Nom & prénom : …………………………………………………………………………………………………………………………… Groupe :………………….

TP N°2: HyperChem et réactivité chimique

# (Compte rendu)

1. **But :**

……………………………………………………………………………………………………………………………

…...……………………………………………………………………............................................................................

# Applications et résultats :

## Conformères de …………………… :

* Calculer l’énergie totale de chacun des deux conformères.

ET(éclipsée) =……………………………………………………ET(décalée)=………………………………………………

* Comparer la stabilité entre ces deux conformères.

………………………………………………………………………………………………………………………………

………………………………………………………………………………………………………………………………

## Configurations géométriques du butadiène :

* + Calculer l’énergie totale de chacune des deux configurations géométriques.

ET(s-cis) = ………….…………………………………………… ET(s-trans) = …………………………………………

* + Comparer la stabilité entre ces deux configurations géométriques.

………………………………………………………………………………………………………………………………

………………………………………………………………………………………………………………………………

## Configurations absolues d’une molécule.

* + Calculer l’énergie totale de chacune des deux configurations absolue de : …………………………….

ET(éclipsée) = ………….………………………………………… ET(décalée) = …………………………………………

* + Comparer entre ses deux configurations absolues. Que peut-on conclure ?

………………………………………………………………………………………………………………………………

………………………………………………………………………………………………………………………………

………………………………………………………………………………………………………………………………

# Charges nettes et sites réactionnels*.*

* + Calculer les charges nettes portées par différents sites réactionnels de : …………………………………………………..

………………………………………………………………………………………………………………………………

………………………………………………………………………………………………………………………………

………………………………………………………………………………………………………………………………

………………………………………………………………………………………………………………………………

………………………………………………………………………………………………………………………………

* + Pour une réaction de substitution électrophile aromatique (SE), montrer sur le schéma :
    - par une flèche : tous les sites réactifs ;
    - par une double-flèche : le(s) site(s) le(s) plus réactif(s). Justifier votre réponse.

………………………………………………………………………………………………………………………………

………………………………………………………………………………………………………………………………

………………………………………………………………………………………………………………………………

## Orbitales frontières et réactivité chimique :

- Calculer l’énergie des orbitales frontières HOMO et LUMO du butadiène et de l’éthylène.

EHOMO(butadiène) =………………………………………….... ELUMO(butadiène) =……………………………………….

EHOMO(éthylène) =…………………………………………….. ELUMO(éthylène) =……………………………………….…

* + Calculer les écarts énergétiques :

E1=|EHOMO(butadiène) - ELUMO(éthylène)| ………………………

E1=| EHOMO(éthylène) – ELUMO(butadiène)| ……………………..

* + Comparer les deux écarts. Quelle est l’interaction la plus favorisée énergétiquement ?

………………………………………………………………………………………………………………………………

………………………………………………………………………………………………………………………………

………………………………………………………………………………………………………………………………

- Calculer l’énergie totale du cycloadduit à celle des réactifs.

E(cyclohexène)= ………………………………………………………………………

E(butadiène)= ………………………………………………………………………

E(éthylène)= ………………………………………………………………………

……………………………………………………………………………………………………………

* + Comparer l’énergie totale du cycloadduit à celle des réactifs. La réaction est-elle exothermique ou endothermique ?

………………….……………………………………………………………………………………………………………

………………………………………………………………………………………………………………………………

………………………………………………………………………………………………………………………………