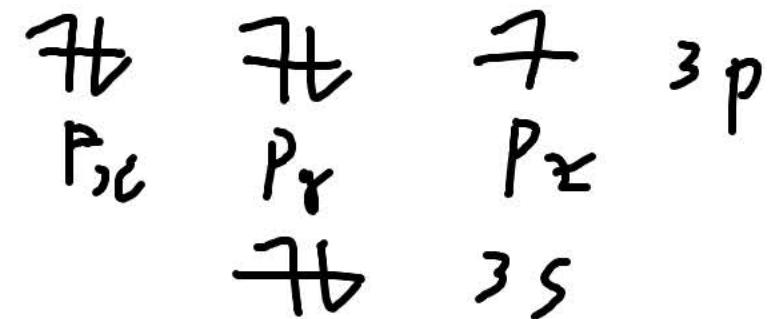


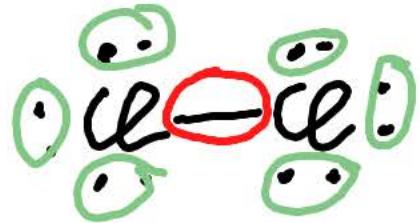
chlorination du méthane: détails du mécanisme

1) initiation

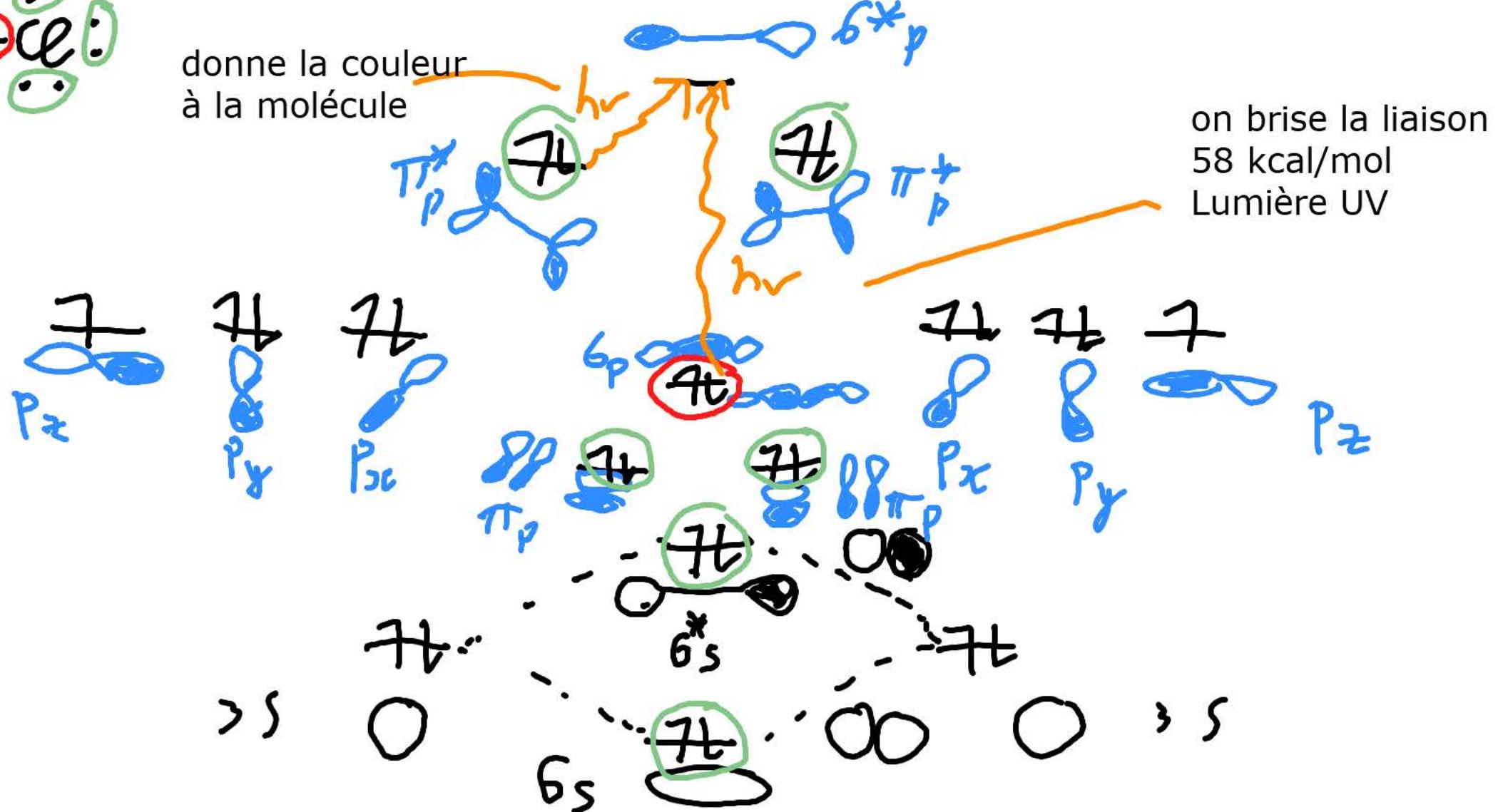


