

# Chimie quantique

## Chapitre 3 : Réactivité

<b>Savoir</b>	<b>Savoir faire</b>
Théorème de Fukui	Déterminer l'interaction principales entre orbitales frontières
Nucléophilie et électrophilie	Justifier la réactivité à l'aide des orbitales frontières
Influence des substituants	Justifier l'influence des substituants sur les orbitales frontières
Réactivité et régiosélectivité	Prévoir : si une réaction est possible et justifier alors la régiosélectivité

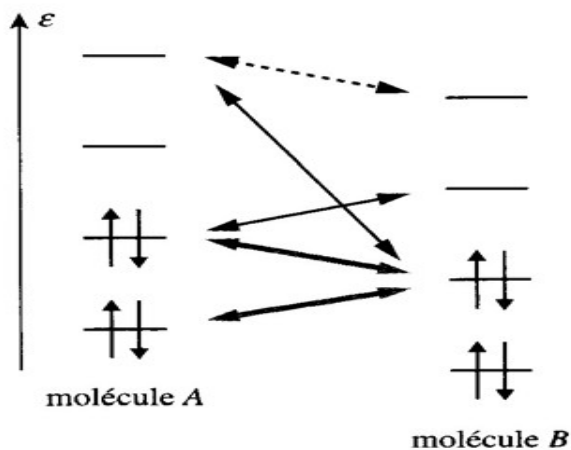
## I) Prévision de la réactivité

### 1) Orbitales frontières

Dans un diagramme d'OM, on retrouve les orbitales frontières :

- **HO** : Haute Occupée. Il s'agit de l'orbitale possédant des électrons la plus haute en énergie.
- **BV** : Basse Vacante. Il s'agit de l'orbitale vide la plus basse en énergie.

Dans une réaction entre molécule, on va donc s'intéresser aux interactions entre deux diagrammes d'OM :



**Théorème de Fukui** : on ne considère que :

- les interactions stabilisantes à 2 électrons.
- les interactions entre les OM les plus proches en énergie.

→ les interactions entre une HO et une BV. Généralement celle où l'écart d'énergie est le plus faible.

## 2 ) Nucléophilie et électrophilie

On retiendra les propriétés suivantes :

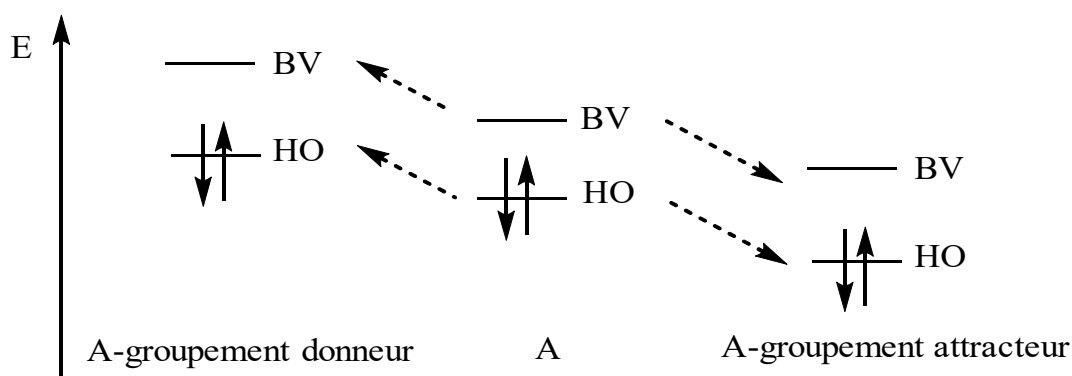
Un **électrophile** réagit par l'intermédiaire de sa **BV**.

Un **nucléophile** réagit par l'intermédiaire de sa **HO**.

