



HAL
open science

ÉTUDE CINÉTIQUE DE LA RÉACTION DE SUZUKI

Amine Bourouina, Valérie Meille, L. Djakovitch, Claude de Bellefon

► **To cite this version:**

Amine Bourouina, Valérie Meille, L. Djakovitch, Claude de Bellefon. ÉTUDE CINÉTIQUE DE LA RÉACTION DE SUZUKI. SFGP, Jul 2017, Nancy, France. hal-04772183

HAL Id: hal-04772183

<https://hal.science/hal-04772183v1>

Submitted on 7 Nov 2024

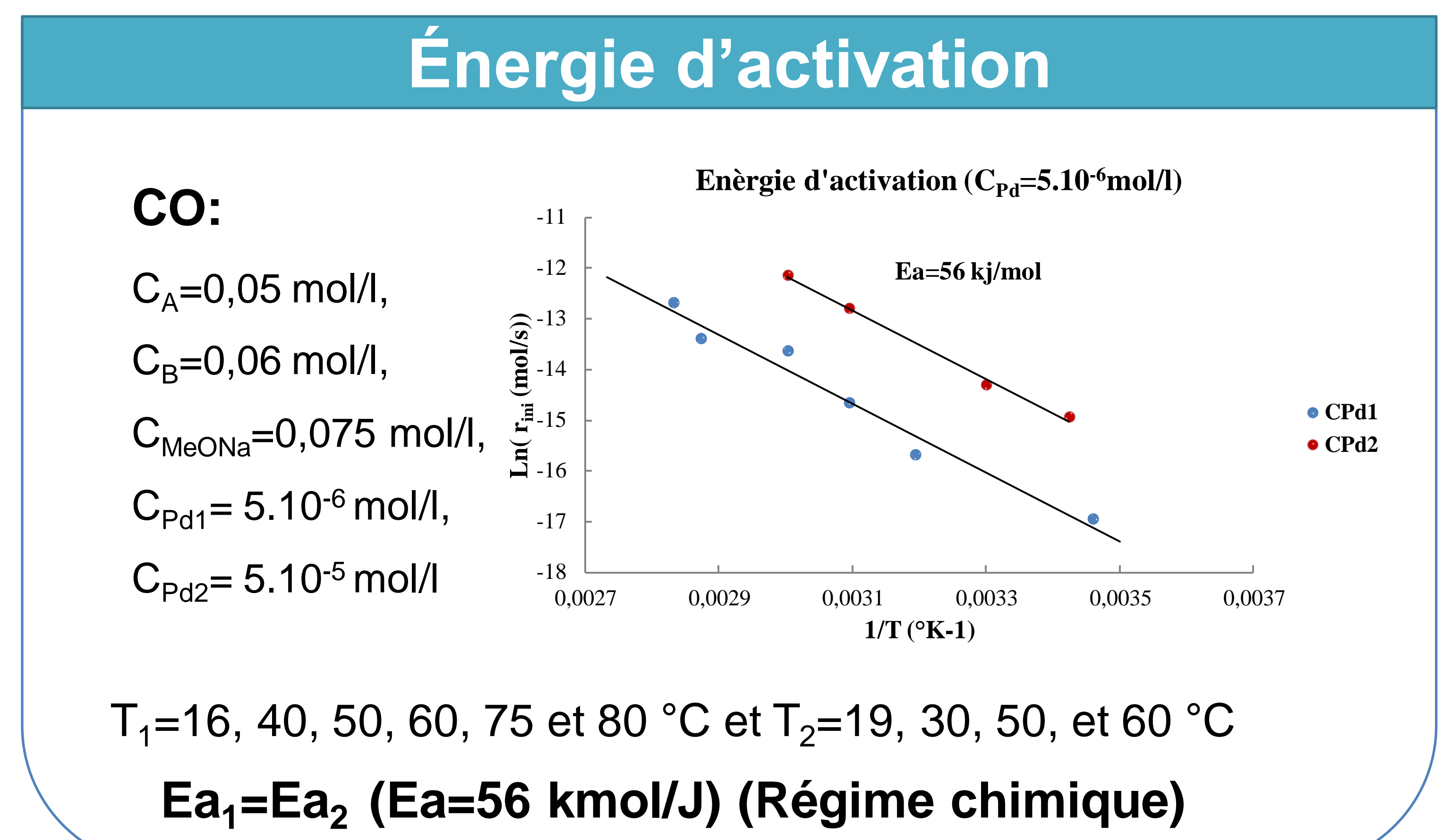
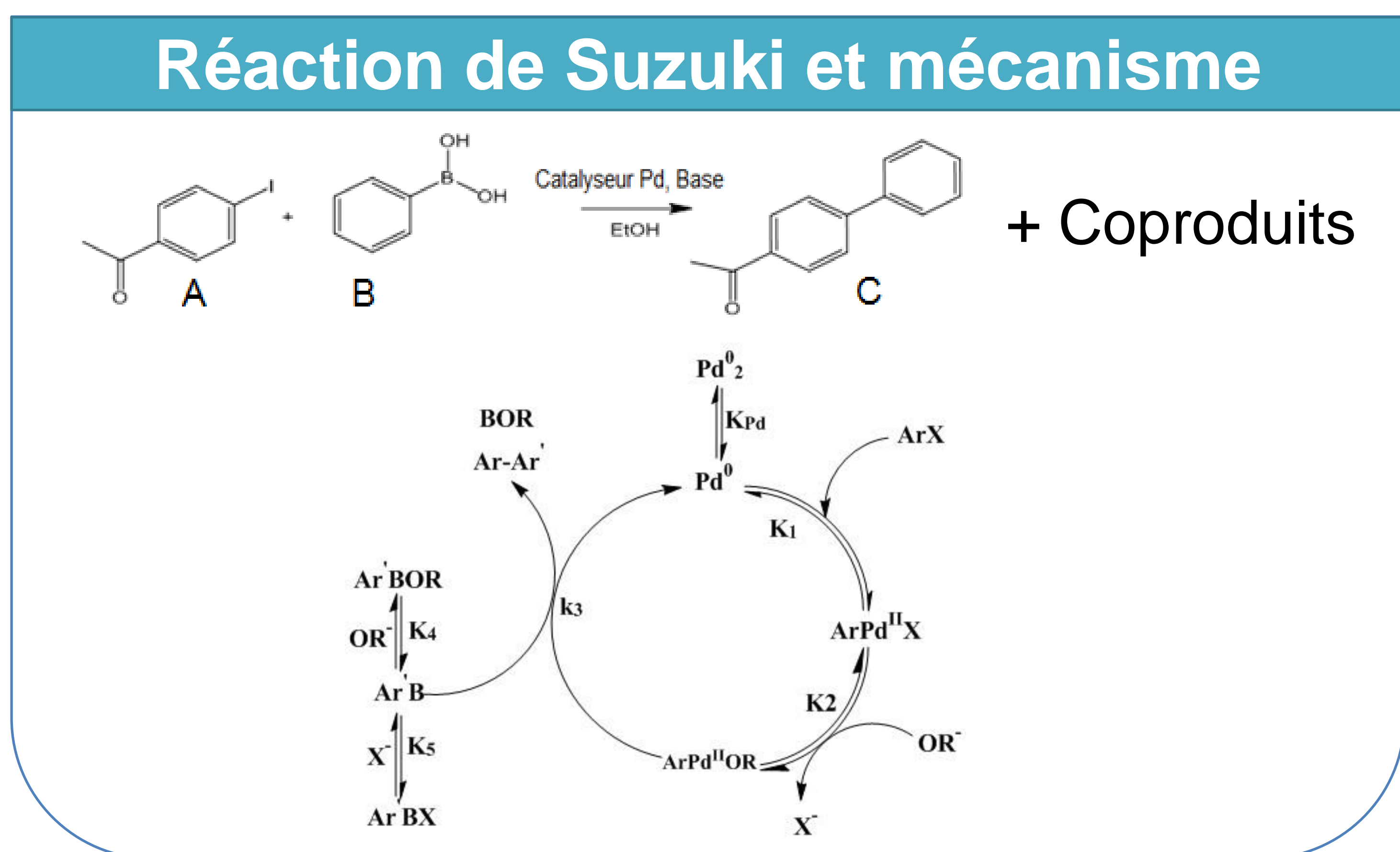
HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

But: Étude cinétique de la réaction et proposition d'une loi cinétique globale.

