

Les mécanismes réactionnels

C2 – Chapitre 6

I. Mécanisme réactionnel

Le mécanisme réactionnel d'une réaction chimique est l'**ensemble des actes élémentaires** traduisant le déroulement de la réaction à l'échelle microscopique.

II. Acte élémentaire

1. Définition

Un acte (ou processus, ou étape) élémentaire est une réaction chimique dont l'équation bilan traduit la **réalité microscopique**.

2. Propriétés

- Petit nombre d'entités en jeu (**molécularité**) (1 ou 2, 3 maximum)
- Changement minimal de **structure** (1 ou 2 liaisons rompues et créées)
- Suit la loi de **Van't Hoff** $v = k \prod [B_i]^{\alpha_i}$ et $\lambda_i = \alpha_i$
- Suit la loi d'**Arrhenius** $k = A e^{-\frac{E_a}{RT}}$
- Peut se faire dans les **2 sens**

III. Vitesse nette de production

$$v_B = \frac{d[B]}{dt} = \sum \left(\frac{d[B]}{dt} \right)_i = \sum v_{B_i} \nu_i$$

IV. Réactions parallèles

Ce sont 2 réactions se déroulant simultanément avec au moins 1 réactif en commun.

- **Concurrentes** (1 réactif commun) $A + B_1 \rightarrow C_1$ $A + B_2 \rightarrow C_2$
- **Jumelles** (tous les réactifs communs) $A + B \rightarrow C_1$ $A + B \rightarrow C_2$

V. Intermédiaire réactionnel (I.R.)

1. Définition

Un intermédiaire réactionnel est une espèce chimique qui **n'apparaît pas dans l'équation de la réaction**. Il est formé dans un acte élémentaire et est consommé dans un autre.

2. Principaux IR

Carbocation : A^+

Carbanion : A^-

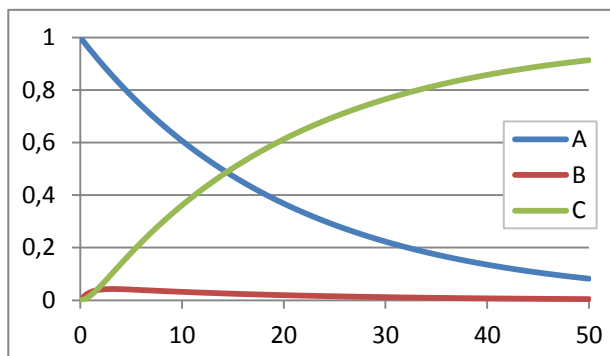
Radical : A^\bullet

3. Approximation de l'état quasi-stationnaire (A.E.Q.S.)



Si $k_1 \ll k_2$, après une période d'induction très courte, la concentration de l'I.R. reste très faible et quasiment constante.

$$[I.R.] = 0 \quad \text{et} \quad \frac{d[I.R.]}{dt} = 0$$

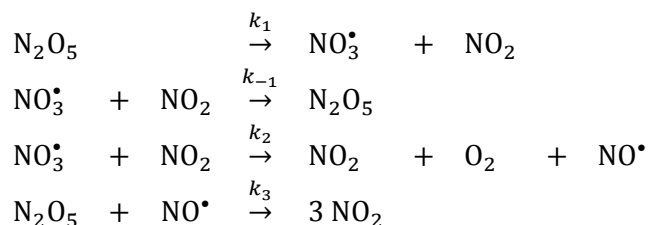


VI. Les réactions par stades

1. Définition

Au cours d'un mécanisme par stades (ou à séquence ouverte), un I.R. est formé dans une étape et consommé dans une autre étape sans être régénéré.

2. Exemple



VII. Les réactions en chaîne

1. Définition

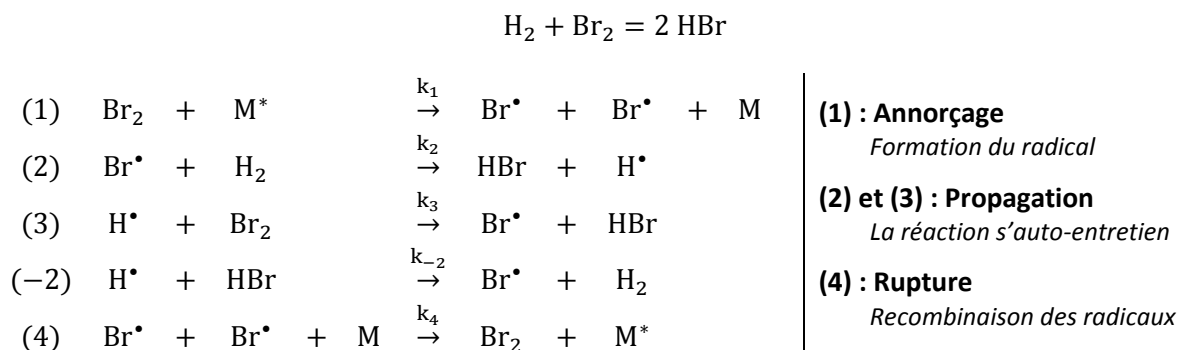
Au cours d'un mécanisme en chaîne, un I.R. est créé à partir des réactifs dans une étape d'amorçage.

Il est consommé dans une étape et régénéré dans une autre (étapes de propagation de chaîne).

Il est enfin consommé dans des étapes de rupture de chaîne sans nouvelle création d'I.R.

- Chaîne droite : 1 I.R. donne 1 I.R.
- Chaîne ramifiée : 1 I.R. donne plusieurs I.R.

2. Exemple de chaîne droite



M est un partenaire de choc : il rend possible la rupture.