

# Chimie quantique

## Chapitre 3 : Réactivité

### I ) Les orbitales frontières

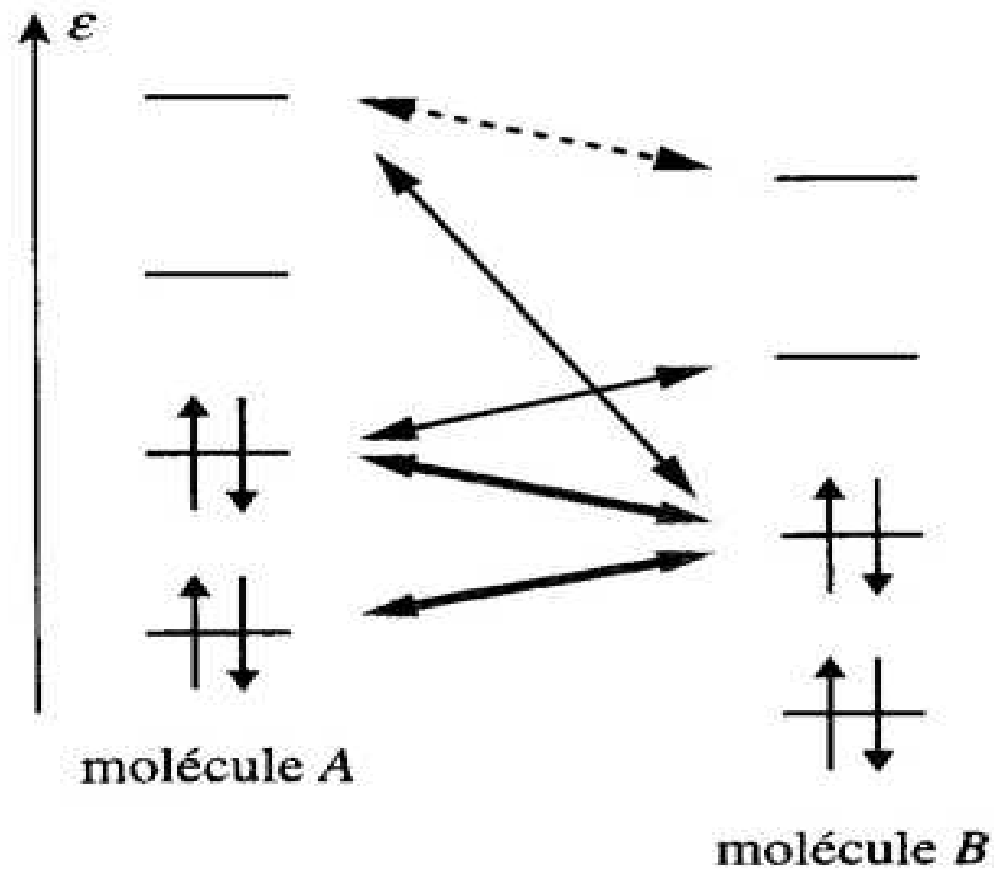
#### 1 ) Prévision de la réactivité

Différents facteurs peuvent intervenir :

- **les interactions stériques** ;
- **les interactions électrostatiques** ;
- **les interactions orbitales.**