pour Cl_2 : pas de liaison avec C, on fait une liaison sans hybridation!



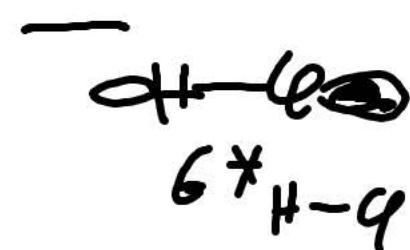
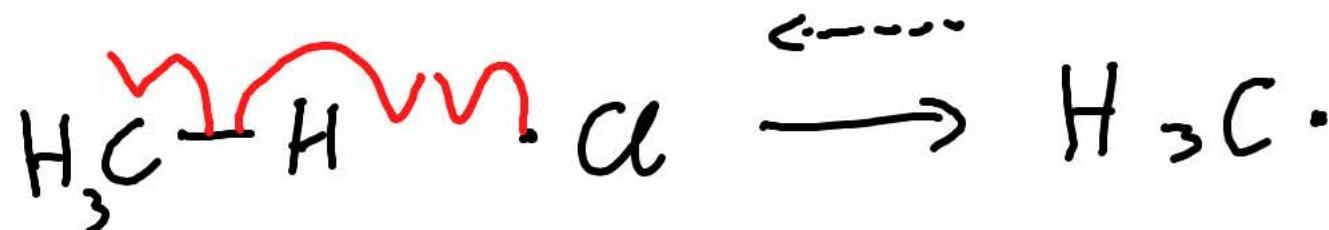


