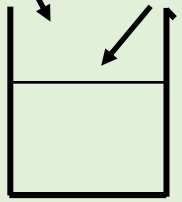
Modélisation macroscopique de l'évolution temporelle d'une transformation chimique

Rappel : description d'une transformation chimique à l'échelle macroscopique

→ modèle de la réaction chimique → réactifs et produits → équation de réaction

Exemple du modèle de la réaction d'oxydo-réduction :

$(2Na^+_{(aq)} + S_2O^{2-}_{8(aq)})$ $(K^+_{(aq)} + I^-_{(aq)})$



I_2 responsable de la coloration

oxydant/réducteur

gagne perd

I_2 / I^- : $2I^-_{(aq)} = I_{2(aq)} + 2e^-$ **oxydation** = **perte** d'électrons

$S_2O^{2-}_8 / SO^{2-}_4$: $S_2O^{2-}_{8(aq)} + 2e^- = 2SO^{2-}_{4(aq)}$ **réduction** = **gain** d'électrons

$2I^-_{(aq)} + S_2O^{2-}_{8(aq)} \rightarrow I_{2(aq)} + 2SO^{2-}_{4(aq)}$ **équation de réaction d'oxydo-réduction**

transfert de $2e^-$

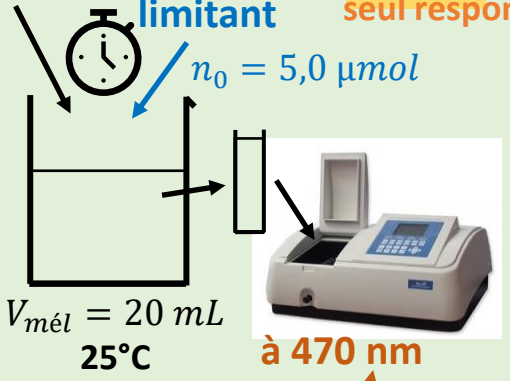
$S_2O^{2-}_8$: ion peroxodisulfate

1. Réalisation du suivi temporel de la concentration d'un réactif ou produit

$2I^-_{(aq)} + S_2O^{2-}_{8(aq)} \rightarrow I_{2(aq)} + 2SO^{2-}_{4(aq)}$

limitant

$n_0 = 5{,}0\ \mu mol$

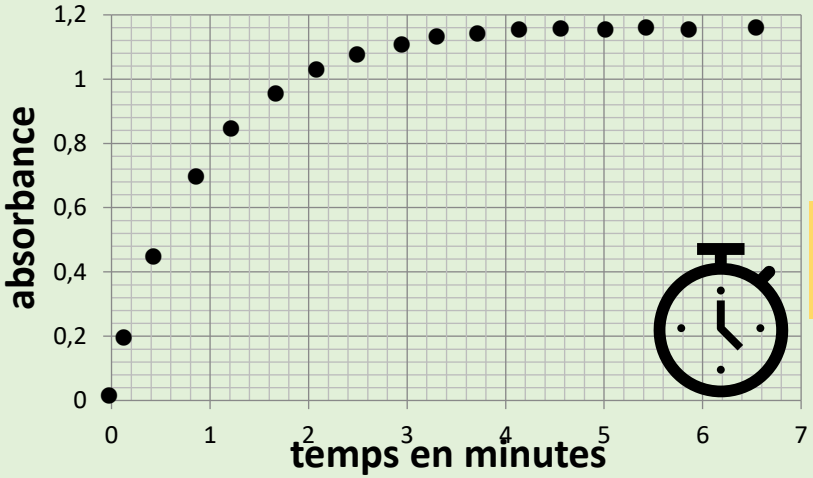


$V_{mél} = 20\ mL$

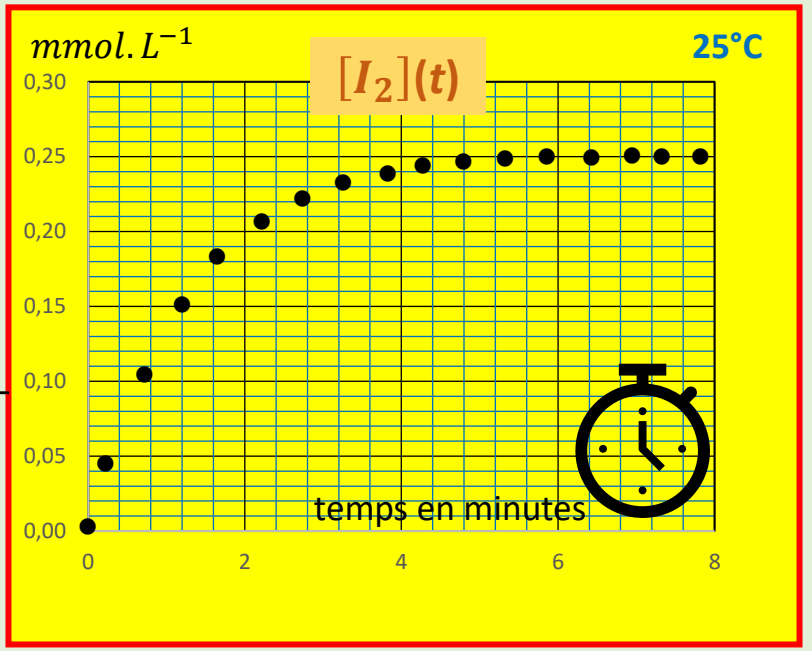
25°C

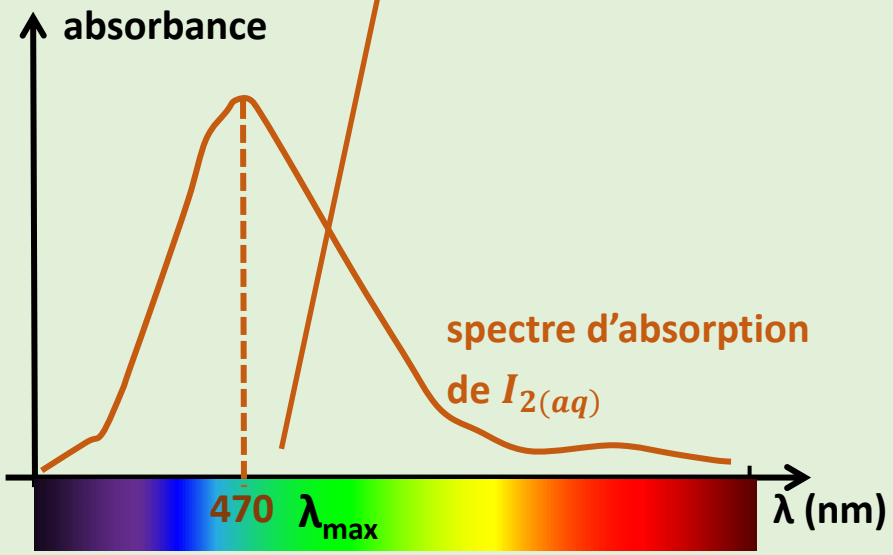
à 470 nm

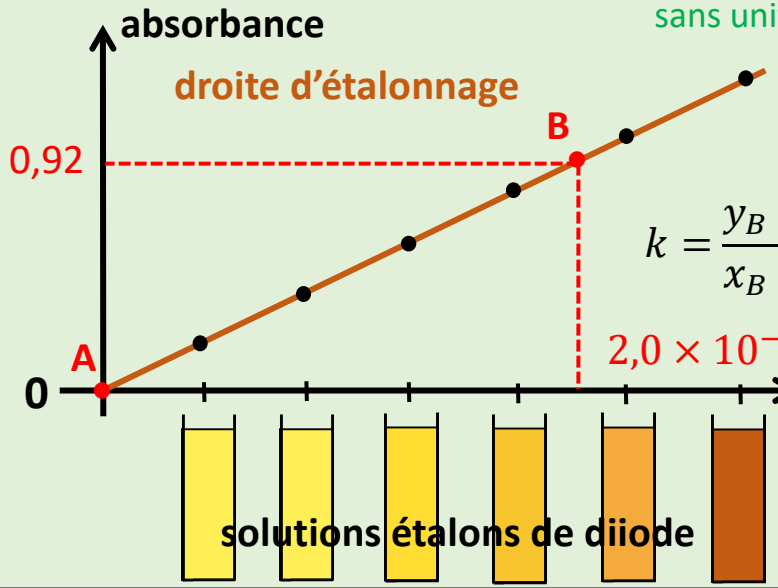
seul responsable d'une coloration → absorbance dans le visible (470 nm)



