

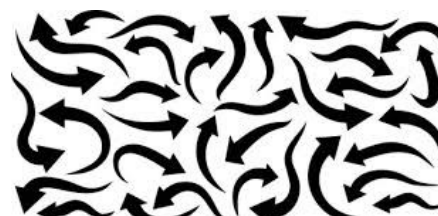
Modélisation microscopique de l'évolution d'un système

I- Mécanisme réactionnel

- 1 – Acte élémentaire
- 2 – Intermédiaire réactionnel (IR)
- 3 – Flèches Courbes

II- Modifier la vitesse d'une réaction

- 1 – Catalyseur
- 2 – Des facteurs cinétiques à l'échelle microscopique



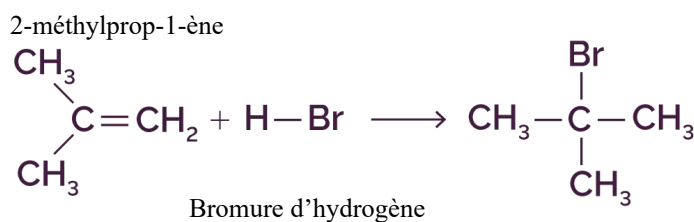
« Flèche, Flèche, Flèche ! »

Au fil du temps, la chimie a évolué d'une science descriptive vers une science explicative. Après avoir appris à reconnaître, nommer et classer les molécules grâce à la nomenclature systématique de l'UICPA, les chimistes se sont intéressés à comprendre comment les molécules se transforment lors des réactions chimiques.

La simple écriture d'une équation chimique globale ne suffit pas à expliquer ce qui se passe réellement à l'échelle microscopique. En effet, les réactions ne se font pas en un seul "saut", mais passent souvent par des étapes successives, faisant intervenir des **actes élémentaires** et parfois des **intermédiaires réactionnels** instables.

Pour représenter et comprendre ces transformations pas à pas, les chimistes utilisent des **mécanismes réactionnels**, illustrés par des **flèches courbes** qui traduisent les mouvements d'électrons responsables de la formation ou de la rupture de liaisons chimiques.

Étudier les mécanismes réactionnels permet de mieux comprendre comment une réaction chimique se déroule exactement. Cela aide aussi à maîtriser la vitesse des réactions. En effet, certaines substances comme les **catalyseurs** peuvent accélérer une transformation sans être consommées. De plus, les réactions ne se comportent pas toutes de la même façon.



Comment cette réaction se réalise-t-elle ? En une seule étape ?

I- Les molécules

Une réaction chimique a lieu lorsque deux entités chimiques se rencontrent. On peut décrire la réaction comme une réorganisation des atomes ou des charges électriques entre les deux entités. Cela implique donc la rupture de liaisons covalentes ou l'arrachement d'électrons, suivie de la formation de nouvelles liaisons ou de la récupération d'électrons.

1 – Acte élémentaire

On introduit la notion d'« acte élémentaire » pour définir une « vraie » réaction chimique, correspondant à une « équation » réelle à l'échelle microscopique (à l'échelle microscopique).

Vocabulaire

Un *choc efficace* est un choc **entre deux molécules** qui conduit à une modification.

La plupart des *chocs* entre les molécules, lors d'une réaction chimique, sont *inefficaces*. Il y a environ une chance sur dix milliards pour qu'un choc soit un *choc efficace*.

