
Application de la DFT à une réaction de polycondensation de type Friedel-Crafts

Sigismund Melissen*^{1,2}

¹École normale supérieure de Lyon (ENS LYON) – École Normale Supérieure (ENS) - Lyon – 15 parvis René Descartes - BP 7000 69342 Lyon Cedex 07, France

²Chimie Organique et Bioorganique : Réactivité et Analyse (COBRA) – CNRS : UMR6014, Institut National des Sciences Appliquées [INSA] - Rouen – Rue Tesniere - 76821 - Mont Saint Aignan, France

Résumé

Le mécanisme des différentes réactions de benzoylations de type Friedel-Crafts (1) sur des molécules phényle-aromatiques a été étudié (2) en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). La fonctionnelle hybride avec corrections longue-portée et Van der Waals wB97X-D (3) est particulièrement adaptée aux interactions attendues dans cette famille de réactions.

Les réactions sont liées à la polycondensation des poly aryle éther cétones (PAEK), une famille de polymères de haute-performance (4,5). En particulier, les benzoylations du benzène et des positions o-, m-, et p- du diphenyle éther ont été étudiées, dévoilant une réactivité différente pour chacune des positions, en cohérence avec la nature o-, p- orienteur du groupement éther. La réaction sur la position o- du diphenyle éther est d'intérêt particulier, car elle est suivie par une cyclisation dont le mécanisme n'a pas encore été décrit dans la littérature et qui sera détaillé sur mon poster (6).

L'étape déterminante de toutes les réactions est la formation du cation, suivie en importance par la formation de l'intermédiaire de Wheland ou par l'élimination de l'hydrogène, suivant la nature du substituant.

1. S. Yamabe et al., *J. Phys. Org. Chem.* **22** 1094 (2009).
2. S.T.A.G. Melissen et al., *J. Mol. Model.* **19** 4947 (2013).
3. J.D. Chai et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **10** 6615 (2008).
4. M.G. Zolotukhin et al., *Polymer* **38**, 3441 (1997).
5. G.A. Olah et al., *J. Am. Chem. Soc.* **93**, 6964 (1971).
6. S.T.A.G. Melissen et al., *J. Mol. Model.* (to be submitted).

Mots-Clés: Poly Aryle Ether Cétone, polymérisation, Friedel Crafts Acylation, DFT, DFT conceptuelle, dispersion, xanthidole

*Intervenant