# Stratégies en synthèse organique

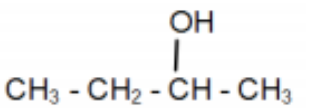
## A- Structures des entités organiques

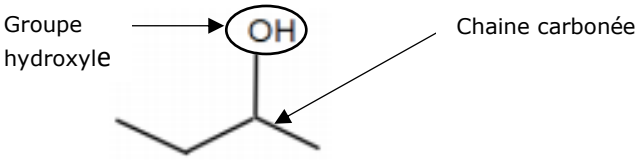
### A1. Formules topologiques

Il existe plusieurs formules permettant de représenter une molécule mais la formule topologique est une représentation simplifiée au maximum particulièrement utiles pour des molécules complexes.

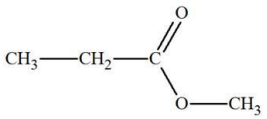
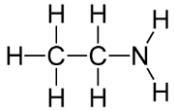
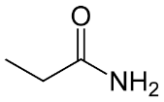
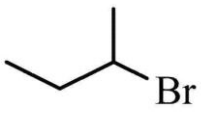
Les liaisons C-C, C=C sont représentées par des traits simples ou doubles, les atomes C et H liés ne sont plus écrits mais les groupes fonctionnels apparaissent toujours.

Exemple : Formules semi-développée et topologique du butan-2-ol




### A2. Familles fonctionnelles et nomenclature (Rappels)

| Fonction | Ester | Amine | Amide | Halogénoalcane |
|---|---|---|---|---|
| Nomenclature | terminaisons :<br>**…..oate de ….yle** | terminaison :<br>**amine** | terminaison :<br>**. . . . . .amide** | préfixe :<br>**chloro, bromo …** |
| **Exemples**<br>Entourer puis nommer le **groupe caractéristique** |  |  |  |  |
| | Propan**oate de** méth**yle** | Éthan**amine** ou éthyl**amine** | propan**amide** | 2-bromobutane |

### A3. Squelette carboné

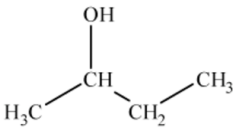
Le squelette carboné représente **l'enchainement des atomes de carbone** constituant la molécule organique (c'est un peu « l'ossature »).
Ce squelette peut présenter différentes caractéristiques :

- Il peut être **linéaire** ou **ramifié**.
- Il peut être **saturé** s'il est constitué d'une chaine de liaisons simples.
- Il peut être **insaturé** s'il est constitué d'un cycle ou (et) de liaisons multiples (doubles ou triples).

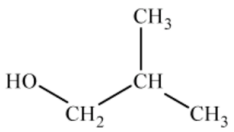
### A4. Isomérie de constitution

Deux molécules sont isomères de constitution si elles ont la même formule brute mais des formules semi-développées différentes.
Exemple :

Formule brute : …….



a) butan-2-ol



b) 2-méthylpropan-1-ol

# B- Classification des réactions en chimie organique

## B1. Modification de la structure d'une molécule

Les réactions subies par les molécules organiques peuvent entrainer

- la **modification de la chaine carbonée** (ex : raccourcissement, allongement de chaines, création de ramifications, formation d'un cycle, d'une double liaison …)
- la **modification d'un groupe caractéristique** (ex : un groupe hydroxyle -OH transformé en un groupe carbonyle – CO).

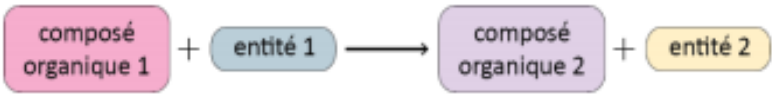
## B2. Des catégories de réaction

### 1.Réaction avec échange de particule

- Réaction acido-basique : ……..
- Réaction d'oxydo-réduction : ……

### 2. Réaction de substitution

**Une substitution** est une réaction au cours de laquelle un atome ou groupe d'atomes est **remplacé** par un autre atome ou groupe d'atomes.




Exemple : La réaction de substitution entre les ions hydroxyde et le chloropropane donne du propan-1-ol et l' ion chlorure

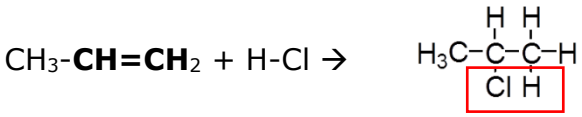
$$CH_3\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}\mathbf{Cl} + HO^- \rightarrow CH_3\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}\mathbf{OH} + Cl^-$$

### 3. Réaction d'addition

Dans une réaction **d'addition**, une « petite » molécule (ou deux groupes d'atomes) vient se fixer sur des atomes de carbone initialement liés par une double ou une triple liaison. Une insaturation disparait.




