

# LC 5 : CINÉTIQUE DES RÉACTIONS ÉLÉMENTAIRE

## EI : Théorie de l'état de transition

Gabriel BALAVOINE, Timothée AUDINET

# Hypothèses

- Pour qu'une réaction se produise, il faut que les particules se heurtent lors d'évènements appelées collisions.
- On étudie des molécules en phases gazeuses qui se comportent comme des gaz parfait
- Les molécules ont une symétrie sphérique

# Limites

Réaction	$A_{\text{exp}}$	$A_{\text{théo}}$	$P = A_{\text{exp}}/A_{\text{théo}}$
$2\text{HI} \rightarrow \text{H}_2 + \text{I}_2$	$3,52 \cdot 10^{-7}$	$3,5 \cdot 10^{-7}$	1,01
$2\text{ClNO} \rightarrow 2\text{Cl} + 2\text{NO}$	$9,4 \cdot 10^9$	$5,9 \cdot 10^{10}$	0,16
$2\text{ClO} \rightarrow \text{Cl}_2 + \text{O}_2$	$6,3 \cdot 10^7$	$2,5 \cdot 10^{10}$	$2,3 \cdot 10^{-3}$
$\text{H}_2 + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_6$	$1,24 \cdot 10^6$	$7,3 \cdot 10^{11}$	$1,7 \cdot 10^{-6}$
$\text{Br}_2 + \text{K} \rightarrow \text{KBr} + \text{Br}$	$10^{12}$	$2,1 \cdot 10^{11}$	4,3

Figure 1: Comparaison entre la valeur prévue par la théorie des collisions et la valeur théorique attendue.

Source : <http://agregationchimie.free.fr/fichiers/cours-cinetique.pdf>

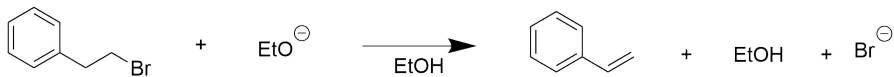
# Hypothèses

- Une molécule arrive à l'état de transition continue sans revenir en arrière
- La distribution énergétique des molécules suit une loi de distribution de Boltzmann en tout point du profil réactionnel
- Un mouvement spécifique est responsable de la réaction
- Les molécules ont un mouvement classique : pas d'effet tunnel

## Limites

- La théorie a du mal à prédire les comportements à haute température
- Pour de faibles enthalpies libres d'activation, on ne peut plus négliger le comportement quantique des molécules.
- On a assimilé activité et concentration ce qui n'est plus possible quand on étudie des solutions ioniques.

## Détermination de mécanisme



$$\frac{k_H}{k_D} \approx 7,1$$

# Dissociation

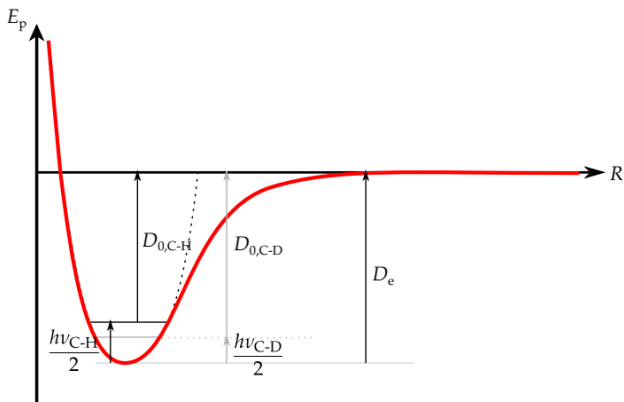


Figure 2: Source : <http://agregationchimie.free.fr/fichiers/cours-cinetique.pdf>

# Dissociation

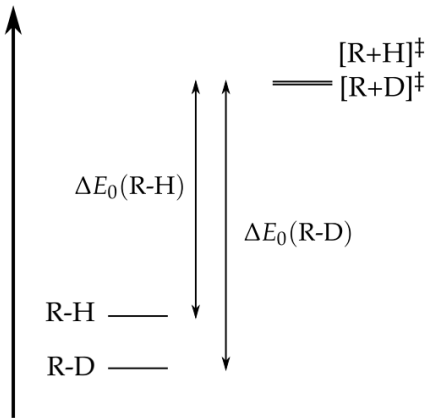


Figure 3: Source : <http://agregationchimie.free.fr/fichiers/cours-cinetique.pdf>

## Détermination du rapport des vitesses

$$\frac{k_H}{k_D} = \exp\left(\frac{\frac{h}{2}(v_{C-D} - v_{C-H})}{RT}\right)$$

$$v_{C-H} = 2900 \text{ cm}^{-1}$$

$$v_{C-D} = 2150 \text{ cm}^{-1}$$

$$\frac{k_H}{k_D} \approx 7$$