$[I_2] = \dfrac{A}{4{,}6 \times 10^3}$





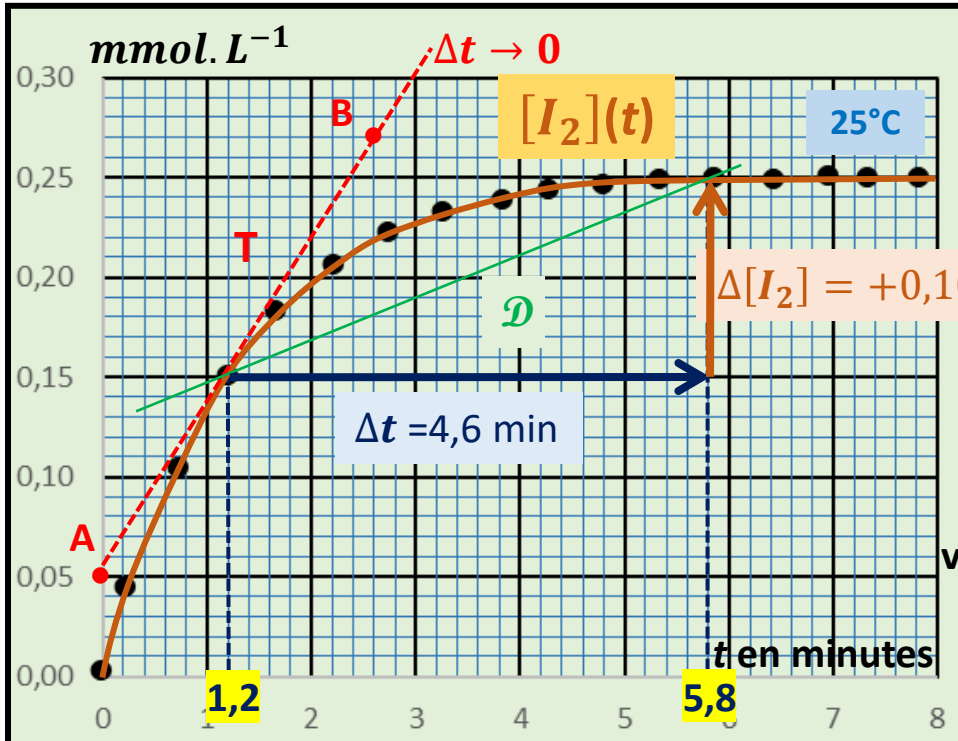


sans unité $L.mol^{-1}$ $mol.L^{-1}$

$A = k \times [I_2]$ loi de Beer-Lambert

$k = \dfrac{y_B - y_A}{x_B - x_A} = \dfrac{0{,}92 - 0}{2{,}0 \times 10^{-4} - 0} = 4{,}6 \times 10^3\ L.mol^{-1}$

2. Vitesse volumique d'apparition d'un produit



Entre 1,2 min et 5,8 min :

$$v_{moy,app,I_2} = \frac{\Delta[I_2]}{\Delta t} = \frac{+0{,}10\ mmol.L^{-1}}{4{,}6\ min} = 0{,}022\ mmol.L^{-1}.min^{-1}$$

vitesse volumique

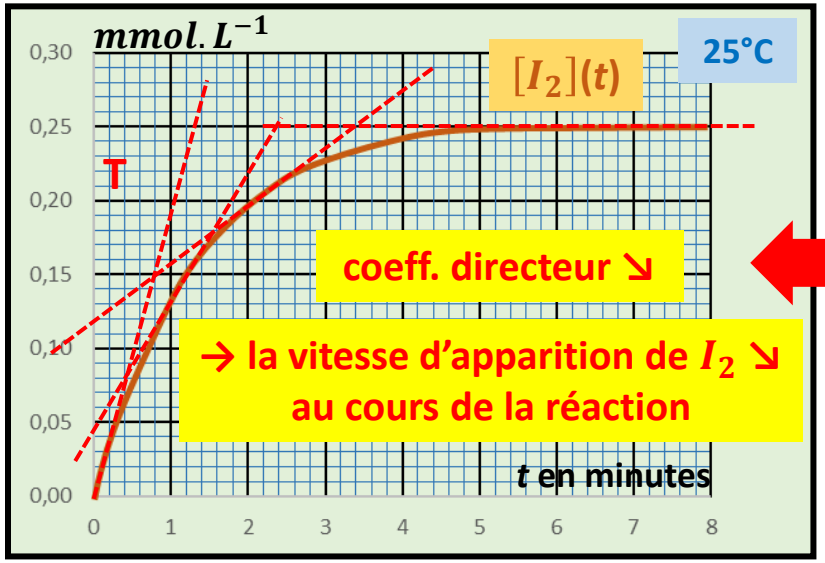
coefficient directeur de $\mathcal{D}$

si $\Delta t \to 0$

$$v_{app,I_2}(1{,}2\ min) = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\Delta[I_2]}{\Delta t} = \frac{y_B - y_A}{x_B - x_A} = \frac{0{,}27 - 0{,}05}{2{,}6 - 0} = 0{,}085\ mmol.L^{-1}.min^{-1}$$

vitesse instantanée ≠ v_{moy} !

