A	S	A
Oyz	S	A	S	S	A	S	A	S
Oxy	S	S	S	A	S	S	A	A

- π_x interagit avec la $2\text{px}(\text{C})$
 - π_y interagit avec la $2\text{py}(\text{C})$
 - π_x interagit avec la $2\text{px}(\text{C})$
 - π_x^* et π_y^* pas d'interaction
- 💣💣 INTERACTION $\neq$ REACTION

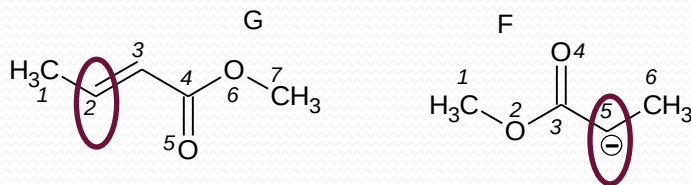
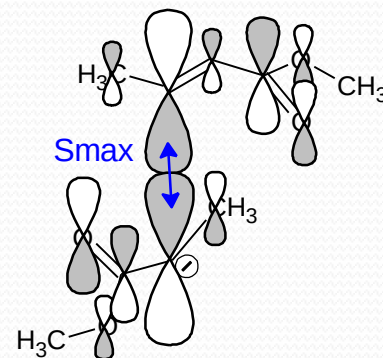
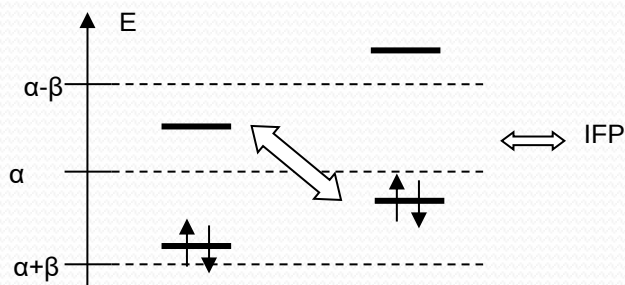


Ex 2 et 3

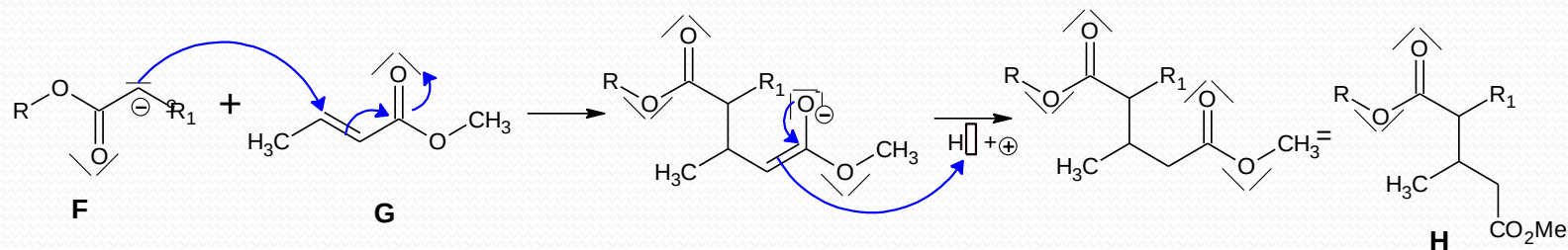
- Exploiter le principe de Smax complètement
 - identifier les atomes en interaction
 - proposer 1 mécanisme avec des flèches pour l'étape
 - proposer des produits

Q17 :Mots Clés : 1/ th. De Fukui

- 2/ IFP : HO_F/BV_G (on pouvait s'y attendre car F est chargé négativement, il va donc jouer le rôle de Nu)
- 3/ Principe de Smax : le plus gros lobe de la BV_G est sur C_2 (-0.67) et sur C_5 de la HO_F
- L'énoncé impose de dessiner l'interaction !



