

Terminale Spécialité Physique-Chimie	Thème : Constitution et transformations de la matière	M.KUNST-MEDICA MAJ 07/2024	
<b><u>Chapitre 14 : Modélisation microscopique de l'évolution d'un système</u></b>		Cours livre p 97 à 100	

## Objectifs et trame du chapitre (4 séances)

### I. Interprétation microscopique de l'influence des facteurs cinétiques

#### Cours (15 minutes) (début vidéo de cours + référence au mouvement Brownien)

*Capacités visées :*

- Interpréter l'influence des concentrations et de la température sur la vitesse d'un acte élémentaire, en termes de fréquence et d'efficacité des chocs entre entités.

### II. Mécanisme réactionnel et modélisation microscopique

#### Activité de modélisation n°14.1 : Modéliser une transformation par un mécanisme réactionnel (1 séance)

*Capacités visées :*

- A partir d'un mécanisme réactionnel fourni, identifier un intermédiaire réactionnel, un catalyseur et établir l'équation de la réaction qu'il modélise au niveau microscopique.

#### Activité de modélisation n°14.2 : Représenter les flèches courbes d'un acte élémentaire (1 séance)

*Capacités visées :*

- Représenter les flèches courbes d'un acte élémentaire, en justifiant leur sens.

### Synthèse des activités :

#### Vidéo : Bilan de cours le la modélisation microscopique de l'évolution d'un système (Stella)

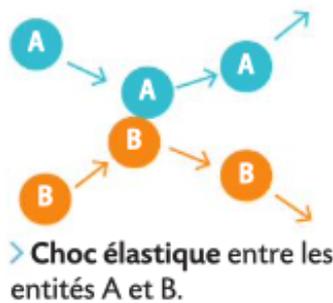
<https://www.youtube.com/watch?v=ETVjaxuNwn8>



## I. Interprétation microscopique de l'influence des facteurs cinétiques

Les entités d'un système sont en mouvement incessant, aléatoire et désordonné, appelé mouvement brownien. Elles peuvent entrer en collision entre elles. Dans la théorie des collisions, ces chocs peuvent être à l'origine de réactions chimiques.

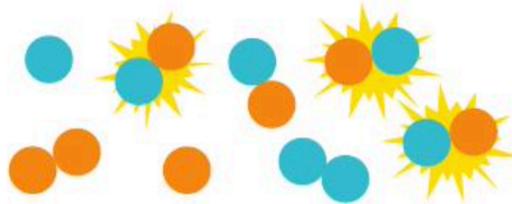
- Pour qu'une réaction ait lieu :
  - les entités constituant les réactifs doivent entrer en **collision** ;
  - les **chocs doivent être efficaces**, c'est-à-dire permettre la formation, à l'échelle macroscopique, des produits à partir des réactifs.



- Plus la **température d'un système chimique** est élevée, plus l'agitation thermique des entités est importante et plus la fréquence des chocs, et donc des chocs efficaces, est grande à l'échelle microscopique.
- Plus les **concentrations des réactifs** sont élevées, plus la fréquence des chocs, et donc des chocs efficaces entre les entités constituant les réactifs, est grande à l'échelle microscopique.



> Faible concentration des réactifs : peu de chocs efficaces entre les entités.



> Forte concentration des réactifs : augmentation du nombre de chocs efficaces entre les entités.

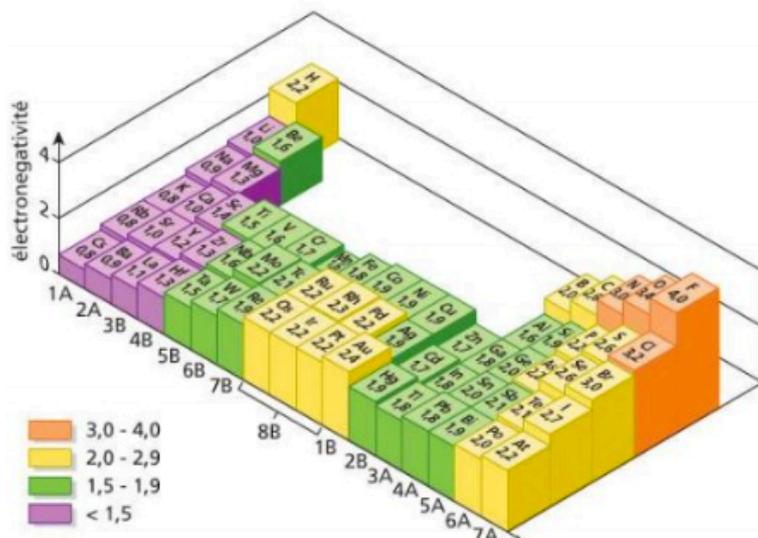
## II. Mécanisme réactionnel et modélisation microscopique

Pour comprendre et modéliser les réactions, le chimiste organicien décompose les réactions en étapes appelées **acte élémentaires**. Chaque acte décrit le déplacement d'électrons et d'atomes provoquant la formation ou la rupture de liaisons. L'ensemble de ces étapes s'appelle un mécanisme réactionnel.