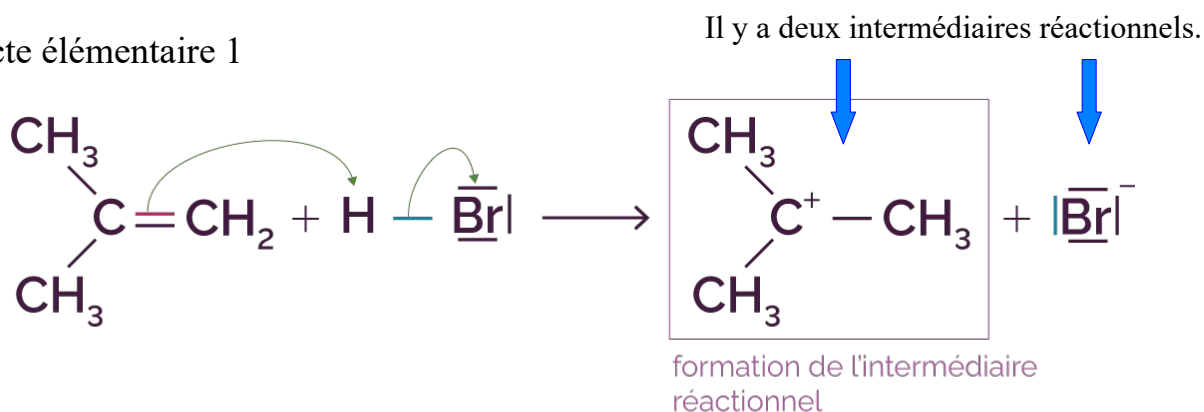
Définition

Un acte élémentaire est une réaction qui se déroule en une seule étape, sans formation d'espèces chimiques intermédiaires. Un acte élémentaire met en jeu une, deux ou, plus rarement, trois molécules.

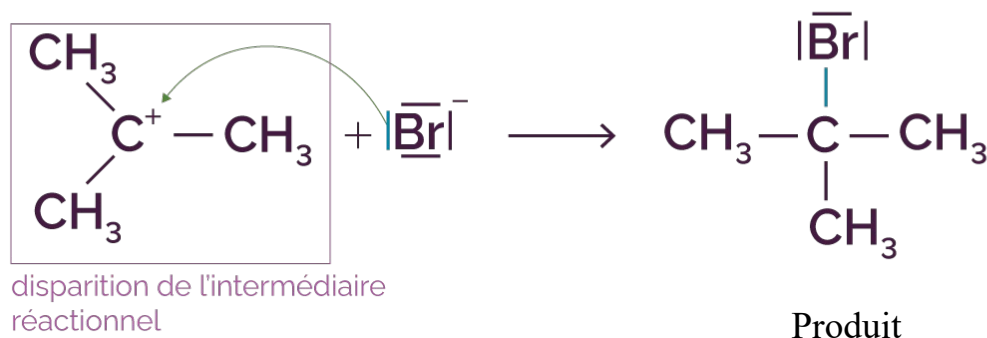
Un acte élémentaire est le résultat d'un choc efficace.

Remarque : On appelle également un processus élémentaire.

Acte élémentaire 1



Acte élémentaire 2



Cette illustration sera utilisée pour le reste de la partie I.

2 – Intermédiaire réactionnel (IR)

Définition

Un intermédiaire réactionnel est une entité chimique qui est produite par un acte élémentaire puis qui est totalement consommée dans un acte élémentaire suivant. Il n'apparaît pas donc dans l'équation de la réaction chimique.

Sa durée de vie est de l'ordre de 10^{-9} seconde.

Remarque : Un acte élémentaire n'est pas un catalyseur qui est présent à l'état initial et à l'état final.

On décompose une réaction chimique *complexe* en une succession d'actes élémentaires. On parle alors de **mécanisme réactionnel**.

3 – Flèches Courbes

Vocabulaire

- Un **site** est un lieu précis dans une entité chimique, atome : doublets d'électrons liants ou non liants.
- Un site **donneur** d'électrons est un site riche ou en excès d'électrons.
- Un site **accepteur** d'électrons est un site pauvre ou en déficit d'électrons.