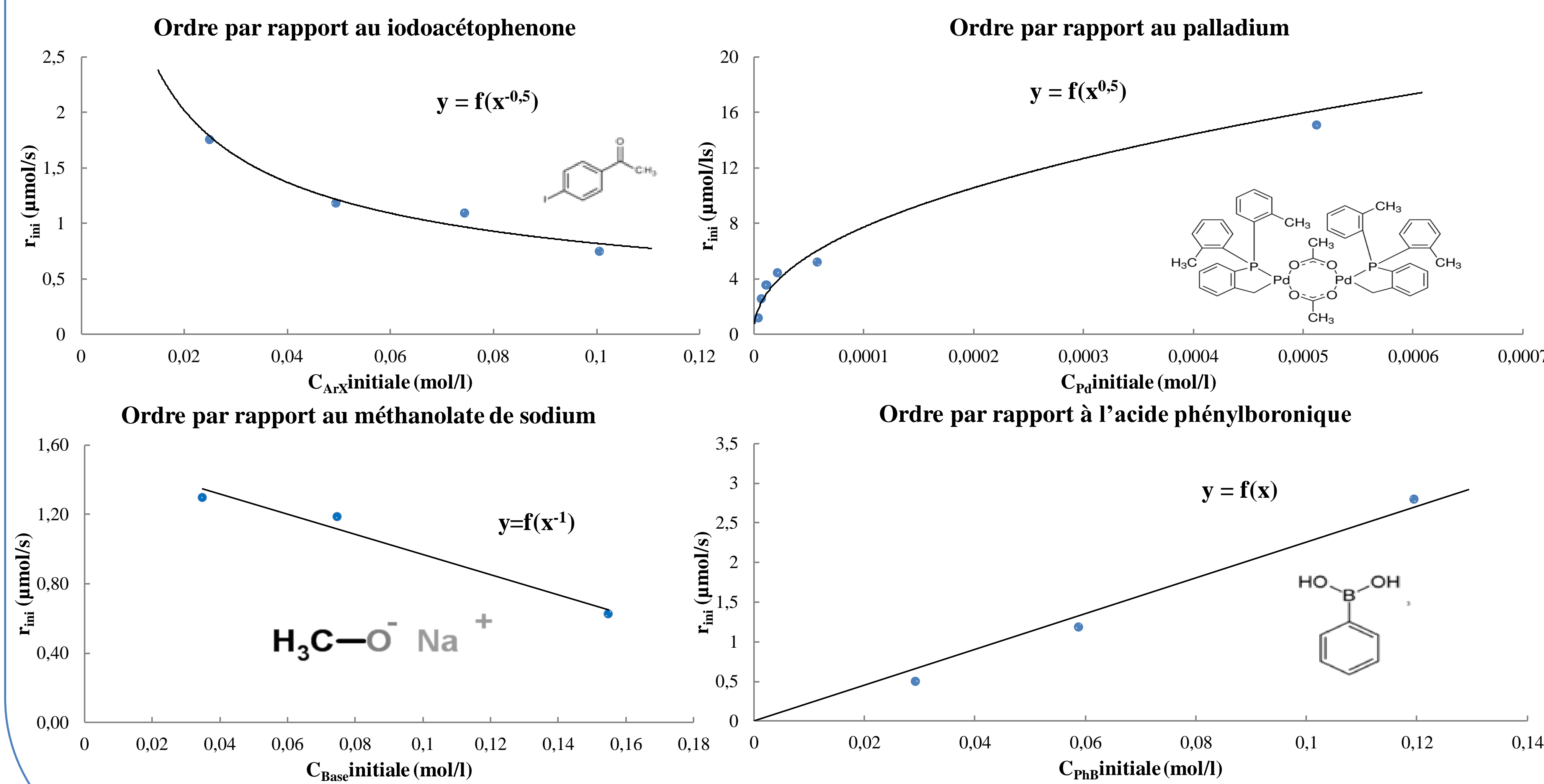
Challenge: Absence d'une étude cinétique globale dans la littérature, et débat sur l'origine et la nature de l'espèce active qui catalyse la réaction.