## 2 ) Orbitales frontières

### Interactions possibles :



# 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.

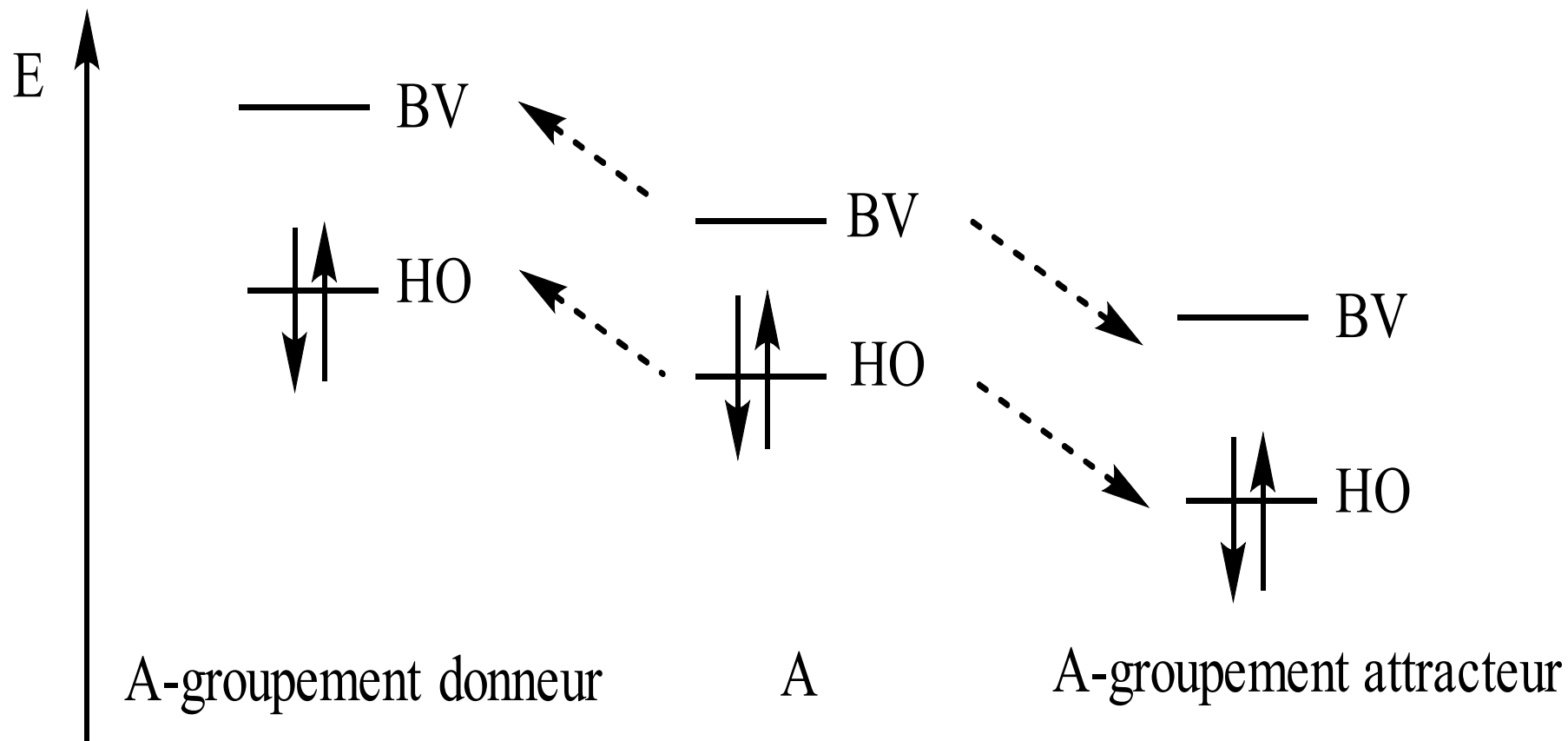
## II ) Prévision de la réactivité

### 1 ) Nucléophilie et électrophilie

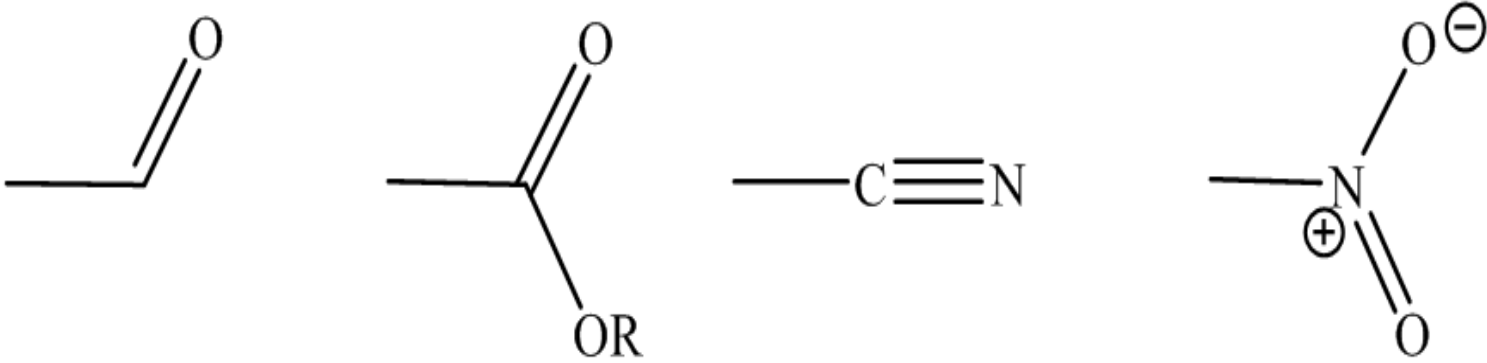