Sites donneurs de doublet d'électrons	Sites accepteurs de doublet d'électrons	Modélisation par une flèche courbe
<ul style="list-style-type: none"> Atome porteur de doublet(s) non liant(s). Liaison polarisée. Liaison multiple. <p>Exemples :</p> $\begin{array}{c} \text{N}^- \\ \\ \text{C}=\text{C} \end{array}, \begin{array}{c} \text{P}^- \\ \\ \text{C}=\text{O} \end{array}, \begin{array}{c} \text{O}^- \\ \\ \text{C}=\text{O} \end{array}, \begin{array}{c} \text{S}^- \\ \\ \text{C}=\text{O} \end{array}$	<p>Atome porteur d'une lacune et/ou d'une charge électrique positive, partielle ou non.</p> <p>Exemples :</p> $\text{H}^+, \text{Li}^+, \begin{array}{c} +q \\ \\ \text{C}-\text{O}^- \end{array}, \begin{array}{c} +q \\ \\ \text{C}-\text{Cl}^- \end{array}, \begin{array}{c} +q \\ \\ \text{C}=\text{O}^- \end{array}$	<p>Modélisation par une flèche courbe</p> <p>Modélise la formation C-I</p> <p>Exemples :</p> $\text{I}^- + \text{H}-\text{C}-\text{Cl} \rightarrow \text{H}-\text{C}-\text{I} + \text{Cl}^-$ <p>Modélise la rupture C-Cl</p>

Définition

Une flèche courbe symbolise le déplacement d'un doublet d'électrons au cours d'un acte élémentaire.

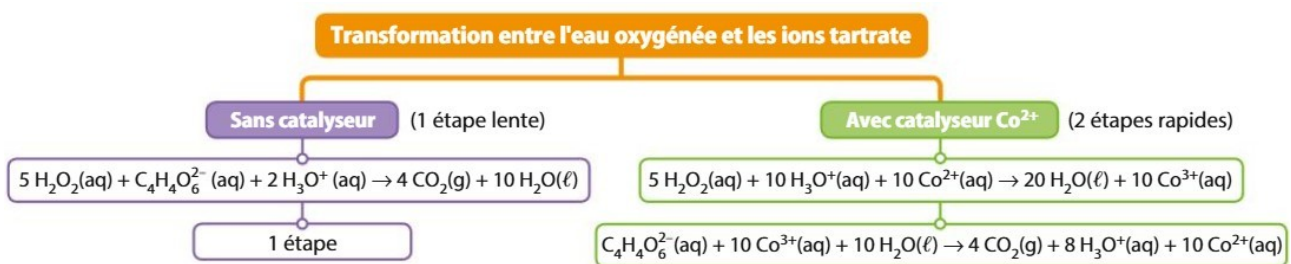
Une **flèche courbe** part toujours d'un **site donneur d'électrons** vers un **site accepteur d'électrons**. Elle représente la rupture et la formation des liaisons.

II- Modifier la vitesse d'une réaction

Parfois, les réactions chimiques sont très lentes. Dans certains cas, c'est ce que l'on souhaite, mais dans d'autres, ce n'est pas le cas. Notamment dans l'industrie chimique, on cherche à accélérer la vitesse des réactions afin de gagner du temps et réduire les coûts.

1 – Catalyseur

L'ajout d'un catalyseur modifie le mécanisme réactionnel. Il augmente le nombre d'actes élémentaires et crée des intermédiaires réactionnels qui n'existent pas dans le mécanisme réactionnel initial.



2 – Des facteurs cinétiques à l'échelle microscopique

Pour qu'il y ait une réaction, les entités doivent s'entrechoquer. Or, la plupart des chocs sont inefficaces. Une façon simple d'augmenter la vitesse des transformations est d'augmenter le nombre de chocs (efficaces ou non).

- Chauffer le milieu permet d'augmenter l'agitation thermique du milieu réactionnel.
→ Plus l'agitation thermique est importante, plus il y a de chocs entre les entités. Ainsi, la vitesse des entités lors d'un choc est plus grande, et la probabilité que le choc soit efficace augmente.
- Une autre solution est d'augmenter la concentration des réactifs. Cela induit logiquement que les entités se rencontrent plus souvent dans leurs mouvements aléatoires au sein du solvant (mouvement brownien). Les chocs sont donc davantage violents, et le nombre de chocs efficaces augmente.
→ Plus la concentration des réactifs augmente, plus les entités ont de chances d'avoir des chocs efficaces.