

CHEMDRAW 2D

Séance 1-2-3

Séance 1: utilisation de l'outil ChemDraw 2D

Séance 2: Exercices d'applications

Nota: tous les exercices seront reportés avec les réponses sur un fichier .doc ou docx ou pdf avec Nom, Prénom, Numéro d'étudiant.

Exercice 1 :

Représenter sur ChemDraw 2D les composés suivants :

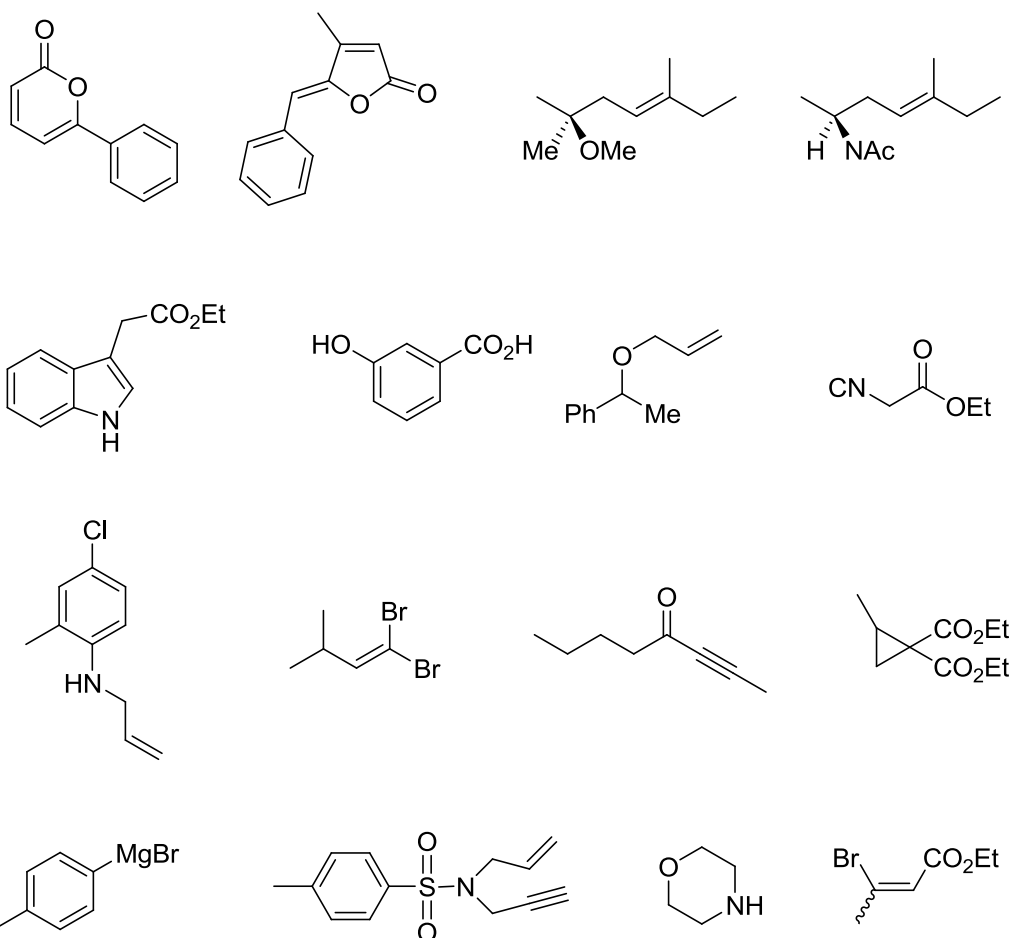
- Cyclohexanone
- Ethane 1,2 diol
- 3-Méthyl 1-pentanol
- 4-Chlorobutyronitrile
- 1,1-Dichlorocyclopropane
- Hexa-1,4-diène
- Hept-2-yne-4-ène
- Octa-1,3,5-triène-7-yne
- 4-Oxopentanenitrile
- 4-Cyano-N-éthylbutyramide
- p-Diiodobenzène
- 1-Bromo-buta-1,3-diène
- But-3-ène-2-ylbenzène
- 1,2-Dicyclopentyléthane
- Représenter les solvants les plus utilisés en synthèse organique. Rechercher pour tous les solvants : points d'ébullitions, masses moléculaires, densités, précautions à prendre...
- Représenter les hétérocycles les plus communs.

Exercice 2

1- Dessiner, puis générer les formules brutes et les masses molaires des molécules suivantes :

- Eau lourde, chloroforme deutéré
- Anthracène, phénanthrène
- TMEDA
- BuLi (donner le pKa de ce composé)
- 2-Ethynyl-*N*-méthylindole (Deutééré)
- Bu₃N
- LiAlH₄
- Triphénylphosphine
- Triméthylsilyldiazométhane
- Tétraazacyclotétradécane

2- Dessiner les molécules suivantes:



- a- Donner la formule brute de chaque composé
- b- Donner le nom en nomenclature IUPAC de tous les composés.
- c- Représenter le galactose en Haworth, Fischer et en représentation chaise ? Donner la configuration des C*.
- d- Représenter un énantiomère et un diastéréoisomère du fructose.

Exercice 3

Dessiner les schémas réactionnels suivants:

- a- Acylation de type Friedel-Crafts sur le toluène
- b- Saponification d'un ester éthylique (benzoate d'isopropyle)
- c- Représenter la réaction de « Click Chemistry » : quelles sont les concepts de base de cette réaction ; qui est l'auteur de cette réaction
- d- SN d'ordre 1 et d'ordre 2.
- e- Bromation du méthoxybenzène par une SE_{Ar}

Exercice 4

- 1- Sur Chemdraw 2D, dessiner le cis 1-2-diméthylcyclohexane, et le trans1-2-diméthylcyclohexane
- 2- Lequel est le plus stable ; expliquer?

Exercice 5

A l'aide du document ci-joint :

- 1- Représenter les molécules 2a et des exemples de molécules bioactives.
- 2- Reproduire l'abstract; Reproduire le mécanisme réactionnel de cette réaction.
- 3- Qu'apporte cette méthodologie par rapport à la littérature.
- 4- Résumer cet article en 5-10 lignes avec un schéma synthétique.

Exercice 6

On désire synthétiser une 0.1 mol du magnésien du bromure de paraméthoxybenzène.

- 1- Décrire en 5-6 lignes la partie expérimentale
- 2- Faire le dessin du montage expérimental
- 3- Reporter le tableau de chaque composé (réactifs et solvant)
- 4- Ce magnésien réagit ensuite sur le pent-3-yn-2-one (quantité à déterminer) : décrire par un mécanisme cette étape.
- 5- On obtient 11.53 gr d'un produit après purification sur gel de silice ; calculer le rendement de cette réaction décrire la RMN 1H de ce composé.