Un **électrophile** réagit par l'intermédiaire de sa **BV**.

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

## 2 ) Influence des substituants

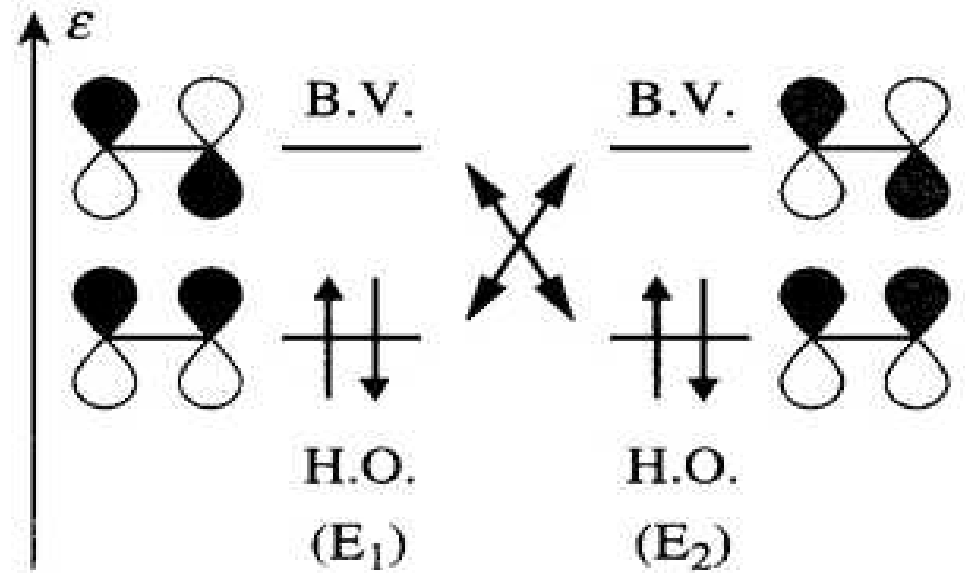
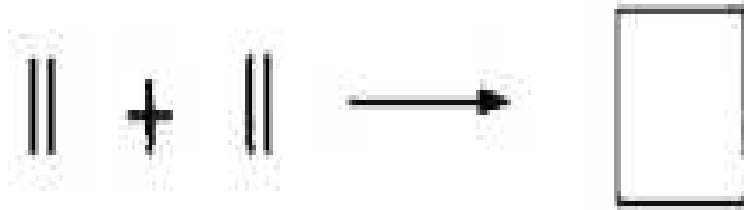