Travaux réalisés: Expériences dans plusieurs réacteurs (Batch et tubulaire) avec des conditions différentes de réactifs.



C. Amatore, A. Jutand, et G. Le Duc, « Kinetic Data for the Transmetalation/Reductive Elimination in Palladium-Catalyzed Suzuki–Miyaura Reactions: Unexpected Triple Role of Hydroxide Ions Used as Base », *Chem. Eur. J.*, vol. 17, n° 8, p. 2492-2503, févr. 2011.

Ordre par rapport au réactifs (A, B), base (MeONa) et catalyseur (Pd)



CO « A »: $C_{A1}= 0,025 \text{ mol/l}$, $C_{A2}=0,05 \text{ mol/l}$, $C_{A3}= 0,074 \text{ mol/l}$,
 $C_{A4}= 0,101 \text{ mol/l}$, $C_B=0,06 \text{ mol/l}$, $C_{\text{MeONa}}=0,075 \text{ mol/l}$, $C_{\text{Pd1}}= 5.10^{-6} \text{ mol/l}$, $T=60^\circ\text{C}$, $V_{\text{EtOH}}=20\text{ml}$.

CO « B »: $C_{B1}= 0,029 \text{ mol/l}$, $C_{B2}=0,059 \text{ mol/l}$, $C_{B3}= 0,119 \text{ mol/l}$,
 $C_A= 0,05 \text{ mol/l}$, $C_{\text{MeONa}}=0,075 \text{ mol/l}$, $C_{\text{Pd1}}= 5.10^{-6} \text{ mol/l}$, $T=60^\circ\text{C}$,
 $V_{\text{EtOH}}=20\text{ml}$.

CO « MeONa »: $C_{\text{MeONa1}}= 0,035 \text{ mol/l}$, $C_{\text{MeONa2}}=0,075 \text{ mol/l}$,
 $C_{\text{MeONa3}}= 0,155 \text{ mol/l}$, $C_A= 0,05 \text{ mol/l}$, $C_B=0,06 \text{ mol/l}$, $C_{\text{Pd1}}= 5.10^{-6} \text{ mol/l}$, $T=60^\circ\text{C}$, $V_{\text{EtOH}}=20\text{ml}$.

CO « Pd »: $C_{\text{Pd1}}= 4,31.10^{-6} \text{ mol/l}$, $C_{\text{Pd2}}= 7,11.10^{-6} \text{ mol/l}$, $C_{\text{Pd3}}= 1,08.10^{-5} \text{ mol/l}$,
 $C_{\text{Pd4}}= 1,16.10^{-5} \text{ mol/l}$, $C_{\text{Pd5}}= 2,15.10^{-5} \text{ mol/l}$,
 $C_{\text{Pd6}}= 5,80.10^{-5} \text{ mol/l}$, $C_{\text{Pd7}}= 5,12.10^{-4} \text{ mol/l}$, $C_A= 0,05 \text{ mol/l}$,
 $C_B=0,06 \text{ mol/l}$, $C_{\text{MeONa}}= 0,075 \text{ mol/l}$, $T=60^\circ\text{C}$, $V_{\text{EtOH}}=20\text{ml}$.

Loi cinétique

Loi empirique:
$$r = \frac{k C_{\text{Base}0} C_{\text{PhB}} C_{\text{Pd}0}^{0,5} C_{\text{ArX}}}{(1 + K C_{\text{ArX}} + K_b C_{\text{Base}0})^\alpha}$$

