


3 crédits	22.5 h + 7.5 h	Q1
-----------	----------------	----

Enseignants	Robiette Raphaël ;
Langue d'enseignement	Français
Lieu du cours	Louvain-la-Neuve
Thèmes abordés	Le cours fait une synthèse complète des notions abordées dans différents cours de chimie organique tout en introduisant les méthodes physico-chimiques employées dans les études de mécanismes de chimie organique. Les principaux thèmes retenus sont : - les relations structure-activité en chimie organique - les effets électroniques et stériques - l'influence du milieu en chimie organique - les effets stéréoelectroniques en chimie organique.
Acquis d'apprentissage	<p>1 Le but du cours est de familiariser les étudiants avec les principales méthodes de la chimie organique physique qui permettent d'établir les mécanismes de réaction, de préciser les structures des complexes activés et de comprendre les interactions moléculaires qui affectent la réactivité</p> <p>-----</p> <p><i>La contribution de cette UE au développement et à la maîtrise des compétences et acquis du (des) programme(s) est accessible à la fin de cette fiche, dans la partie « Programmes/formations proposant cette unité d'enseignement (UE) ».</i></p>
Contenu	<p>1. Relations structure-activité : les relations empiriques d'énergie libre. Estimation quantitative des effets électroniques (relation de Hammett, équations de Yukawa-Tsuno). Relation avec les mécanismes. Echelles de sigma. Déviations à l'équation de Hammett. Méthodes physico-chimiques pour la mesure des paramètres. Effets stériques (relation de Taft). Application sur des cas pratiques de la littérature (catalyse homogène et hétérogène, systèmes enzymatiques). 2. Effets de milieu en chimie organique : intervention du solvant en chimie organique. Classification des solvants. Echelles de solvants. Interactions solutés-solvants. Effets d'ions (activation anionique et assistance électrophile). Effets de milieux sur les cinétiques de réaction. Règle de Hughes-Ingold. Effets de la solvation sur la réactivité des espèces. 3. Effets stéréoelectroniques en chimie organique : rappels sur les règles d'interactions orbitales. Restrictions géométriques au recouvrement. Effets stéréoelectroniques sur les conformations. Effets anomères. Effets sur la réactivité. Effets à travers les liaisons et à travers l'espace. Substitution sur un centre saturé. Règles de Baldwin. Réaction SN2. Effets sur la stabilisation d'un ET SN2 par environnement local. Assistance anchimérique. Carbocations et SN1. Réaction sur un système insaturé sp<sup>2</sup>. Addition nucléophile sur un carbonyle (effets stériques et stéréoelectroniques). Règles de Cram, Felkin-Anh et Cram chélaté. Cations iminium et doubles liaisons électrophiles. Additions nucléophiles intramoléculaires. Méthodes d'enseignement et d'apprentissage - Exposé avec schémas dessinés au tableau, de manière à faciliter la prise de notes par les étudiants. - Étude de cas pratiques tirés de la littérature récente.</p>
Autres infos	Pré-requis : cours de chimie organique de baccalauréat, CHM 2140 Mode d'évaluation : examen écrit Support : notes de cours, livres de la bibliothèque CHIM, articles récents de la littérature.
Faculté ou entité en charge:	CHIM

<b>Programmes / formations proposant cette unité d'enseignement (UE)</b>				
Intitulé du programme	Sigle	Crédits	Prérequis	Acquis d'apprentissage
Master [120] en sciences chimiques	CHIM2M	3		
Master [60] en sciences chimiques	CHIM2M1	3		