# Exemples de groupements :

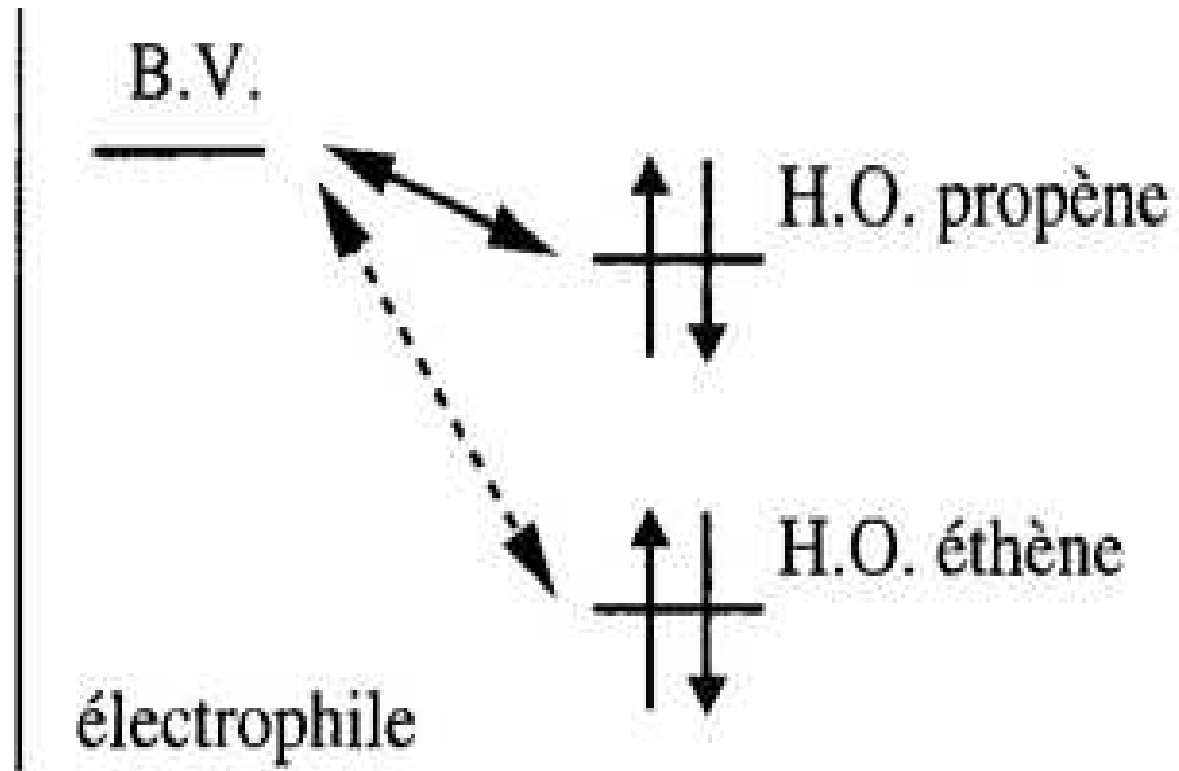
Groupements mésomères attracteurs	
Groupements mésomères donneurs	$\text{—OH}$ $\text{—OR}$ $\text{—NR}_2$ $\text{—Cl}$
Groupements inductifs attracteurs	$\text{—CCl}_3$ $\text{—CF}_3$
Groupement donneur (hyperconjugaison)	$\text{—R}$ (alkyl)

### 3 ) Réactivité

Réactivité absolue : est-ce que la réaction peut avoir lieu ?