donne la couleur
à la molécule

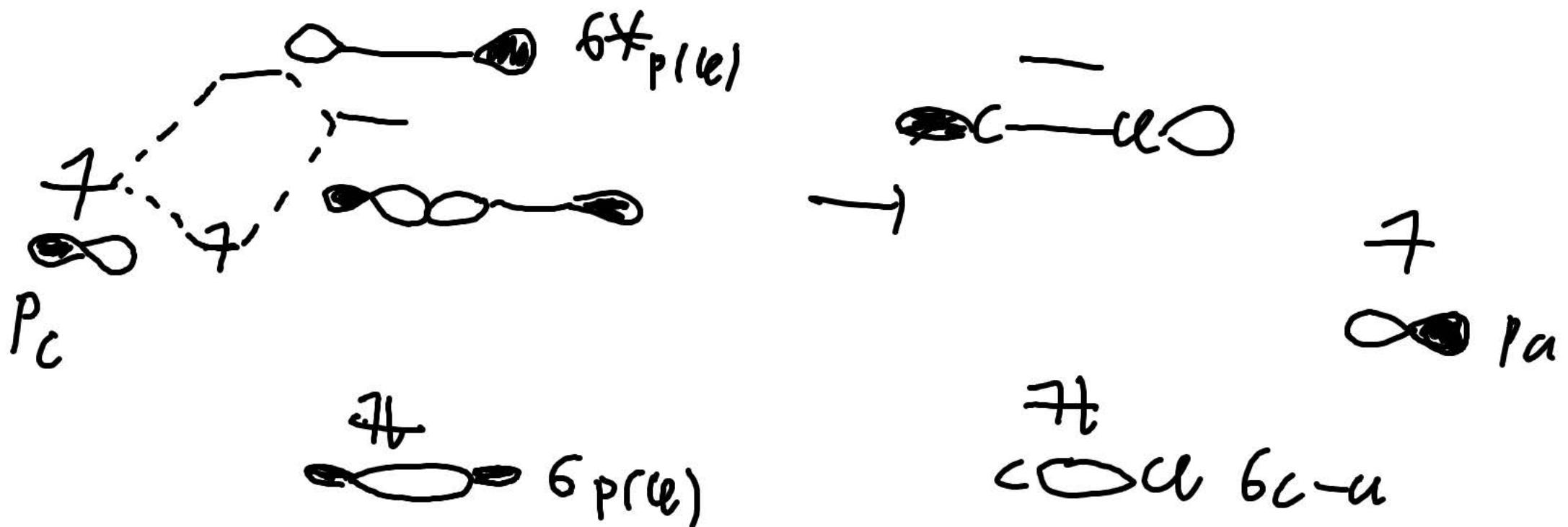


propagation 1 et 2

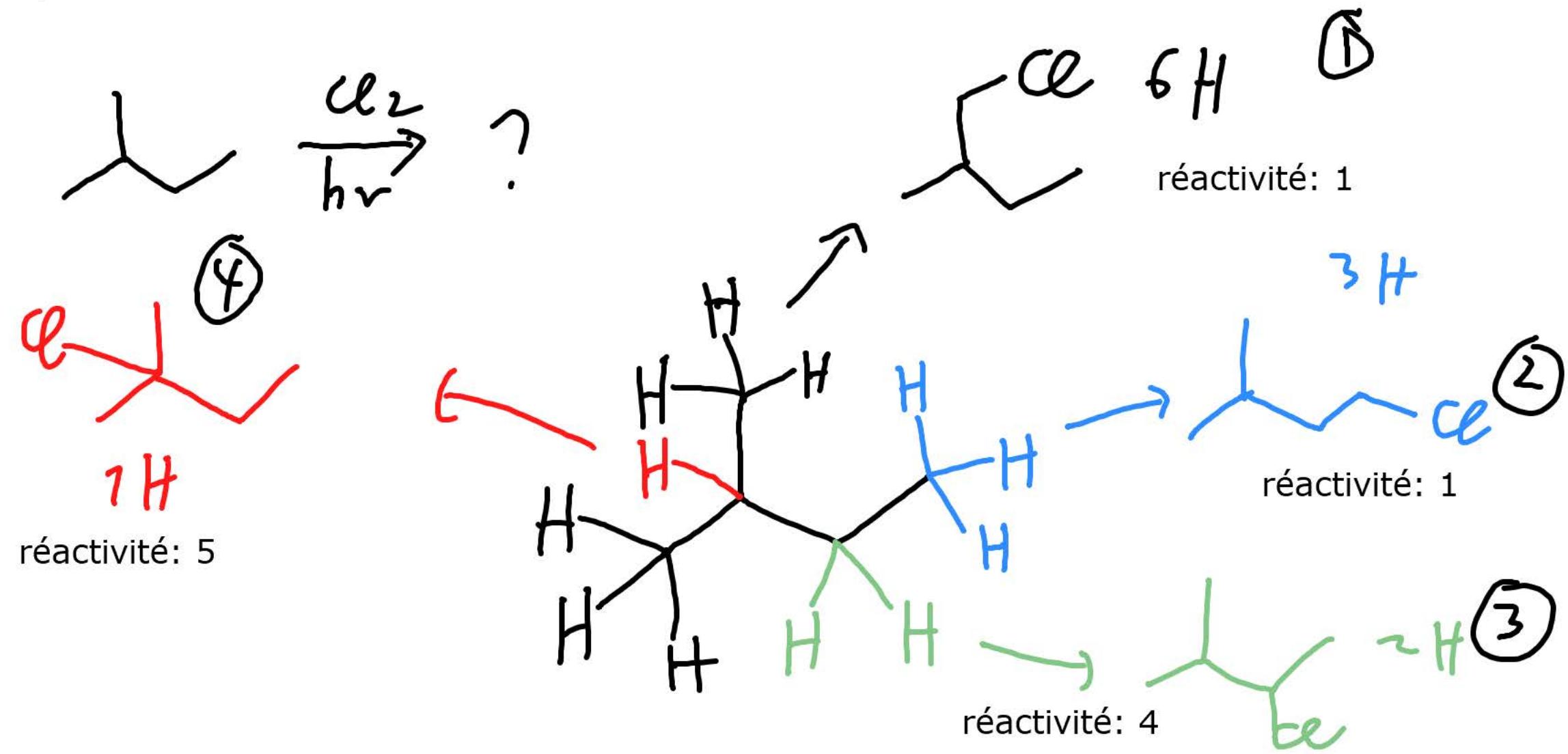
①



propagation 2:



prédir le résultat d'une chlorination



composé	nombre de H	réactivité corrigée	proportion
①	6	$6 \times 1 = 6$	$6 / 22 = 27\%$
②	3	$3 \times 1 = 3$	$3 / 22 = 14\%$
③	2	$2 \times 4 = 8$	$8 / 22 = 36\%$
④	1	$1 \times 5 = \underline{\underline{5}}$ $\underline{\underline{22}}$	$5 / 22 = 23\%$