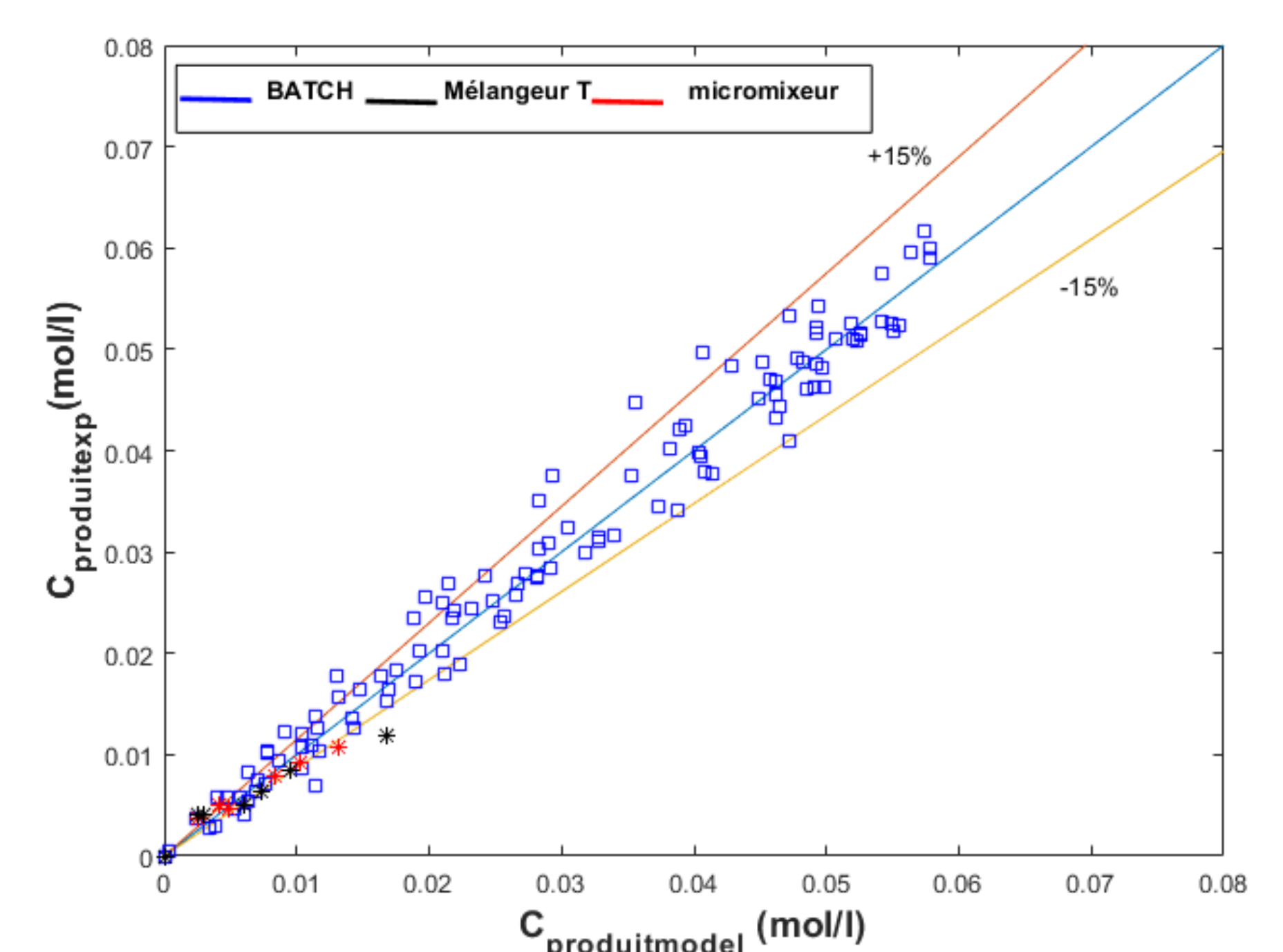
Avec: $k = k_0 e^{\frac{-E_a}{RT}}$

Estimation des paramètres par la fonction «lsqcurvefit» sur Matlab®, en utilisant un modèle BATCH:

k_0 [l/mol/min]	$8.36.10^{13}$
K	100
K_b	1
α	1,5

Conclusion et perspectives

- 15 manips Batch.
- 6 Manips en réacteur tubulaire avec mélangeur de type T.
- 7 Manips en réacteur tubulaire avec un micromixeur.



Perspectives:

-Trouver une explication pour l'ordre négatif en A et en Base???