

# Modélisation microscopique de l'évolution d'un système chimique

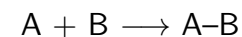
## Mécanisme réactionnel

Classe de Terminale – Spécialité SPC

- 1 Liaison covalente
- 2 Mécanismes réactionnels
- 3 Catalyseur
- 4 Mouvement de doublet, formalisme des flèches courbes

- 1 Liaison covalente
- 2 Mécanismes réactionnels
- 3 Catalyseur
- 4 Mouvement de doublet, formalisme des flèches courbes

Soit la réaction



Pour former la liaison covalente, A et B doivent être suffisamment proches → **choc efficace**

- énergie suffisante
- orientation des réactifs

**Agitation thermique :**

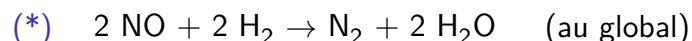
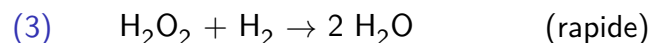
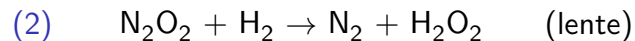
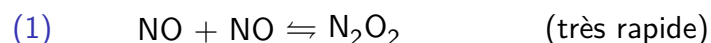
- tout bouge en permanence
- l'amplitude de l'agitation thermique augmente avec la température (facteur cinétique)

La **concentration des réactifs** est aussi un facteur cinétique

- plus la concentration est importante, plus probable est le choc

- 1 Liaison covalente
- 2 Mécanismes réactionnels
- 3 Catalyseur
- 4 Mouvement de doublet, formalisme des flèches courbes

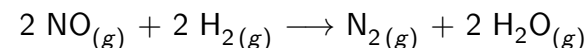
Il y a en réalité 3 **actes élémentaires successifs** :



Les étapes (1) à (3) forment un **mécanisme réactionnel**.

Dans cet exemple,  $\text{N}_2\text{O}_2$  et  $\text{H}_2\text{O}_2$  sont des **intermédiaires réactionnels** qui interviennent dans le mécanisme réactionnel, mais pas dans le bilan macroscopique (équation de réaction).

Considérons la réaction



Quelle est la **probabilité** que 2 + 2 = 4 molécules se rencontrent au même moment par choc efficace ?

Très faible !

Suffisamment faible pour que la réaction soit très difficile : on devrait donc avoir une réaction très très lente, or ce n'est pas le cas ! Pourquoi ?

L'équation de réaction est un **bilan macroscopique** à notre échelle humaine. Elle représente ce qui se passe, mais de manière globale. Qu'en est-il à l'échelle microscopique ?

#### Acte élémentaire

Processus qui se déroule à l'échelle microscopique, en une seule étape, **sans formation d'entités intermédiaires**.

#### Mécanisme réactionnel

Ensemble des actes élémentaires permettant de rendre compte, à l'échelle microscopique, du bilan macroscopique (équation de réaction).

#### Intermédiaire réactionnel

Entité produite au cours d'un acte élémentaire, puis **totalem** consommée dans un autre.

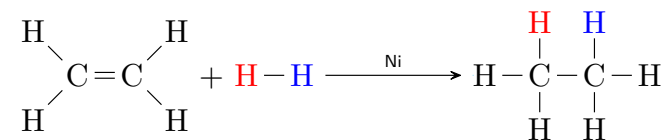
- 1 Liaison covalente
- 2 Mécanismes réactionnels
- 3 **Catalyseur**
- 4 Mouvement de doublet, formalisme des flèches courbes

- 1 Liaison covalente
- 2 Mécanismes réactionnels
- 3 Catalyseur
- 4 **Mouvement de doublet, formalisme des flèches courbes**

## Catalyseur

Espèce chimique qui, par sa **présence** ou son rôle d'**intermédiaire réactionnel**, accélère une réaction chimique.

- un catalyseur modifie le mécanisme réactionnel
- 1 étape limitante est remplacée par plusieurs étapes rapides
- si intermédiaire réactionnel, il est **totalemment régénéré** avant la fin de la réaction
- n'intervient pas dans l'équation de réaction (sauf au niveau de la flèche de la réaction)



Lors d'un acte élémentaire, la réaction élémentaire correspond à **au moins** un mouvement de **doublet d'électrons** entre un **site donneur** et un **site accepteur** (il peut y en avoir plusieurs, régulièrement 2).

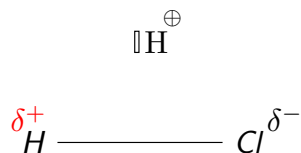
Un mécanisme réactionnel permet de suivre l'ensemble des mouvements des doublets d'électrons.

Ce mouvement est représentée par une **flèche courbe** qui part du site donneur et qui arrive au site accepteur.



Un site **accepteur** est un atome présentant un **déficit** d'électrons

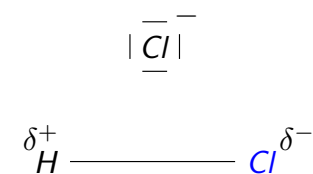
- charge **positive**
- charge partielle positive
- lacune électronique



Rappel : la liaison C-H est apolaire

Un site **donneur** de doublet d'électrons est,

- un atome ayant un **excès** d'électrons, soit une charge **négative** (partielle ou entière)
- une liaison **multiple**
- un atome portant un **doublet non liant**



les alcènes

les doublets non liants de l'oxygène O, de l'azote N, ...

Mécanisme réactionnel de  $\text{CH}_3\text{Cl} + \text{I}^- \rightarrow \text{CH}_3\text{I} + \text{Cl}^-$  ?

Mouvements de doublets  $\rightarrow$  représentation de Lewis

