

Mécanismes réactionnels

Tout est une question d'électrons

Une transformation chimique ne consiste pas en une simple transformation de réactifs en produits, comme semble l'indiquer l'équation de réaction qui la résume, mais résulte d'un processus complexe.

Initié par un choc, un mécanisme réactionnel peut être décomposé en une succession d'étapes appelées réactions élémentaires. Au cours de ces réactions élémentaires, des électrons sont transférés d'une espèce chimique à une autre, soit de façon « indépendante », comme lors d'une réaction d'oxydoréduction, soit par doublets d'électrons.

Electrophile vs. nucléophile

1. Notion d'électronégativité.

L'électronégativité χ d'un atome traduit sa tendance à attirer un doublet liant vers lui.

Le carbone sert de référence en chimie organique. Si un élément a une électronégativité plus élevée que le carbone, il est considéré comme électro-négatif. S'il a une électronégativité plus faible que le carbone, il est considéré comme électro-positif.

2. Polarité d'une liaison.

Lorsqu'il existe une différence d'électronégativité entre deux éléments A et B liés par un doublet liant, le nuage électronique formant la liaison n'est plus symétrique. Il se forme alors un

dipôle : $\overset{\delta+}{\text{A}} - \overset{\delta-}{\text{B}}$, avec $\delta < 1$.

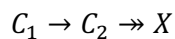
Chacun des deux atomes porte alors une charge électrique partielle $q = \pm\delta e$, et la liaison est dite polarisée.

3. Notion d'induction.

La polarisation d'une liaison a une influence sur son environnement.

Soit la chaîne $C_1 - C_2 - X$, avec $\chi_X > \chi_C$.

La polarisation de la liaison $C_2 - X$ induit un effet de polarisation sur la liaison voisine $C_1 - C_2$, qui se polarise à son tour, toutefois plus faiblement.



4. Donneur ou accepteur.

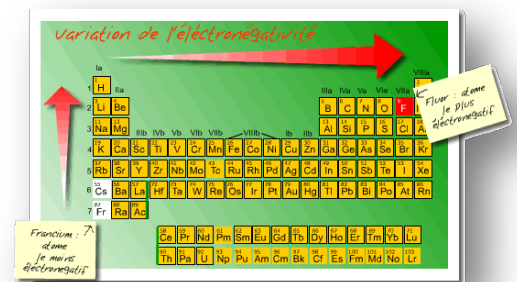
Au sein d'une espèce chimique, un atome pourra être caractérisé en fonction de la réponse qu'il apporte à la question suivante : Est-il susceptible de capter ou de céder des électrons ?

Un atome portant une charge (même partielle) positive a tendance à vouloir capter des électrons. Il est dit électrophile.

Un atome portant une charge (même partielle) négative a tendance à vouloir céder des électrons. Il est dit nucléophile.

Rq : Un atome possédant des doublets non-liants est généralement nucléophile.

Une réaction élémentaire consiste généralement en l'interaction entre un site nucléophile et un site électrophile.

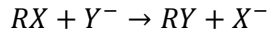




3 familles de mécanismes

1. Substitution.

Une substitution consiste à modifier une molécule organique en remplaçant un groupement d'atomes de la molécule par un autre.

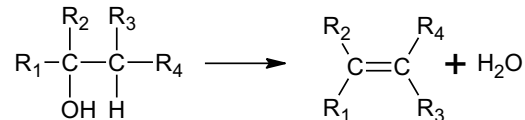


Une substitution est souvent nucléophile, c'est-à-dire que le substituant est nucléophile.

Rq : « Y » n'est qu'une notation indiquant le caractère « nucléophile » du substituant. Ça peut être un ion, mais aussi une molécule non chargée possédant au moins un doublet non-liant.

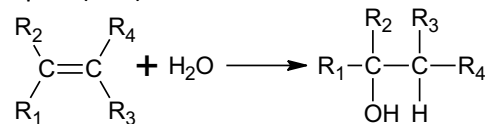
2. Élimination.

Une élimination consiste à modifier une molécule organique en lui retirant un groupe d'atomes.



3. Addition.

Une addition consiste à modifier une molécule organique en lui ajoutant un groupe d'atomes. Elle se fait principalement sur les liaisons éthyliques (C=C).



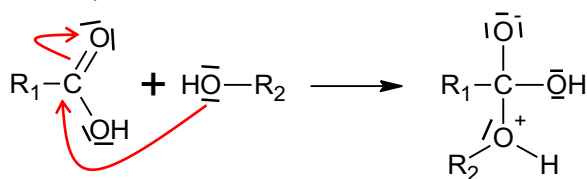
Mécanisme de l'estérification

La réaction d'estérification est une réaction entre un acide carboxylique et un alcool.

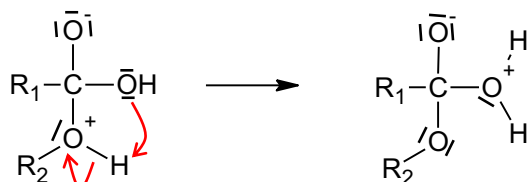
Pour initier le mécanisme, on peut remarquer que l'atome de carbone du groupement carboxyle est électrophile, alors que l'oxygène de la fonction alcool est nucléophile.

Chaque flèche représente le mouvement d'un doublet d'électrons, toujours orienté vers un atome. Cela peut être un doublet non liant qui se transforme en doublet liant, ou un doublet liant qui devient un doublet non liant.

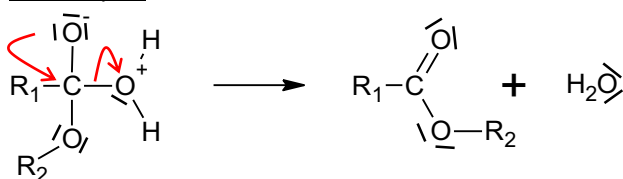
1^{ère} étape :



2^{ème} étape :



3^{ème} étape :



Rq : L'estérification suit un mécanisme de substitution, dont chacune des étapes est réversible.