coefficient directeur de la tangente T à la courbe $[I_2](t)$ à 1,2 min



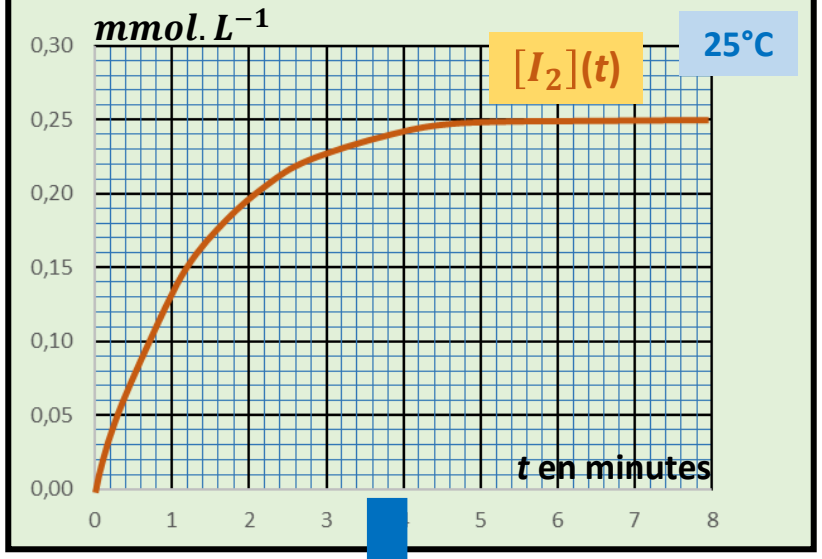
nombre **dérivé** de la fonction $[I_2](t)$ calculé à t = 1,2 min

$$v_{app,I_2}(t) = \frac{d[I_2]}{dt}(t)$$ = coefficient directeur de la tangente à la courbe $[I_2](t)$ à t

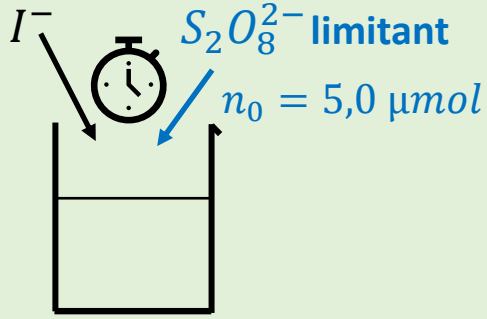
calculée à un instant t

dérivée temporelle de la fonction $[I_2]$

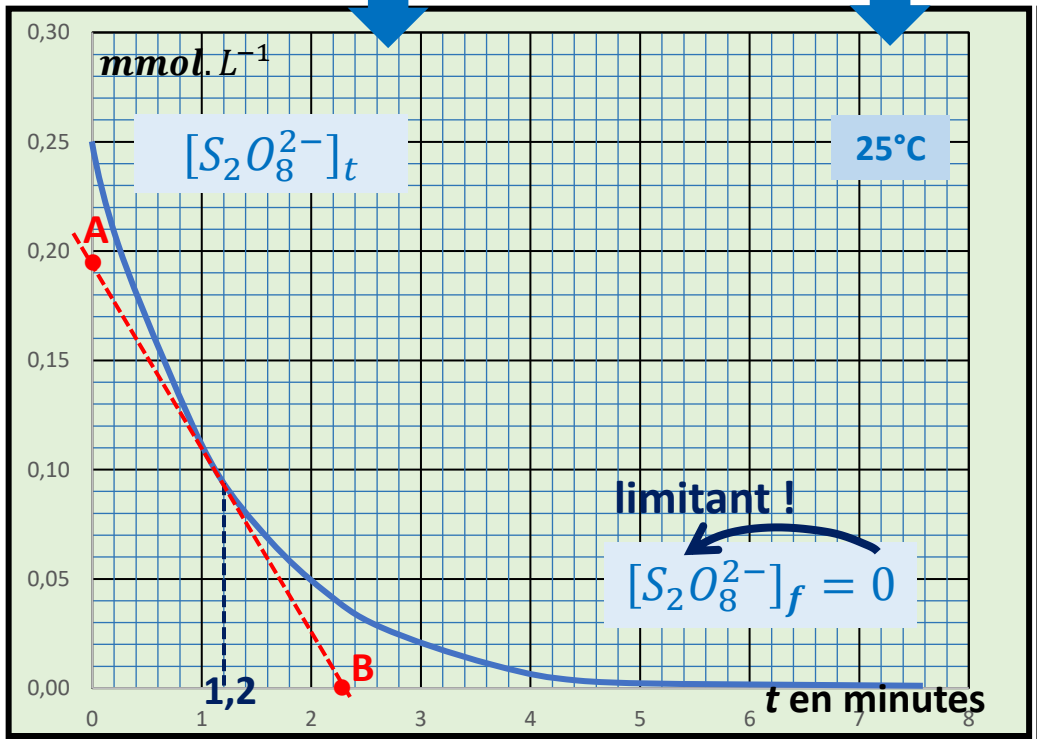
3. Vitesse volumique de disparition d'un réactif