Exemple : La réaction d'addition du chlorure d'hydrogène sur le propène donne du 2-chloropropane

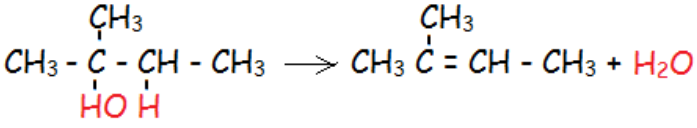



### 4. Réaction d'élimination

Une réaction d'**élimination** est définie comme une réaction chimique au cours de laquelle deux atomes ou groupes d'atomes voisins sont retirés d'une molécule. Entre les 2 atomes initialement porteurs de ces groupes d'atomes apparait une insaturation et une « petite » molécule est éliminée.




Exemple : La réaction d'élimination du 2-méthylbutan-2-ol donne du méthylbut-2-ène et de l'eau.



# C- Optimisation d'une synthèse : 2 objectifs

Définition du rendement pour le produit synthétisé $\eta = \frac{n_{final}}{n_{max}} = \frac{m_{final}}{m_{max}}$.

La quantité ou la masse maximales sont celles qu'on obtiendrait dans des conditions expérimentales optimales.

Pour optimiser une synthèse, on joue sur la cinétique et sur le déplacement de l'équilibre.

**Augmenter la vitesse de formation du produit : agir sur les facteurs cinétiques**
- Chauffer le milieu réactionnel
- Ajouter un catalyseur adapté

