

INTERPRÉTATION DES TRANSFORMATIONS EN CHIMIE ORGANIQUE

En chimie organique, lors de réactions de substitution, d'addition ou d'élimination, des interactions se produisent entre certains atomes. Comment interpréter ces interactions à l'échelle microscopique ?

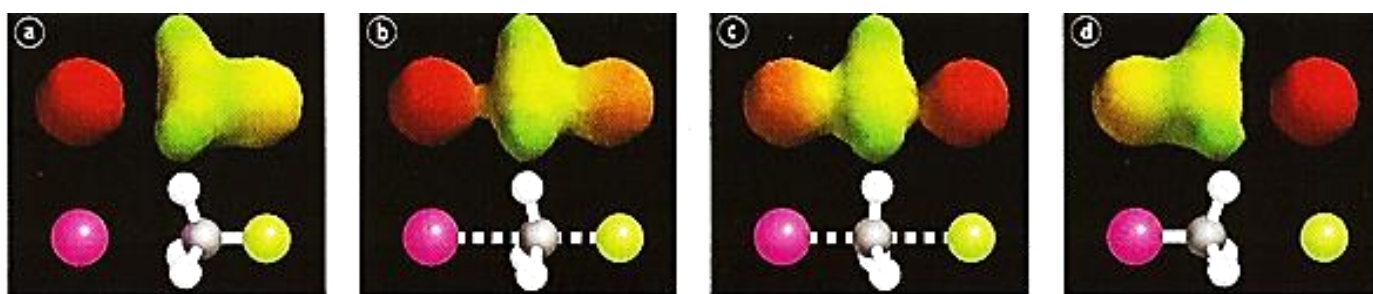
1) SITE ACCEPTEUR OU DONNEUR DE DOUBLET D'ÉLECTRON :

Document 1 :

Que se passe-t-il entre le moment où les réactifs sont mis en présence et celui où apparaissent les produits ? La réponse nécessite un changement d'échelle : il faut s'intéresser au devenir des molécules au cours de la réaction, alors que les événements auxquels elles participent sont extrêmement brefs (de l'ordre de la dizaine de picosecondes). A l'aide de données expérimentales et d'éléments théoriques en leur possession, les chimistes recréent donc un « scénario » hypothétique : il présente les événements dans l'ordre où ils se produisent, en détaillant les différentes étapes de rupture et de formation des liaisons au sein des molécules. Cette modélisation du déroulement d'une réaction est le **mécanisme réactionnel**.

Étudions par exemple la réaction suivante : $I^- + H_3C-Cl \longrightarrow I-CH_3 + Cl^-$

Les images ci-dessous proposent deux représentations du déroulement de la réaction au niveau moléculaire. Une simulation numérique (en haut) indique les déformations du nuage électronique des entités pendant la réaction. Le modèle moléculaire (en bas) figure les liaisons et la disposition des atomes dans l'espace.



Modélisation de la réaction entre les molécules I^- et CH_3-Cl . Lors d'un choc entre les deux entités [a], la liaison iode-carbone se forme pendant que la liaison carbone-chlore se rompt [b et c]. Les entités produites, $I-CH_3$ et Cl^- , s'éloignent ensuite l'une de l'autre [d].

Q1) A quelle grande catégorie appartient cette réaction ?

Q2) Établir les représentations de Lewis des deux réactifs (cf AP7).

Données : $Z(H) = 1$; $Z(C) = 4$; $Z(I) = 53$; I et Cl appartiennent à la famille des halogènes (7^{ème} colonne)

Q3) Justifier la polarisation de la liaison C—Cl et indiquer le signe des charges partielles portées par les atomes C et Cl sur la représentation de Lewis du chlorométhane. Données : $\chi(H) = 2,2$; $\chi(C) = 2,55$; $\chi(Cl) = 3,16$ (cf AP7)

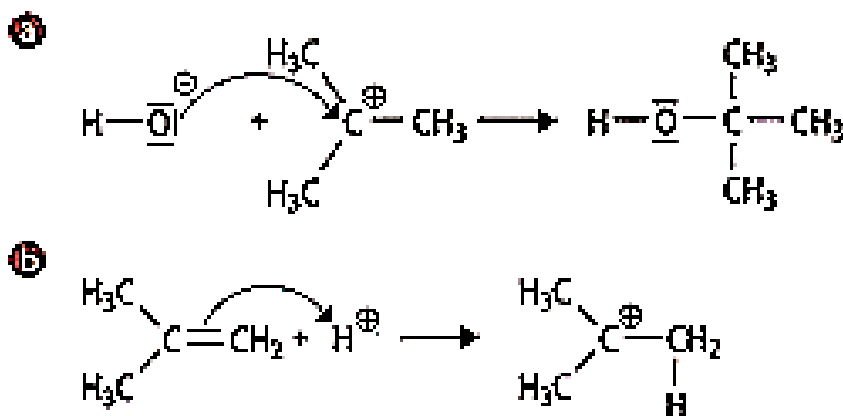
L'ion iodure est un site « donneur » d'électrons car il est riche en électrons. L'atome de carbone du chlorométhane est un site « accepteur » d'électrons car il présente un défaut d'électron.

Q4) Proposer une interprétation de la réaction du doc1 à partir des sites donneur et accepteur d'électrons impliqués.

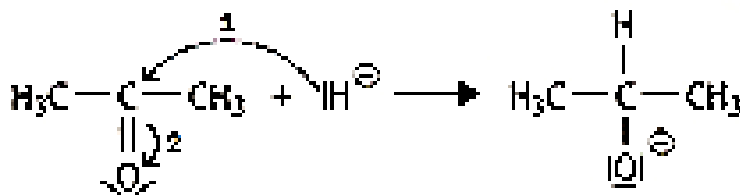
2/ LE MODÈLE DE LA FLÈCHE COURBE :

Document 2 :

En se basant sur des observations expérimentales, les chimistes élaborent un mécanisme réactionnel qui décrit dans le détail, et à l'échelle moléculaire, le déroulement de chaque étape d'une transformation chimique, en particulier la nature des liaisons formées et rompues, et l'ordre dans lequel se font ces formations et ces ruptures. Lors de chaque étape, la formation (fig a) et/ou la rupture (fig b) de liaisons sont la conséquence du déplacement d'un ou plusieurs doublet(s) d'électrons, représenté par le modèle de la flèche courbe. **La flèche courbe part d'un doublet d'électrons liant ou non liant et pointe vers un site déficient en électrons :**



L'arrivée d'une flèche (1) sur un atome déclenche souvent le départ d'une autre flèche (2) :



Q5) Représenter les charges partielles portées par les atomes de la liaison C=O (dernière équation) puis expliquer le mécanisme proposé. (vous insisterez sur la raison pour laquelle l'étape modélisée par la flèche 1 et indissociable de celle modélisée par la flèche 2).

Q6) Quelle peut être la nature initiale (liant ou non liant) du doublet d'électron qui se déplace lors d'une étape de formation de liaison ? Lors d'une étape de rupture de liaison ?

Q7) Reprendre l'exemple du document 1 et compléter la représentation du mécanisme réactionnel à l'aide de flèches courbes entre les sites.