	$2I^-_{(aq)} + S_2O^{2-}_{8(aq)} \rightarrow I_{2(aq)} + 2SO^{2-}_{4(aq)}$	
E.I	n_0	0
à t	$n_0 - x$	x



$$[S_2O_8^{2-}]_t = \frac{n_0}{V_{mél}} - \frac{x}{V_{mél}} = \frac{5{,}0 \times 10^{-6}}{20 \times 10^{-3}} - [I_2]_t = 0{,}25 \times 10^{-3} - [I_2]_t$$



☹ négatif ! ← coefficient directeur de la tangente à la courbe $[S_2O_8^{2-}]$ à t

☺ vitesse positive !

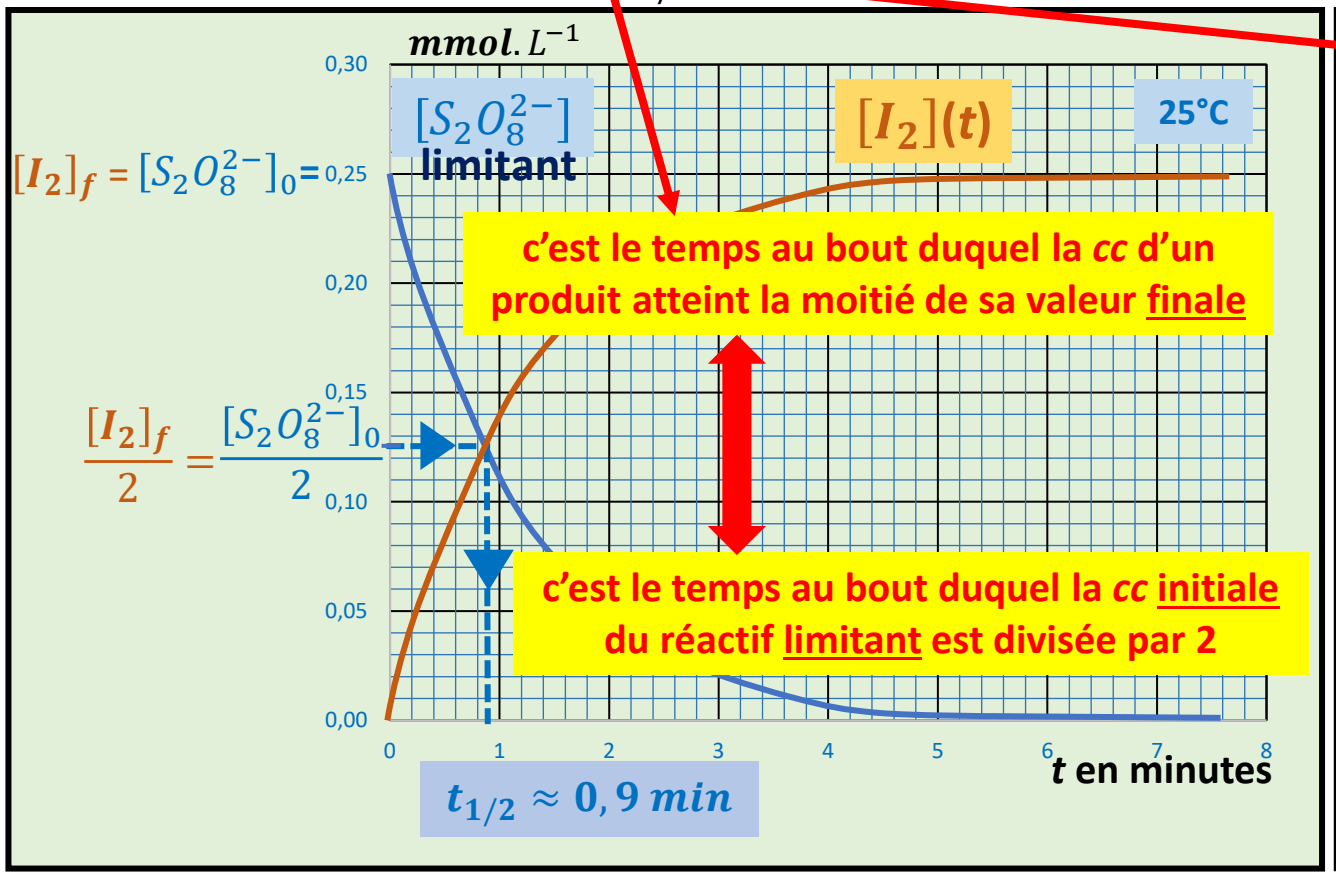
$$v_{disp,\,S_2O_8^{2-}}(t) = -\frac{d[S_2O_8^{2-}]}{dt}(t)$$