### 1 – Polarisation de liaisons

Une liaison covalente simple est une mise en commun de deux électrons entre deux atomes. Au sein de cette liaison, les deux électrons sont attirés vers l'atome le plus électronégatif. L'atome le plus électronégatif possède donc un excès d'électrons, représenté par une charge partielle négative  $\delta^-$ . A l'inverse, l'atome le moins électronégatif présente un défaut d'électrons représenté par une charge partielle positive  $\delta^+$ . La liaison est alors dite **polarisée si la différence d'électronégativité est supérieure ou égale à 0,4**.

La polarité d'une liaison se déduit des électronégativités des atomes impliqués.



### 2 – Sites donneurs et sites accepteurs

- Un site **accepteur** de doublet d'électrons est un atome présentant un défaut d'électrons, c'est-à-dire une charge positive (partielle  $\delta^+$  ou entière).
- Un site **donneur** de doublet d'électrons est, suivant les cas :
  - un atome présentant un excès d'électrons, c'est-à-dire une charge négative (partielle  $\delta^-$  ou entière)
  - une liaison multiple
  - un atome portant un doublet non liant

Exemples : identifier les sites donneurs et accepteurs pour les molécules suivantes : 1-chlorobutane, hex-4-èn-2-amine, acide propanoïque et l'ion hydrogène.

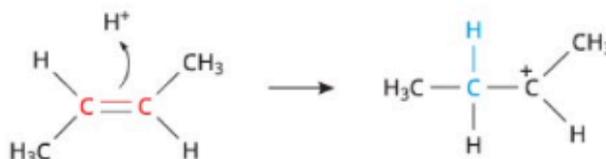
### 3 - Représentation du mouvement d'un doublet d'électrons et mécanisme réactionnel

Au cours d'une étape d'un mécanisme réactionnel, les mouvements de doublets d'électrons traduisant la formation et la rupture de liaisons chimiques sont représentés par des flèches courbes.

- Lors de la **formation d'une liaison covalente**, les électrons vont du **site donneur vers le site accepteur** de doublet d'électrons. Ce mouvement se représente à l'aide d'une flèche courbe allant du site donneur vers le site accepteur.
- Lors de la **rupture d'une liaison covalente**, les électrons de la liaison rompue vont **vers l'atome le plus électronégatif**. Ce mouvement se représente à l'aide d'une flèche courbe allant de la liaison à rompre vers l'atome le plus électronégatif.

Exemples : Addition du bromure d'hydrogène ( $\text{Br}^-$  ;  $\text{H}^+$ ) sur le but-2-ène :

Etape 1 : les électrons vont du site donneur « double liaison » au site accepteur « hydrogène »



Etape 2 : le nouveau site accepteur « carbone » peut recevoir les électrons du site donneur « brome »



### 4 – Intermédiaire réactionnel

Sur l'exemple précédent, on voit apparaître une molécule qui n'est ni un réactif, ni un produit de l'équation bilan. Il apparaît en tant que produit dans au moins un acte élémentaire et en tant que réactif dans au moins un autre acte élémentaire. On l'appelle alors **intermédiaire réactionnel**.

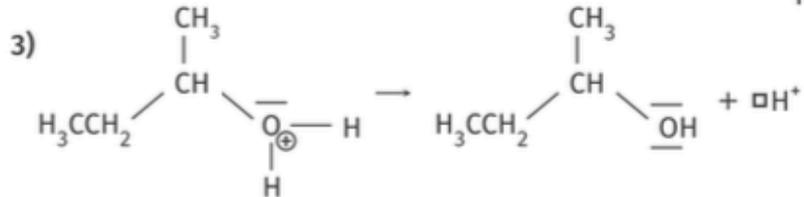
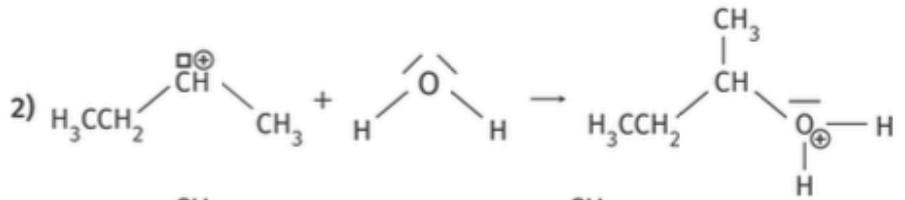
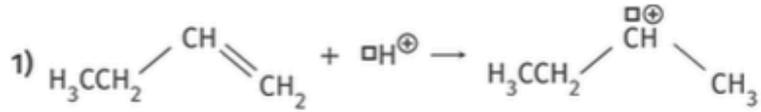
### 5 – Catalyseur

