

2. Modélisation microscopique

Le **mécanisme** d'une réaction est la description fidèle du processus réactionnel à l'échelle moléculaire : il indique quelles liaisons sont rompues et formées, dans quel ordre, en combien d'étapes, etc.

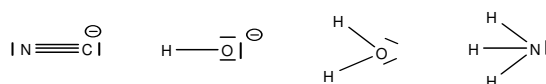
A la fin de chaque étape du mécanisme, on obtient un **intermédiaire réactionnel** (sauf lors de la dernière étape) qui n'apparaît pas dans le bilan de la réaction.

On distingue deux types de réactifs lors de la formation de nouvelles liaisons.

➤ Réactifs nucléophiles

Ils apportent les deux électrons nécessaires à la nouvelle liaison et attaquent, par ce doublet, les sites de faible densité électronique (sites électrophiles) du substrat.

Ces réactifs sont donc tous des bases de Lewis : **entité ayant un ou plusieurs doublets non liants**. Ils peuvent être de nature anionique ou moléculaire.



➤ Réactifs électrophiles

Ce sont des composés ayant une lacune électronique, donc des **acides de Lewis**, chargés positivement ou non. Ils réagissent avec les sites de forte densité électronique (sites nucléophiles) du substrat.



Par extension, tout carbone déficitaire en électrons (porteur d'une charge δ^+), sans nécessairement posséder de lacune, est électrophile.

Formalisme des flèches : dans les réactions, les flèches sont employées pour représenter le déplacement formel des électrons **d'un doublet d'électrons vers un atome**.

déplacement d'un doublet d'électrons

déplacement d'un électron célibataire

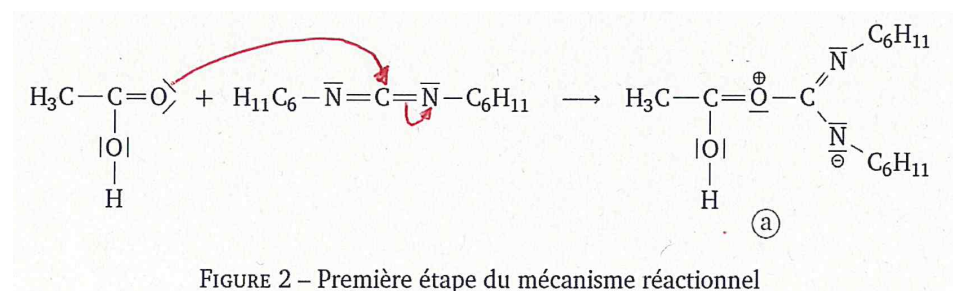
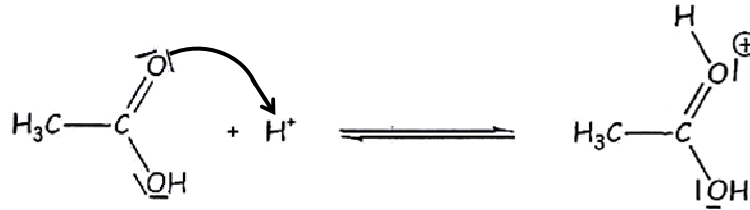


FIGURE 2 – Première étape du mécanisme réactionnel

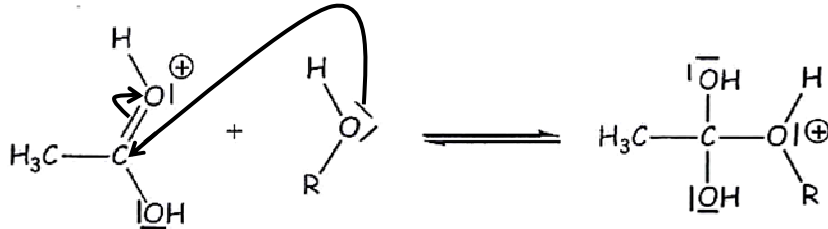
➡ Modification du mécanisme par ajout d'un catalyseur

Exemple de l'estérification en présence du catalyseur H^+ qui est régénéré en fin de mécanisme

Etape 1 :



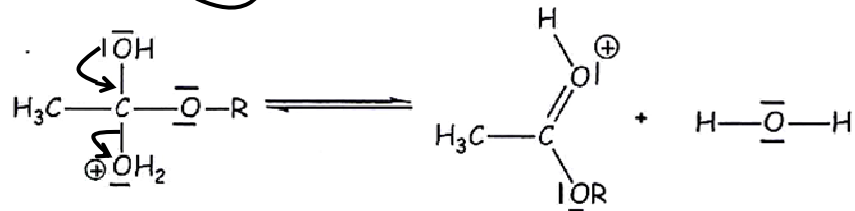
Etape 2 :



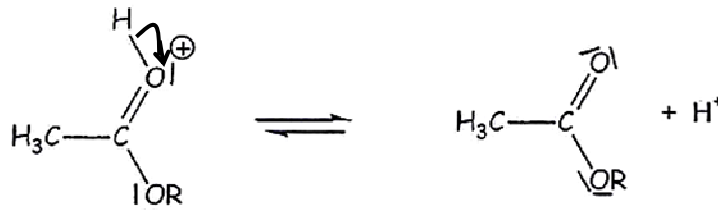
Etape 3 :



Etape 4 :



Etape 5 :



➡ Interprétation microscopique de l'influence des facteurs cinétiques

Plus la **température (agitation thermique)** et la **concentration (nombre de molécules)** sont **élevées**, plus le **nombre de chocs** par unité de temps et de volume est **élevé**. La vitesse de réaction est donc plus élevée.