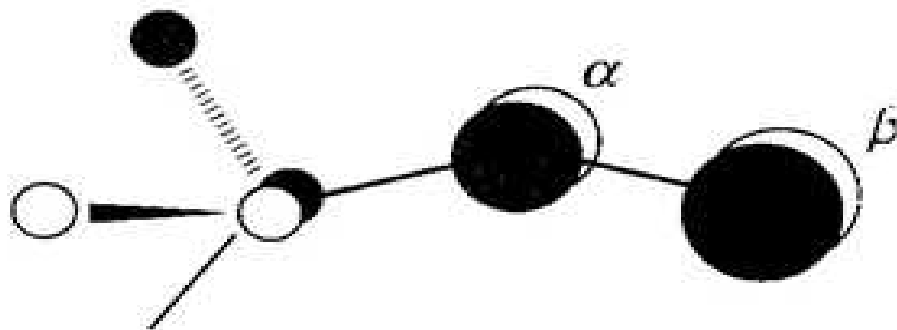
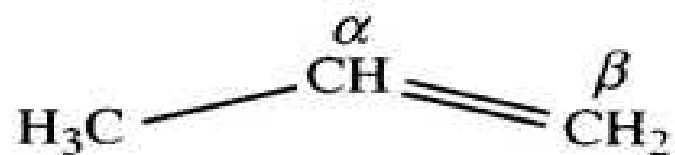
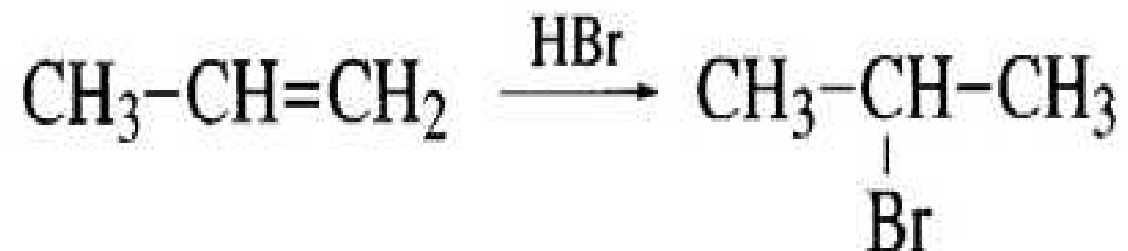


# Réactivité relative



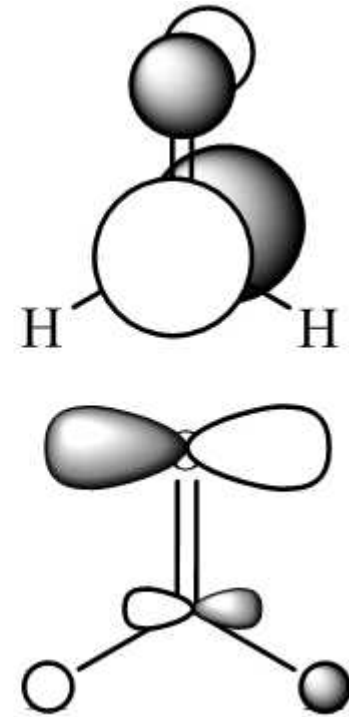
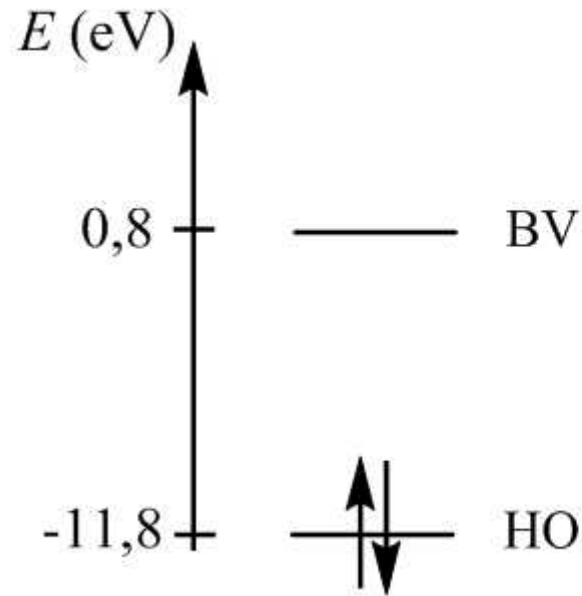
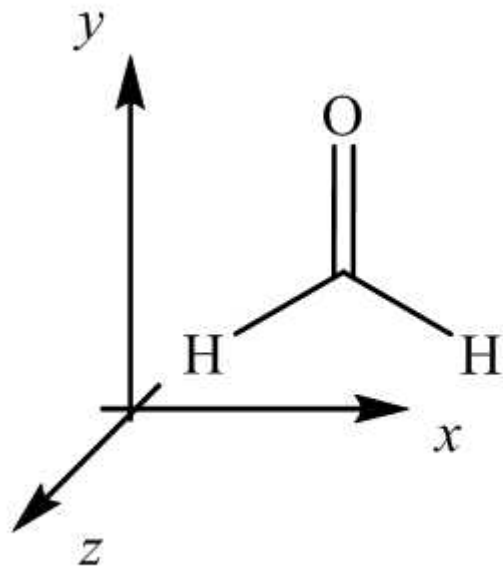