Que se passe-t-il avec F₂?

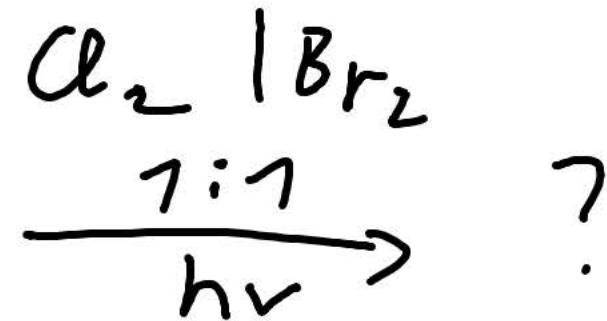
extrêmement réactif, seul le nombre de H va compter (réagissent tous à la même vitesse):
produit 1: produit 2:produit 3: produit 4 = 6:3:2:1

Que se passe-t-il avec Br₂?

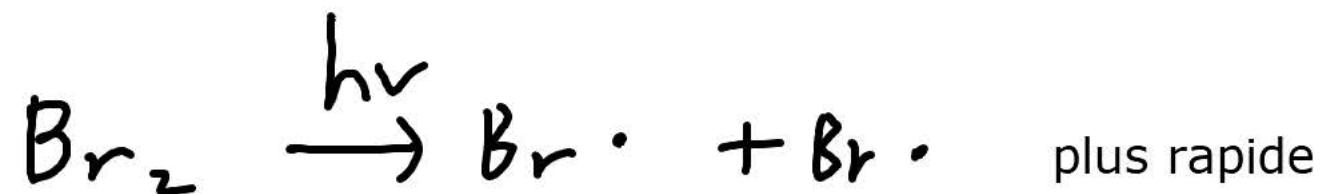
moins réactif, la stabilité du radical détermine la sélectivité, on aura:
produit 1: produit 2:produit 3: produit 4 = <1%, <1%, <5%, >95%

Que se passe-t-il avec I₂?

rien, pas de réaction.