Un catalyseur est une espèce qui accélère une réaction chimique. Pour cela, il modifie les actes élémentaires d'une réaction. Une espèce chimique sera considérée comme un catalyseur si elle est régénérée au cours de la réaction.

Sur le mécanisme suivant :

→ Représenter les flèches courbes expliquant chaque étape

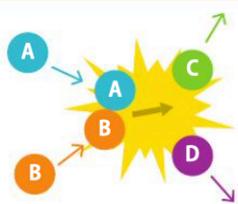
→ Entourer les intermédiaires réactionnels en vert et le catalyseur en rouge



# L'essentiel

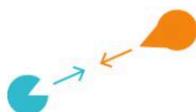
## L'interprétation microscopiques des réactions

### Chocs efficaces



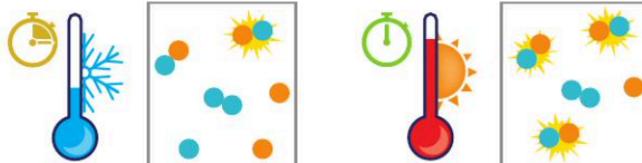
Les entités constituant les réactifs doivent **entrer en collision** :

- avec une **énergie suffisante** ;
- avec une **orientation favorable**.

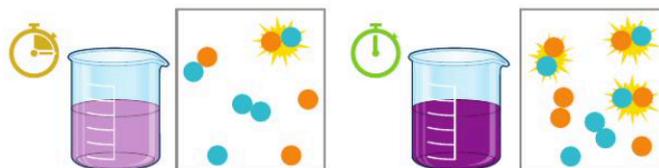


### Facteurs cinétiques

- Le nombre de chocs efficaces augmente avec la température.



- Le nombre de chocs efficaces augmente avec la concentration des réactifs.



## Les mécanismes réactionnels et la modélisation microscopique

### Mécanisme réactionnel

### Ensemble d'actes élémentaires

#### Acte élémentaire

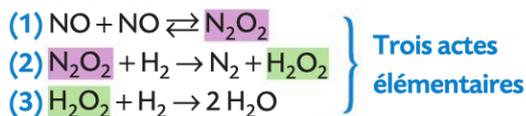
Processus qui se déroule à l'échelle **microscopique**, en une seule étape, sans formation d'entités intermédiaires.

Exemple :

- Équation de la réaction :  

$$2 \text{NO}(\text{g}) + 2 \text{H}_2(\text{g}) \rightarrow \text{N}_2(\text{g}) + 2 \text{H}_2\text{O}(\text{g})$$

- Mécanisme réactionnel :



#### Catalyseur

- Modifie le mécanisme réactionnel.
- Augmente généralement le nombre d'actes élémentaires d'un mécanisme réactionnel.
- Il est consommé puis totalement régénéré.

#### Intermédiaire réactionnel

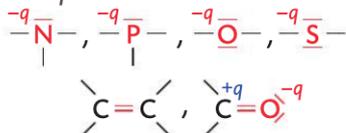
Entité formée au cours d'un acte élémentaire puis totalement consommée dans un autre.

Exemples :  $\text{N}_2\text{O}_2$  et  $\text{H}_2\text{O}_2$ .

#### Sites donneurs de doublet d'électrons

- Atome porteur de **doublet(s) non liant(s)**.
- Liaison polarisée.
- Liaison multiple.

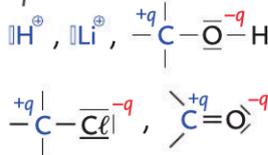
Exemples :



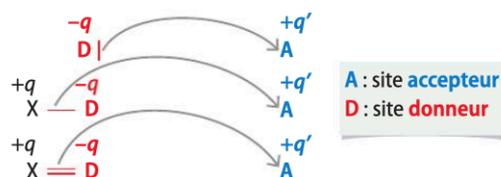
#### Sites accepteurs de doublet d'électrons

Atome porteur d'une **lacune** et/ou d'une **charge électrique positive**, partielle ou non.

Exemples :



#### Modélisation par une flèche courbe



Modélise la formation C-I