## 4 ) Régiosélectivité



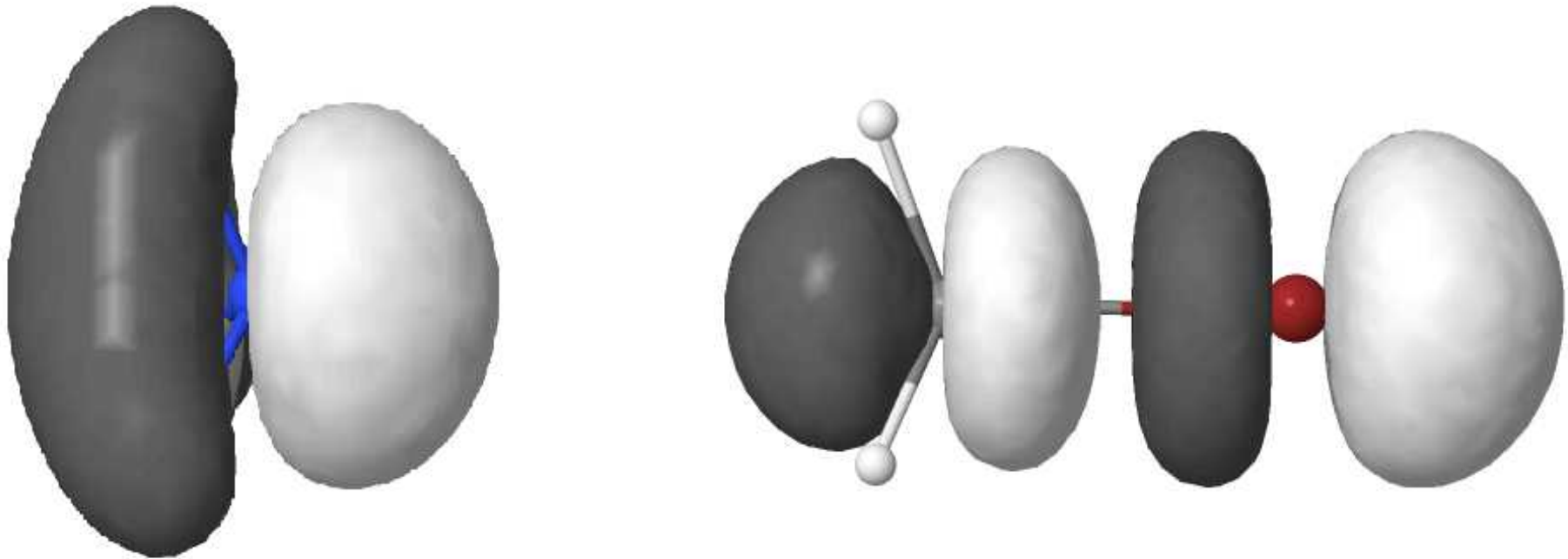
# III ) Application à quelques réactions

## 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

CH<sub>3</sub><sup>+</sup> :

