

Modélisation macroscopique de l'évolution d'un système chimique

Facteurs cinétiques, vitesse de réaction, cinétique chimique

Classe de Terminale – Spécialité SPC

- 1 Facteurs cinétiques
- 2 Cinétique chimique
- 3 Cinétique d'ordre 1

Introduction

Référence = oeil humain

- réaction **rapide** : elle semble achevée dès que les réactifs sont mis en contact
- réaction **lente** : notre oeil perçoit une évolution
- réaction **infiniment lente** : on sait que cela réagit, mais notre oeil ne détecte aucune évolution, même pendant plusieurs jours d'affilée

- 1 Facteurs cinétiques
- 2 Cinétique chimique
- 3 Cinétique d'ordre 1

Les **facteurs cinétiques** permettent d'influencer la **vitesse** d'une réaction chimique.

Une réaction chimique peut être accélérée par

- en général, une augmentation de **température**
- une augmentation de la **concentration des réactifs**
- un **catalyseur**

Une catalyse peut être

- homogène si tous les réactifs sont dans la même phase
- hétérogène si les réactifs ne sont pas dans la même phase
- enzymatique si le catalyseur est une enzyme

Définition d'un catalyseur

Un **catalyseur** est une espèce chimique qui, soit par sa simple **présence**, soit parce qu'elle est un **intermédiaire réactionnel**, accélère une réaction chimique.

Au cours de la réaction, un intermédiaire réactionnel est consommé, puis entièrement régénéré. Il n'apparaît donc pas dans l'équation bilan de la réaction. On le note généralement dessus ou dessous la flèche de réaction.

Pour stopper une réaction chimique, pour faire une analyse du milieu réactionnel à un instant donné,

- on peut diluer (si l'eau n'est pas un réactif)
- on peut faire une trempe (refroidissement brutal)
- on peut faire les 2

- 1 Facteurs cinétiques
- 2 Cinétique chimique
- 3 Cinétique d'ordre 1

La branche de la chimie qui étudie comment se déroulent les réactions chimiques au cours du temps est la **cinétique chimique**.

On choisit de définir une vitesse de réaction **positive**.

Définition : temps de demi-réaction $t_{1/2}$

Durée au bout de laquelle l'avancement x est égal à la moitié de l'avancement final x_f

$$x(t_{1/2}) = \frac{x_f}{2}$$

Définition : vitesse d'apparition d'un produit

La **vitesse d'apparition** (à volume V constant) d'un produit P de concentration $[P]$ d'une réaction chimique correspond à la variation de sa concentration par unité de temps

$$v_{\text{app}}(P, t) = \frac{d[P]}{dt}$$

Définition : vitesse de disparition d'un réactif

La **vitesse de disparition** (à volume V constant) d'un réactif R de concentration $[R]$ d'une réaction chimique correspond à l'**opposé** de la variation de sa concentration par unité de temps

$$v_{\text{dis}}(R, t) = -\frac{d[R]}{dt}$$



$$v = k[A]^\alpha \times [B]^\beta$$

Si B est en grand excès ($n(B) \gg n(A)$), alors on a $[B] \sim \text{constante}$, et la vitesse de réaction devient

$$v = k_1[A]^\alpha$$

avec $k_1 = k[B]^\beta$

Soit la réaction



Expérimentalement, on peut montrer que la vitesse de réaction est de la forme

$$v = k[A]^\alpha \times [B]^\beta$$

α est appelé **ordre partiel** de la réaction par rapport à A

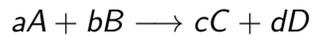
β est appelé **ordre partiel** de la réaction par rapport à B

$\alpha + \beta$ est l'**ordre global** de la réaction

A priori, $\alpha \neq a$!

Si $\alpha = 1$, on dit que la réaction est d'**ordre 1** par rapport à A .

- 1 Facteurs cinétiques
- 2 Cinétique chimique
- 3 Cinétique d'ordre 1



B est en grand excès

$$v = k[A]^\alpha \quad \text{avec} \quad \alpha = 1$$

Cinétique d'ordre 1 :

$$\begin{cases} v = k[A] \\ v_{\text{dis}}(A, t) = -\frac{d[A]}{dt} \end{cases}$$

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

$$\frac{d[A]}{dt} + k[A] = 0$$

$$\frac{d[A]}{dt} + k[A] = 0$$

Avec les notations mathématiques, la même équation s'écrit

$$f'(x) + kf(x) = 0$$

Une équation qui fait intervenir une fonction f ainsi que ces dérivées est appelée **équation différentielle**. Vous démontrerez en exercice que la fonction solution de cette équation différentielle du 1er ordre à coefficient constant est

$$f(x) = K \times e^{-kx}$$

où K est une constante d'intégration qu'il faudra déterminer.

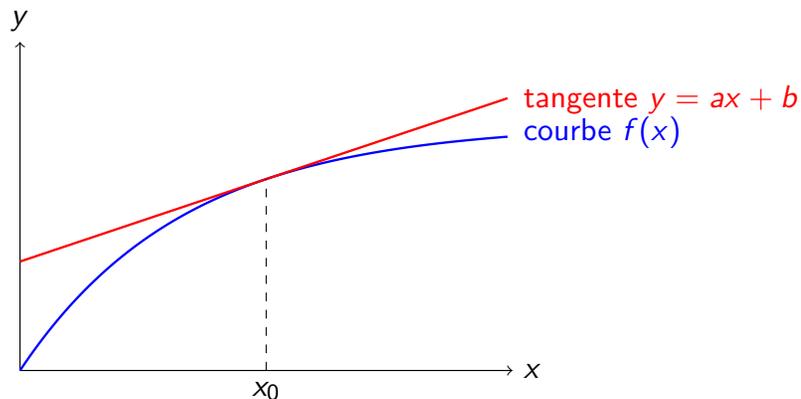
$$[A](t) = K \times e^{-kt}$$

$$[A](t) = [A]_0 \times e^{-kt}$$

Rappel mathématique : tangente

Le coefficient directeur a de la tangente au point d'abscisse x_0 correspond à la valeur $f'(x_0)$

$$a = f'(x_0)$$



Rappel mathématique : logarithme népérien $\ln(x)$ et exponentielle $\exp(x)$ ou e^x

- $\ln(ab) = \ln(a) + \ln(b)$
- $\ln(\exp(x)) = x$

$$[A] = [A]_0 \times e^{-kt} \rightarrow \text{calculer } \ln([A])$$

$$\begin{aligned} \ln([A]) &= \ln([A]_0) + \ln(e^{-kt}) \\ &= \ln([A]_0) - kt \end{aligned}$$

Pour prouver que la fonction $[A]$ est bien une exponentielle, on en prend le logarithme népérien. Si on obtient une droite, $[A]$ est bien une exponentielle.