**Exemple** : Addition de HBr sur un alcène

## 3 ) Influence des substituants

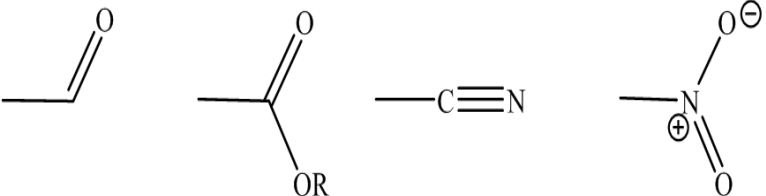
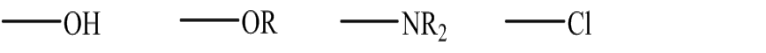


Soit une molécule A. L'ajout de substituants sur cette molécule va modifier les niveaux d'énergies de ses orbitales moléculaires :



Un groupement **donneur** d'électrons fait monter les niveaux d'énergie.

Un groupement **attracteur** d'électrons fait baisser les niveaux d'énergie.

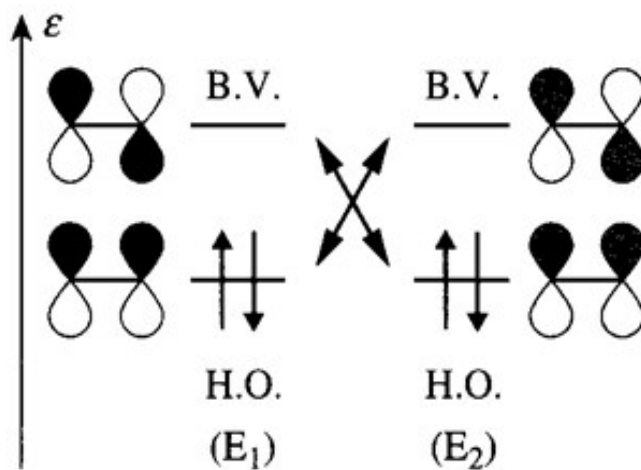
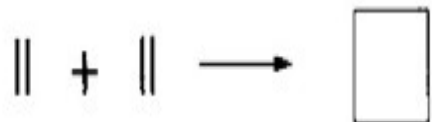
**Exemples de groupements :**

Groupements mésomères attracteurs	
Groupements mésomères donneurs	
Groupements inductifs attracteurs	
Groupement donneur (hyperconjugaison)	

#### 4) Réactivité

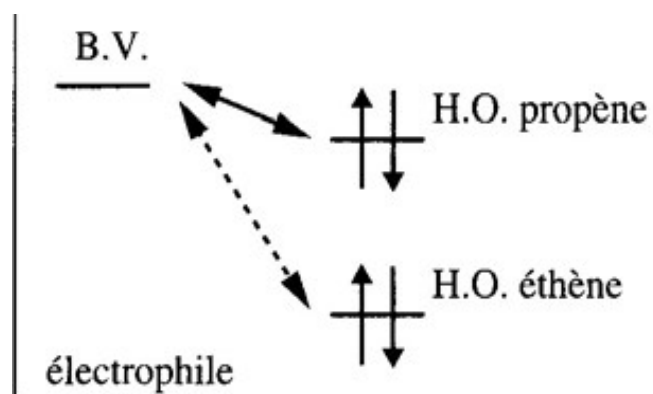
**Réactivité absolue** : L'utilisation des orbitales moléculaires permet de prédire si une réaction est possible.

**Exemple** : formation du cyclobutane



**Réactivité relative** : L'utilisation des orbitales moléculaires permet de prédire quel réactif réagira préférentiellement.

**Exemple** : Addition d'un électrophile sur différents alcènes



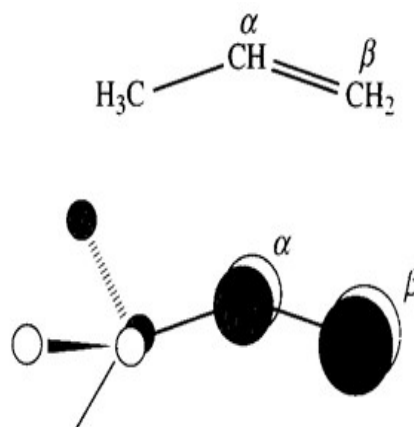
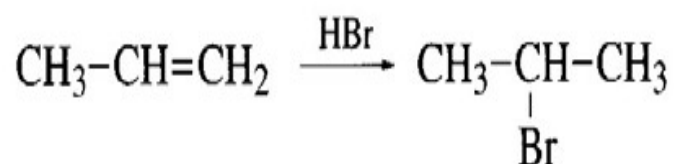
## 5) Régiosélectivité

L'étude des coefficients sur les orbitales moléculaires permet de déterminer les différents sites réactifs. On retiendra :

Le coefficient le plus élevé sur la **BV** correspond au site **électrophile**.