intiation

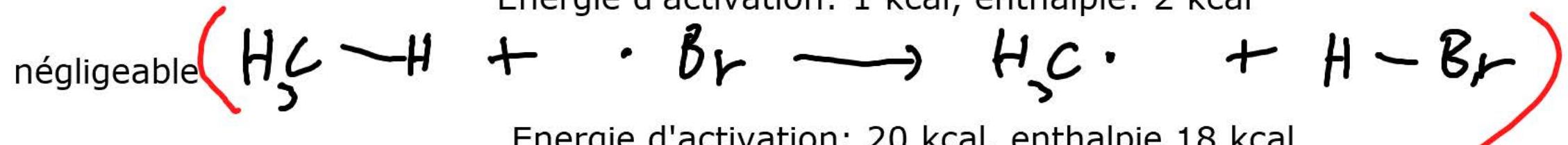


les deux sont possibles, plus de Br.

propagation:



Energie d'activation: 1 kcal, enthalpie: 2 kcal



Energie d'activation: 20 kcal, enthalpie 18 kcal



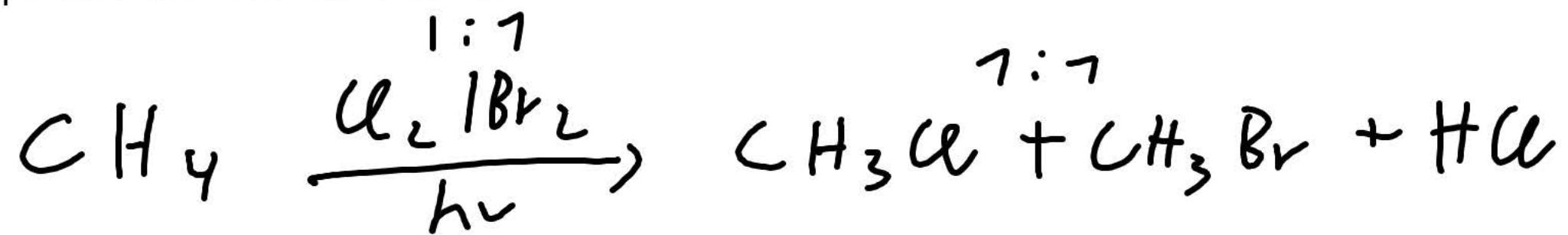
Energie d'activation: 1 kcal, enthalpie: -27 kcal



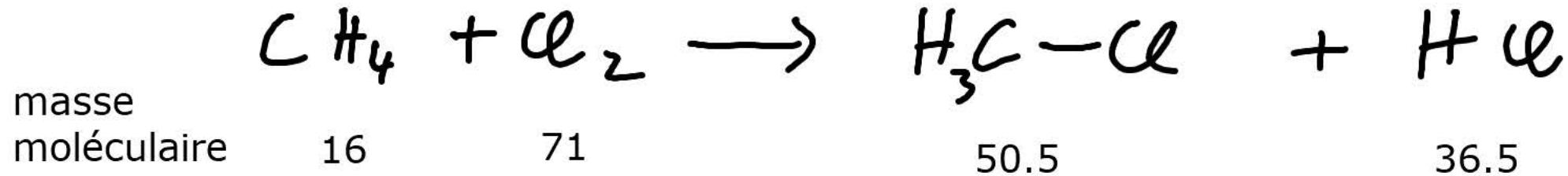
Energie d'activation: 1 kcal, enthalpie -24 kcal

ici mélange 1:1

Au temps zéro de la réaction on a:



métriques de chimie verte pour la chlorination



économie d'atomes: $5/7 = 71\%$

PMI (produits de départs+solvents/masse des produits (1 kg))
 $(16+71)/50.5 = 1.7$

E (masse des déchets/masse de produits)
 $36.5/50.5 = 0.73$

En pratique: on doit utiliser un excès de méthane! Sinon on réagit une seconde fois et produit du dichlorométhane!