

I. Notion d'aromaticité

1. Formule de Kékulé

- Formule de Kékulé...
- A priori, une addition anti donnerait le mélange de (R,R) et (S,S)5,6-dibromocyclohexa-1,3-diène
- Je ne vois pas comment interpréter la formation d'un composé unique... Les deux formes de Kékulé expliquent la longueur de liaison unique et intermédiaire.

2. Critère d'aromaticité

- Un composé est aromatique s'il présente $4n + 2$ électrons π ou n entièrement délocalisés sur un ou plusieurs cycles plans accolés
 - 1 et 3 sont aromatiques
- $C_6H_{10} + H_2 = C_6H_{12}$
 $C_6H_8 + 2 H_2 = C_6H_{12}$
 produit commun = cyclohexane
 l'écart de 10 kJ.mol^{-1} s'explique par la conjugaison des deux liaisons π .
 Une simple délocalisation donnerait une énergie de résonnance de 30 kJ.mol^{-1} pour le benzène.
 -

	ϵ_{π}	ϵ'_{π}	ϵ''_{π}	$\Delta\epsilon_{\text{conj}}$	$\Delta\epsilon_{\text{rés}}$
cyclobutadiène	$4\alpha + 4\beta$	$4\alpha + 4\beta$	$4\alpha + 4,48\beta$	0	-0,48 β (anti)
hexa-1,3,5-triène	$6\alpha + 7\beta$	$6\alpha + 6\beta$	$6\alpha + 7\beta$	β	0
benzène	$6\alpha + 8\beta$	$6\alpha + 6\beta$	$6\alpha + 7\beta$	2β	β (arom)
butadiène	$4\alpha + 4,48\beta$	$4\alpha + 4\beta$	$4\alpha + 4,48\beta$	0,48 β	0

- déplacement chimique unique et très élevé (par rapport à des H éthyléniques)
 [18]-annulène aromatique : H_2 ressentent un champ affaibli et H_1 accru par le courant de cycle.

II. Etude d'un protocole de SEA

1. La réaction

- SEA possible en ortho, méta ou para. Le para est majoritaire (par rapport aux proportions stœchiométriques) selon la règle de Holleman relative aux groupements donneurs (CH_3 ici)
- En notant P l'acétophénone, le bilan s'écrit : $Ph CH_3 + MeCO-O-COMe = P + MeCOOH$
- Mécanisme : cours
- P est aromatique par le cycle benzénique
- $AlCl_3$ acide de Lewis qui exalte l'électrophilie du carbone fonctionnel de l'anhydride, mais se complexe à la cétone formée : deux équivalents sont nécessaires.

2. Le protocole

- Montage : OK
- AcOH
- hydrolyse de l'anhydride en excès et neutralisation du complexe cétone-chlorure d'aluminium
- Toluène moins dense que l'eau : surnage et contient l'acétophénone
- La soude détruit l'acide en excès introduit pour l'hydrolyse et permet d'éliminer les sels d'aluminium mais on dépasse l'équivalence, donc élimination de l'excès de soude par lavage à l'eau puis neutralisation plus fine par un acide faible ensuite.
- séchage de la phase liquide obtenue.

3. Le rendement

- 0,36 mol de toluène et 0,075 mol d'anhydride pour 0,067 mol de produit donc un rendement de 89,3 %
- suivi pH-métrique (Verre + ECS)
 V_e est déterminé par tracé de la dérivée, ou méthode des tangentes : 36,1 mL
 donc il reste 36,1 mmol de soude dans le piège sur les 100 initialement présentes : 63,9 mmol d'AcOH formées soit 0,064 mol de P, ce qui donne un rendement plus faible (fuites ?)

4. La purification

- Cours
- Cours

5. La caractérisation

RMN : 4 H ortho entre 7 et 8 et deux singulets pour les deux méthyle.

IR : CH autour de 3000 (sat et insat) 1680 pour C=O conj 1550-1600 pour C=C arom