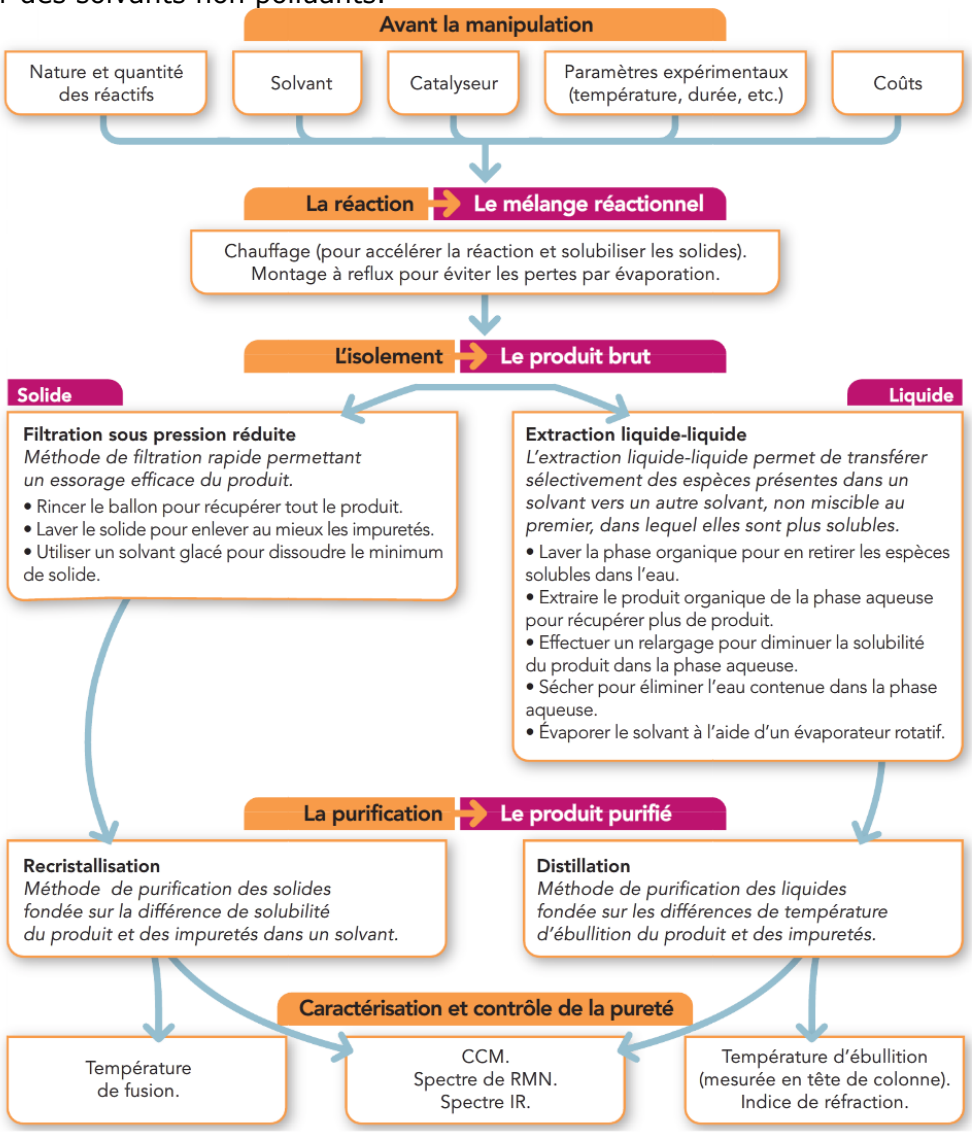
ET

**Agir sur l'état d'équilibre**
- Introduire un réactif en excès
- Éliminer un produit du milieu réactionnel au fur et à mesure

## D- Stratégies de synthèse en plusieurs étapes

Lors d'une synthèse les industriels cherchent à réduire le coût énergétique de la synthèse mais aussi les produits de la transformation qui ne sont pas visés (ou alors à avoir des produits valorisables).

- Identifier les caractéristiques de la molécule que l'on cherche à produire.
- Choisir la démarche la plus adaptée parmi une « banque de réactions » : quelles modifications doit-on réaliser ? quels types de réactions ?
- Il peut être nécessaire de procéder à une protection d'une fonction : un groupe est momentanément transformé en un autre groupe non réactif. Il faut ensuite procéder à la déprotection afin de régénérer le groupe initial.
- Il faut adopter une démarche globale écoresponsable :
  - Matières premières : limiter les quantités, privilégier les matières peu dangereuses, renouvelables.
  - Aspect énergétique : réduire les dépenses. Conditions « douces » de température et de pression, catalyseur si possible.
  - Aspect environnemental : limiter les déchets, choisir les espèces les moins dangereuses, privilégier des solvants non polluants.



# E- Mécanisme réactionnel

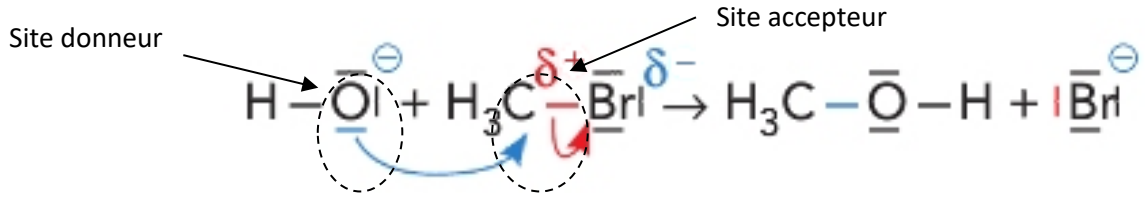
En se basant sur des observations expérimentales, les chimistes élaborent un mécanisme réactionnel qui décrit à l'échelle microscopique, le déroulement de chaque étape d'une transformation chimique en *modélisant le déplacement des électrons*. L'interaction entre les sites donneurs d'électrons et les sites accepteurs d'électrons permet d'expliquer les liaisons formées ou rompues. Pour chaque étape, on représente le déplacement d'un ou plusieurs doublet(s) d'électrons par le modèle de la flèche courbe.

Les règles sont les suivantes :

**Une flèche courbe part d'un site donneur d'électron vers un site accepteur d'électrons.**

**Un site donneur peut être un doublet non liant, une liaison polarisée ou une liaison d'une double liaison.**

**Un site accepteur d'électrons est un atome porteur d'une charge positive, partielle ou non.**




Vocabulaire à connaitre :

- Un **acte élémentaire** est un processus qui se déroule à l'échelle microscopique, en une seule étape, sans formation d'entités intermédiaires.
- Un **mécanisme réactionnel** est l'ensemble des actes élémentaires permettant de rendre compte, à l'échelle microscopique, de la formation, à l'échelle macroscopique des produits à partir des réactifs.
- Un **intermédiaire réactionnel** est une entité produite au cours d'un acte élémentaire puis totalement consommée dans un autre
- Un **catalyseur** accélère une réaction chimique en modifiant le mécanisme réactionnel mais sans modifier l'équation de réaction car il disparaît au cours du mécanisme réactionnel, puis il est totalement régénéré.