

## Suivi temporel et modélisation macroscopique

### 1 Transformation lente et rapide

#### A) Réaction instantanée

**Définition :** Une *réaction instantanée* est une transformation chimique dont l'évolution du système est si rapide pour nous que la réaction semble achevée à l'instant même où les réactifs sont introduits.

#### B) Réaction lente

**Définition :** Une *réaction lente* est une transformation chimique dont l'évolution du système est assez lente pour que nous soyons capables de suivre son évolution durant un temps allant de quelques secondes à plusieurs minutes.

### 2 Suivi de l'évolution d'un système chimique au cours du temps

#### A) Méthode chimique

On réalise à un intervalle de temps précis un filtrage ou prélèvement du mélange réactionnel. Ce prélèvement doit avoir subi une trempe (introduire le prélèvement dans un milieu glacé pour stopper la réaction).

#### B) Méthode physique

- Si l'espèce est colorée alors on utilise un colorimètre ou un spectrophotomètre.
- Si nous avons un gaz, on mesure la pression (manomètre).
- Si c'est en solution, alors on mesure la conductivité.

## III. Facteurs cinétiques

**Définition :** Un facteur cinétique est un paramètre capable de modifier l'évolution temporelle d'une réaction chimique.

#### A. La température

- La température joue sur le nombre de chocs efficaces entre les réactifs.
- Plus la température est élevée plus ces chocs sont efficaces.

#### B. La concentration des réactifs

- La concentration des réactifs joue sur la probabilité que les réactifs se rencontrent.
- Plus la concentration sera élevée plus il y aura de chances que les réactifs se rencontrent.

## IV. Catalyseur

**Définition :** Un catalyseur est une espèce chimique capable de diminuer la durée d'une transformation chimique sans être ni consommé, ni produit par la réaction.

### A. Catalyse homogène

- On parle de catalyse homogène quand le catalyseur et le réactif sont dans le même état physique.

### B. Catalyse hétérogène

- On dit qu'une catalyse est hétérogène quand le catalyseur et le réactif ne sont pas dans le même état physique.

### C. Catalyse enzymatique

- On dit que la catalyse est enzymatique quand le catalyseur est une enzyme.

## V. Durée d'une réaction - temps de demi-réaction

$t_{\frac{1}{2}}$

### A) Durée d'une réaction

On peut définir la durée d'une réaction comme le temps nécessaire à la consommation totale du réactif limitant.

$$t = t_f \quad \Rightarrow \quad x(t_f) = x_{max}$$

### B) Temps de demi-réaction $t_{\frac{1}{2}}$

**Définition :** Le temps de demi-réaction noté  $t_{\frac{1}{2}}$  est la durée nécessaire pour que la moitié du réactif limitant soit consommée.

$$t = t_{\frac{1}{2}} \quad \Rightarrow \quad x(t_{\frac{1}{2}}) = \frac{x_0}{2}$$

**Attention :** Le temps de demi-réaction n'est pas égal à la moitié de la durée de la réaction.

## VI. Vitesse de volumique

On a :



### A) Vitesse volumique d'apparition d'un produit

On a :

$$v_P(t) = \frac{d[P]}{dt}$$

avec  $v_P(t)$  en  $\text{mol.L}^{-1}.\text{s}^{-1}$ .

### B) Vitesse volumique de disparition d'un réactif

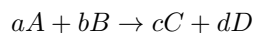
On a :

$$v_R(t) = -\frac{d[R]}{dt}$$

## VII - Loi de vitesse d'ordre 1

Si la réaction est d'ordre 1, alors  $v = k \times [A]_t$ .

Si nous avons la réaction :



On a donc :

$$v_d(t) = \frac{d[A]_t}{dt} = k \times [A]_t$$

$$v_g(t) = \frac{d[P]_t}{dt} = k \times [A]_t$$

### A) Loi d'évolution d'ordre 1

Si la réaction est d'ordre 1, alors on obtient l'équation différentielle :

$$\frac{d[A]_t}{dt} = -k \times [A]_t$$

Cette équation a pour solution :

$$[A]_t = A_0 \times e^{-kt}$$

$$[A]_t = [A] \times e^{-ht}$$

On en déduit :

$$t_{\frac{1}{2}} = \frac{-\ln 2}{k}$$

## VIII - Mécanisme réactionnelle

### A) Succession d'acte élémentaire

Une transformation chimique est modélisée par une réaction chimique.

À l'échelle des entités, la transformation se fait en plusieurs étapes.

Définition : Un acte élémentaire est une modélisation à l'échelle des entités d'une transformation qui s'effectue en une seule étape. **Définitions** : Un mécanisme réactionnel est une succession d'actes élémentaires.

**Définition** : Un intermédiaire réactionnel est une espèce chimique qui apparaît dans un acte élémentaire en tant que produit puis en tant que réactif dans l'acte élémentaire suivant.

### B) Les flèches courbes

On formalise la redistribution de certains doublets d'électrons se déroulant pendant un acte élémentaire par des flèches courbes.

Pour représenter ces flèches, il faut avoir la représentation de Lewis des espèces chimiques.

Une flèche courbe part toujours d'un site donneur d'électron (un doublet d'électrons) vers un site accepteur (un atome).