

LC.5 Ordre de réaction : détermination et applications

Thomas

01/10/21

| **Elément imposé** – Interpretation maroscopique de l'ordre de réaction

Niveau :L1

Pré-requis :

- Cinétique macroscopique (définition des vitesses de réaction, méthode intégrale, différentielle pour déterminer l'ordre, dégénérescence de l'ordre)
- SN_1/SN_2 (mécanisme, savoir les différences)

Difficultés :

- Calculs

Activité :

- TP : étude de la solvolysse du chlorure de teriobutyle

Biblio :

—

Plan proposé

1	Synthèse de HBr	2
1.1	Déterminer une loi de vitesse pour la synthèse de HBr	2
1.2	Interprétation	2
2	Solvolyse du chlorure de tertiobutyle	2

Intro pédagogique

Attention calculs. Utilisation de SN_1 et de SN_2

Figure 1 – Caption

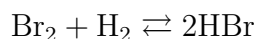
Leçon

Intro

Termes de cinétiques introduits, ordre de réaction, et tp d'ordre partiel de réaction de solvolysse du tertio-butyle.

1 Synthèse de HBr

1.1 Déterminer une loi de vitesse pour la synthèse de HBr



Acte élémentaire : Transformation qui permet de passer d'un minima d'énergie à un autre sans passer par un intermédiaire.

Loi de Van't Hoff : Pour un acte élémentaire l'ordre partiel en un réactif est égal à son coeff stoechiométrique. ATTENTION, PAS RÉCIPROQUE !

$$v = \frac{d[\text{Br}_2]}{dt} = v_1 + v_3 - v_{-1}$$

$$v = k_2 \times [\text{Br}_2] + k_3 \times [\text{H}] \times [\text{Br}_2] - k_{-1} \times [\text{Br}_2]^2$$

Approximation des états quasi-stationnaires (AEQS) : Intermédiaires réactionnels ne restent pas dans le milieu, dérivée de la concentration nulle

$$\frac{d[\text{H}]}{dt} = 0 = v_2 - v_3 - v_{-2} \quad \frac{d[\text{Br}]}{dt} = 0 = v_1 - v_2 + v_3 + v_{-2} - 2v_{-1}$$

$$\text{Donc } [\text{Br}] = \sqrt{\frac{k_1 \times [\text{Br}_2]}{2 \times k_1}}$$

Problèmes de calculs : la réaction n'admet pas d'ordre

1.2 Interprétation

$$v_0 = k \times [\text{H}_2]_0 \times [\text{Br}_2]_0^{3/2}$$

2 Solvolysse du chlorure de tertio-butyle

Courbe simulée expérimentalement sur python. Ordre 1 pour tertio-butyle.

$$v = k \times [{}^t\text{BuCl}] \times [\text{H}_2\text{O}]^b \text{ Mais } b=0$$

Conclusion

On pourra aller plus loin en reliant k à l'énergie d'activation

Questions/Réponses

Questions	Réponses
<i>Profils réactionnels déjà vus ?</i>	Un peu pour SN, mais revus au cours sur Arrhénius
<i>Simulation Python ? Données exp ?</i>	Non, données inventées
<i>Suivre conduction de tertiobutyl</i>	Conductimétrie
<i>Objectifs de la leçon</i>	Concepts (Van't Hoff, AEQS) pour déterminer loi de vitesse, et à partir de loi de vitesse déterminer mécanisme
<i>TD</i>	Exercices similaires à Br_2
<i>Réaction photochimiques ?</i>	HBr, mais pas d'autres exemples
<i>Activateurs thermiques</i>	AIBN
<i>Explication de mécanisme</i>	
<i>Comment tracer chemin réactionnel</i>	Etat microscopique
<i>Calculs compliqué</i>	
<i>Notions en plus ?</i>	molécularité avec loi de Van't Hoff
<i>Autres approx en cinétiques ?</i>	Vitesse de réaction de terminaison égale à la terminaison ? ECDL, approximation du pré-équilibre établi
<i>Facteurs d'inhibition, d'accélération</i>	Réaction auto-catalyse

Debrief

Bcp de calculs. Mettre les étapes sur slides
Faire le calcul sur H₂
ATTENTION ERREUS DANS LE CALCUL
Montrer sur vitesse d'apparition, vitesse de disparition
IP : penser à définir les objectifs de la leçon
Etude du TP bien
Ecrire le niveau dans les prérequis
PRérequis ok, mais réécrire les defs utilisées
Equation de réaction de solvolysé
Logiciels cinétiques : **cinewin** et **num cine**