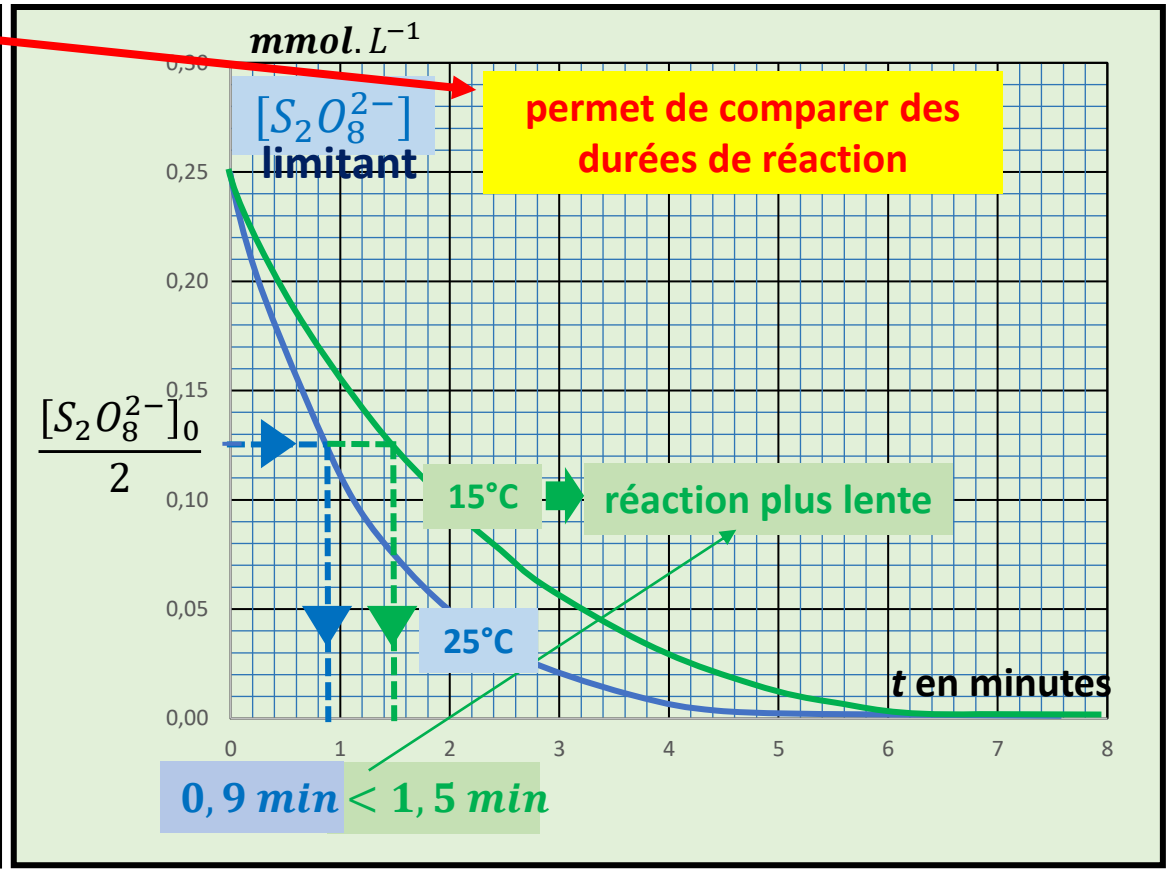
$$v_{disp,\,S_2O_8^{2-}}(1{,}2\ min) = -\frac{y_B - y_A}{x_B - x_A} = -\frac{0 - 0{,}195}{2{,}3 - 0} = -(-0{,}085)$$

