

Profils Reactionnels

* Profil reactionnel: permet de modeliser l'energie du systeme lors d'une reaction chimique en fonction d'une coordonnee de reaction.

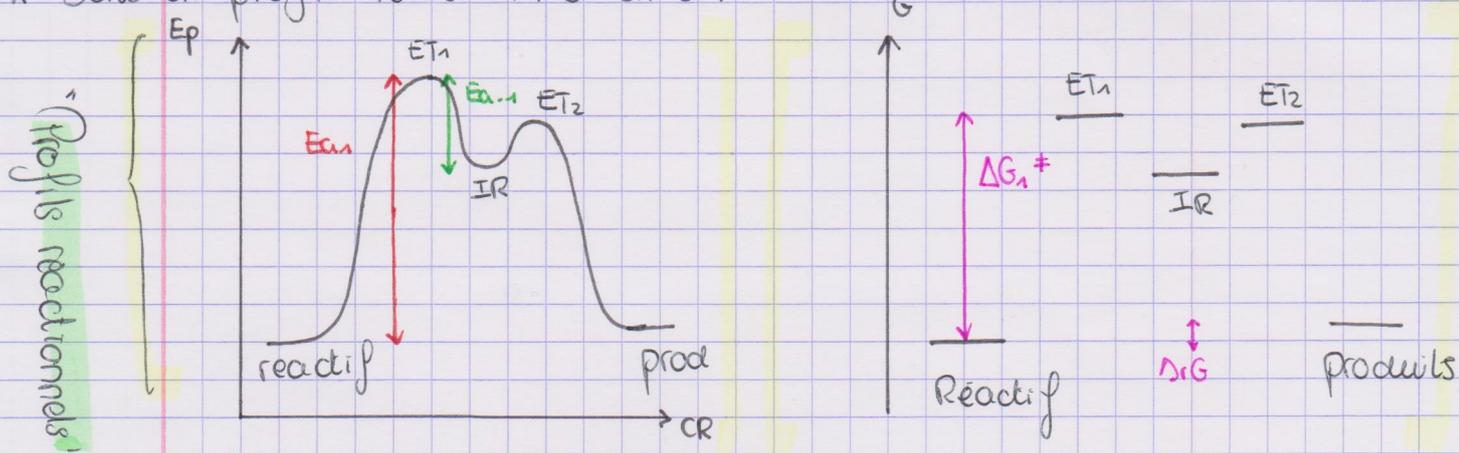
* Coordonnee de reaction: parametre geometrique modifie au cours d'une reaction.

• Dans une reaction on fait approcher les reactifs, l'energie change en fonction de la distance et de l'angle. On a une surface d'energie potentielle

↳ La coordonnee de reaction correspond au minimum d'energie par passer des reactifs aux produits sur cette surface

↳ cf image = "Coordonnee de reaction"

* Dans un profil reactionnel on a:



• Etat de transition: maximum d'energie potentielle

• Complexe activé: geometrie correspondant a l'etat transition

• Intermediaire reactionnel: minimum d'energie sur la coordonnee reac

↳ Diagramme avec $\Delta_r G$ n'ont pas de CR