

## Théorie des collisions

\* Théorie apportée en 1916 par Trautz et Lewis pour décrire la cinétique des réactions par la probabilité que deux molécules se rencontrent

↳ Nombre collisions:  $Z_{AB} = N_A N_B \sigma_{AB}^2 \left( \frac{8\pi k_B T}{\mu_{AB}} \right)^{1/2}$

⚠ Hypothèse gaz parfait et molécules sphériques.

• Pour avoir une réaction, il faut que les molécules aient une énergie supérieure à  $E_a$ .

↳ Avec la statistique de Boltzmann on a donc:

$$k = N_A \cdot N_B \sigma_{AB}^2 \left( \frac{8\pi k_B T}{\mu_{AB}} \right)^{1/2} \cdot e^{-E_a/RT} = A_{theo} \cdot e^{-E_a/RT}$$

- $N$  est le nombre moyen de particules par unité de volume
- $\sigma_{AB}$  est la section efficace
- $(\dots)^{1/2}$  est la vitesse relative moyenne de A % B

⇒ Succès car expressions similaires à Arrhenius.

↳ mais la théorie n'est pas toujours en accord avec l'exp

↳ Image = "Facteur stérique théorie des collisions"

↳ Facteur stérique rend compte d'une orientation privilégiée (non sphérique)

• Plus fondamentalement il manque un facteur entropique

⇒ fiche "Théorie état transition"