$$= 0{,}085\ mmol.L^{-1}.min^{-1}$$

$$= v_{app,I_2}\ (1{,}2\ min)\ !$$

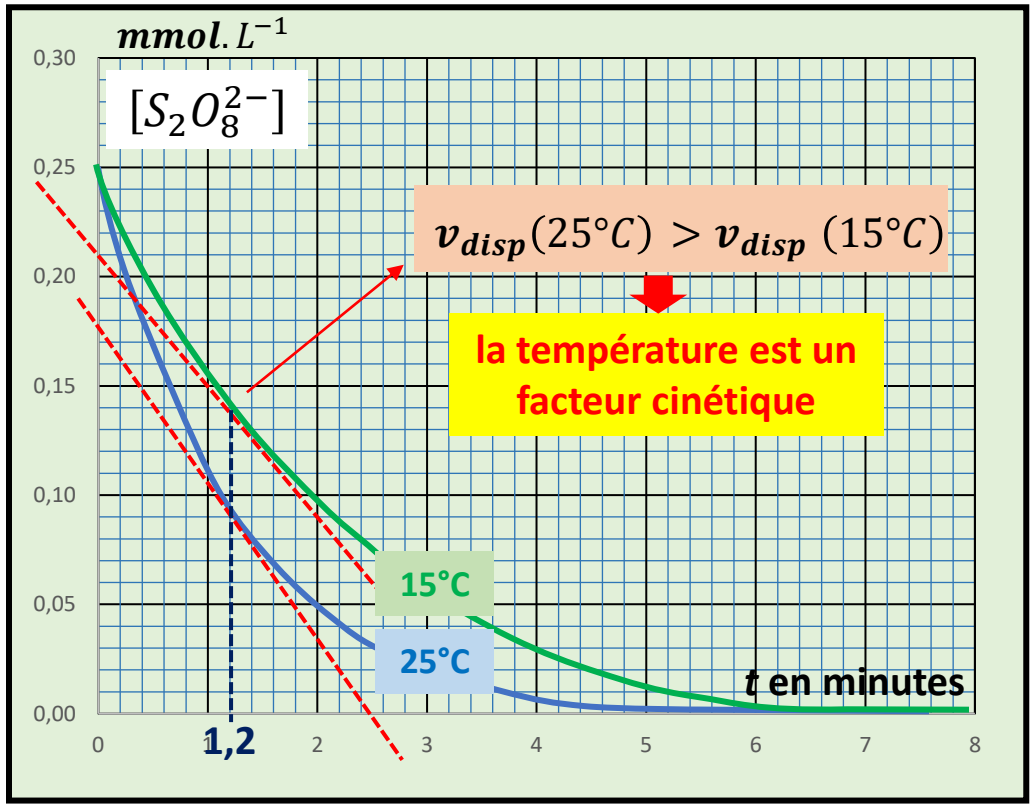
4. Le temps de demi-réaction $t_{1/2}$

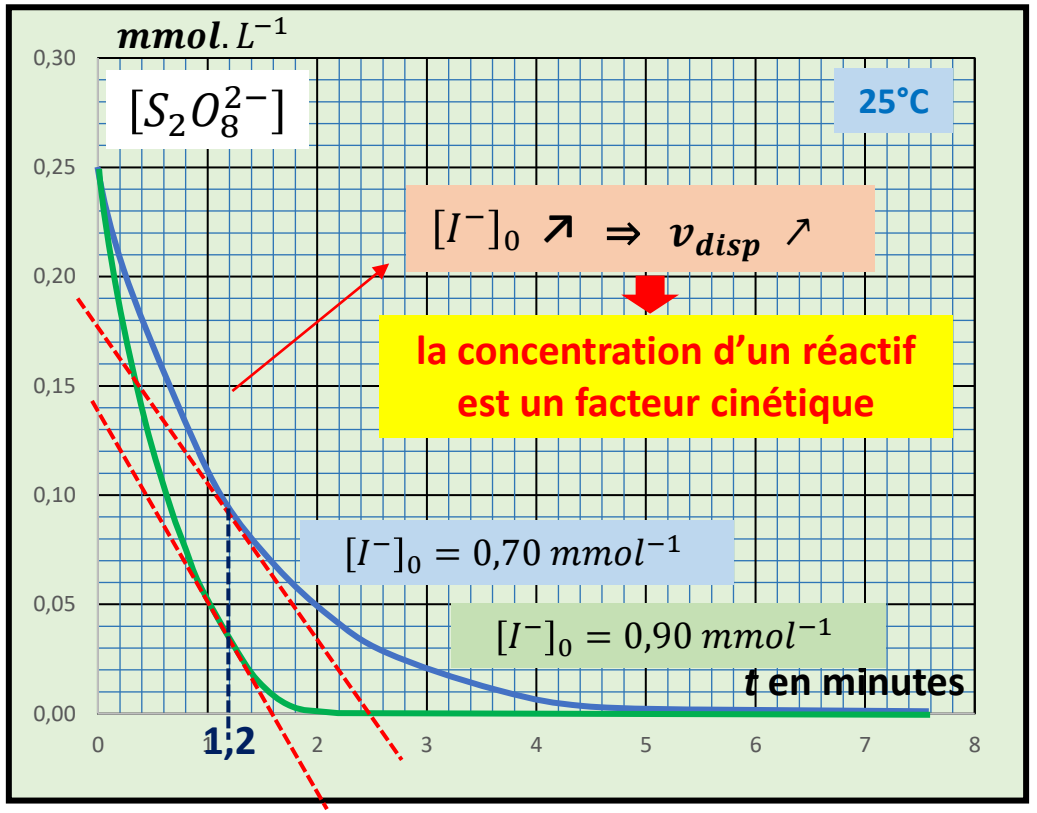




5. Les facteurs cinétiques → paramètres physiques dont la variation modifie la vitesse d'une réaction

$$2I^-_{(aq)} + \underbrace{S_2O^{2-}_{8(aq)}}_{\text{limitant}} \rightarrow I_{2(aq)} + 2SO^{2-}_{4(aq)}$$

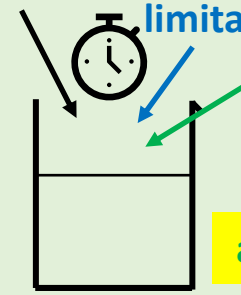




D'autres facteurs cinétiques possibles : la lumière , la nature du solvant