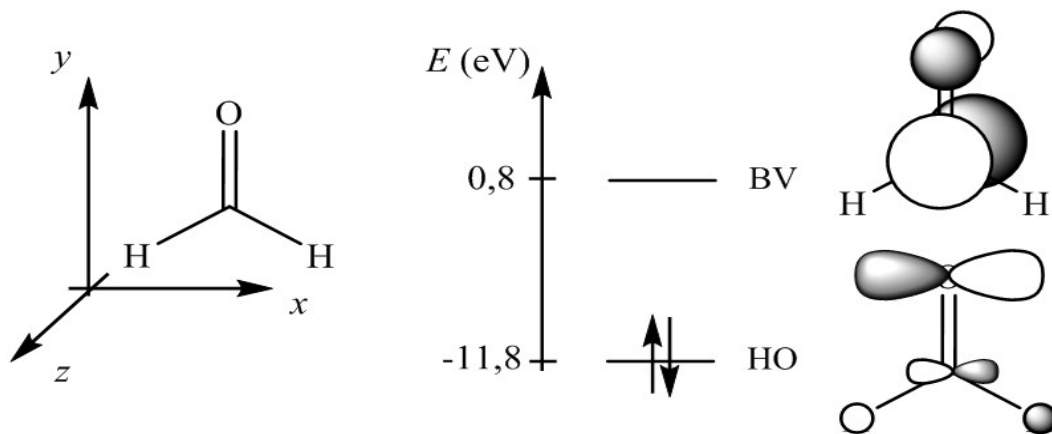
Le coefficient le plus élevé sur la **HO** correspond au site **nucléophile**.

*Exemple :*



## II ) Application à quelques réactions

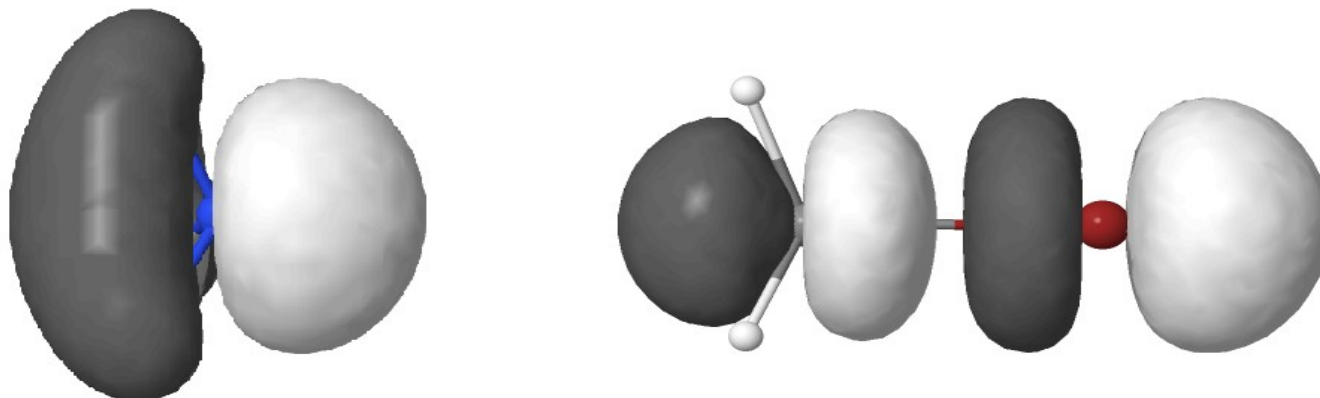
### 1 ) Addition nucléophile sur le groupe carbonyle





## 2) Substitutions nucléophiles sur les dérivés halogénés

Réaction entre l'ammoniac et le bromométhane :



Réaction entre l'ammoniac et le carbocation  $\text{CH}_3^+$  :