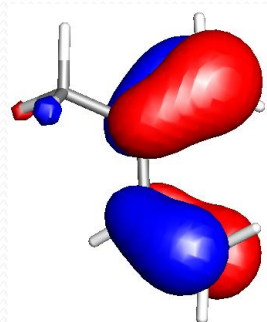
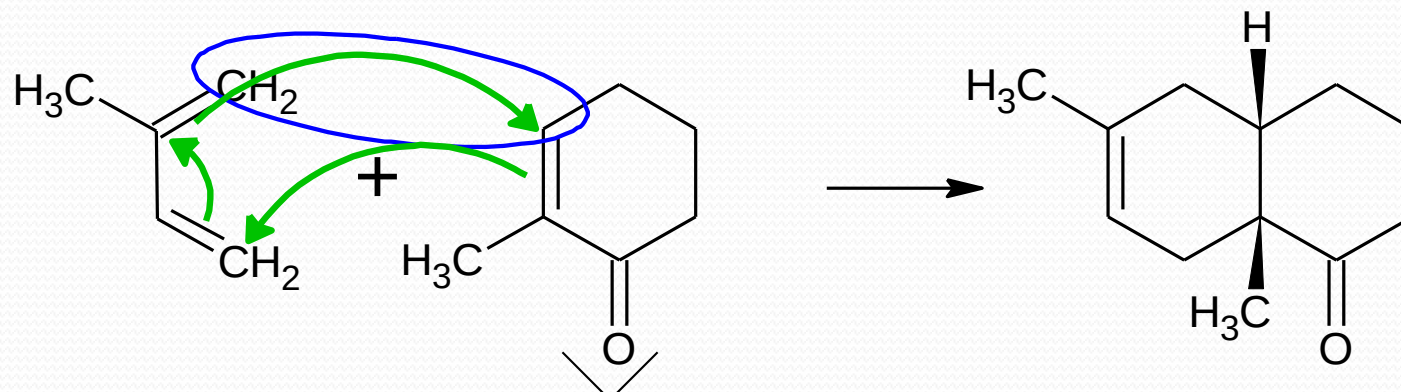
- Méca proposé :



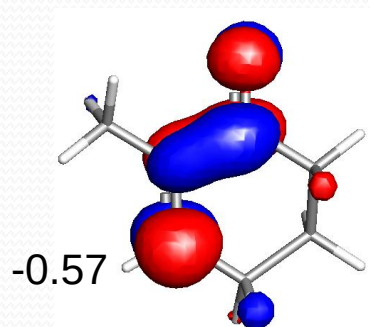
• Q23-

• D'après le principe de Smax,

- le C de la HO du diène portant le plus gros coefficient en || ici 0.59 interagit
- avec le C de la BV du diénophile portant le plus gros coefficient en || ici -0.57
 - pour le diénophile classique et -0.65 pour le diénophile complexé.



0.59

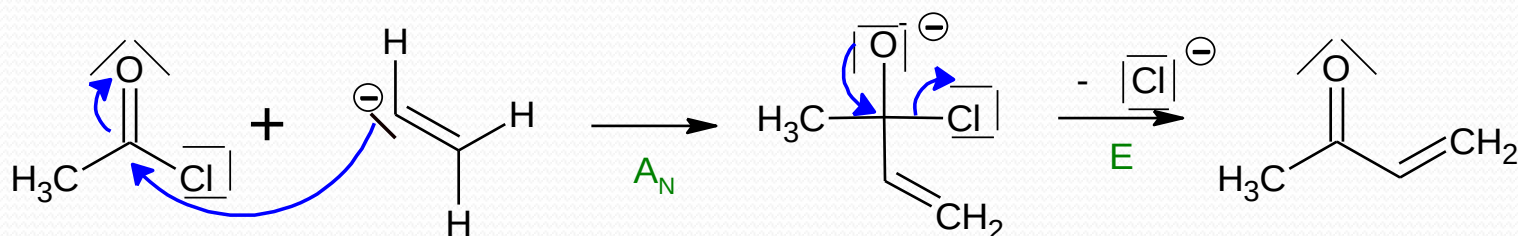


-0.57

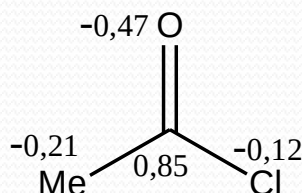
• Q10-

En effet, le contrôle orbitalaire est définie par la règle de Fukui :

- IFP : HO_{Nu}/BV_C
- Site d'attaque : principe de s_{max} : attaque sur le carbone du chlorure d'acyle
- On peut proposer le mécanisme suivant :



BV :



- **Transfert électronique** : La BV du chlorure d'acyle est de type π^*_{CO}
 - Les e^- de HO du Nu viennent **peupler la BV de type π^*_{CO}** .
 - Or si on peuple une π^*_{CO} (ajout d' e^- antiliants), on **fragilise la liaison π_{CO}** .
 - **Rmq : la BV n'est PAS une $\sigma^*_{CCl} \Rightarrow$ la liaison C-Cl n'est pas activée ou fragilisée**
- **Lewis** : la liaison la plus fragile du chlorure d'acyle est:
 - la π_{CO} (**π_{CO} est plus fragile que la σ_{CCl}**), c'est donc elle qui se rompt en 1^{er}.



That's all Folks!