6. Utilisation d'un catalyseur → espèce chimique ajoutée qui accélère une réaction

$2I^-_{(aq)} + S_2O^{2-}_{8(aq)} \rightarrow I_{2(aq)} + 2SO^{2-}_{4(aq)}$: pas dans l'équation de réaction !

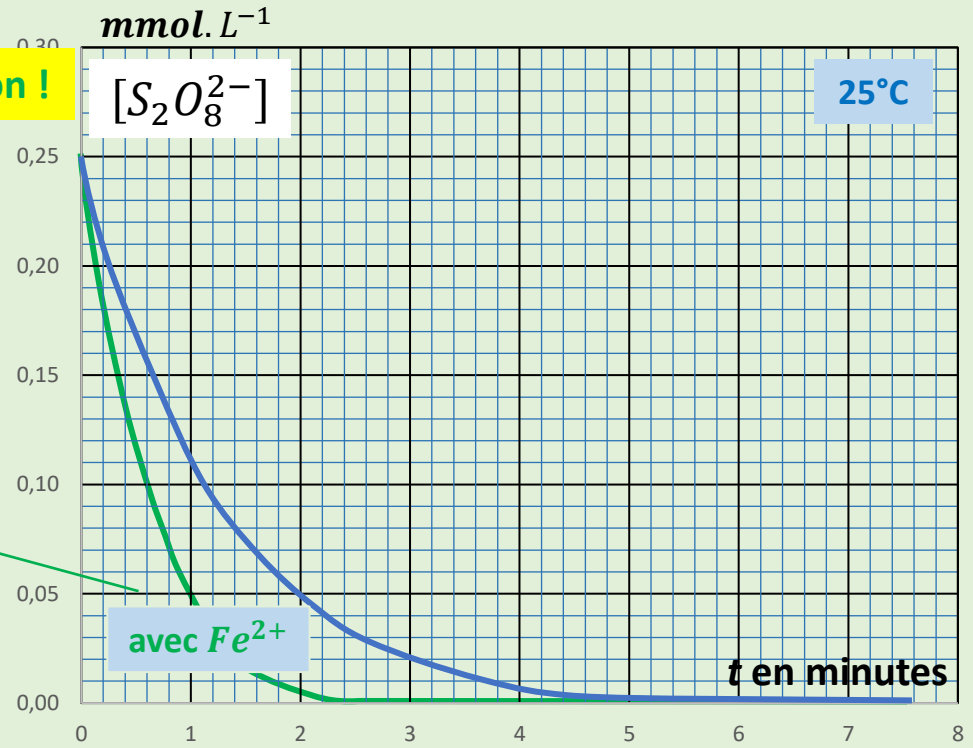


$V_{mél} = 20\ mL$

25°C

catalyseur → Fe^{2+} consommé mais intégralement régénéré à la fin !

accélère la réaction

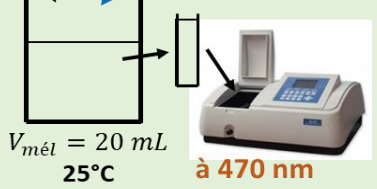


À retenir !

$2I^-_{(aq)} + S_2O^{2-}_{8(aq)} \rightarrow I_{2(aq)} + 2SO^{2-}_{4(aq)}$

limitant

→ absorbance dans le visible



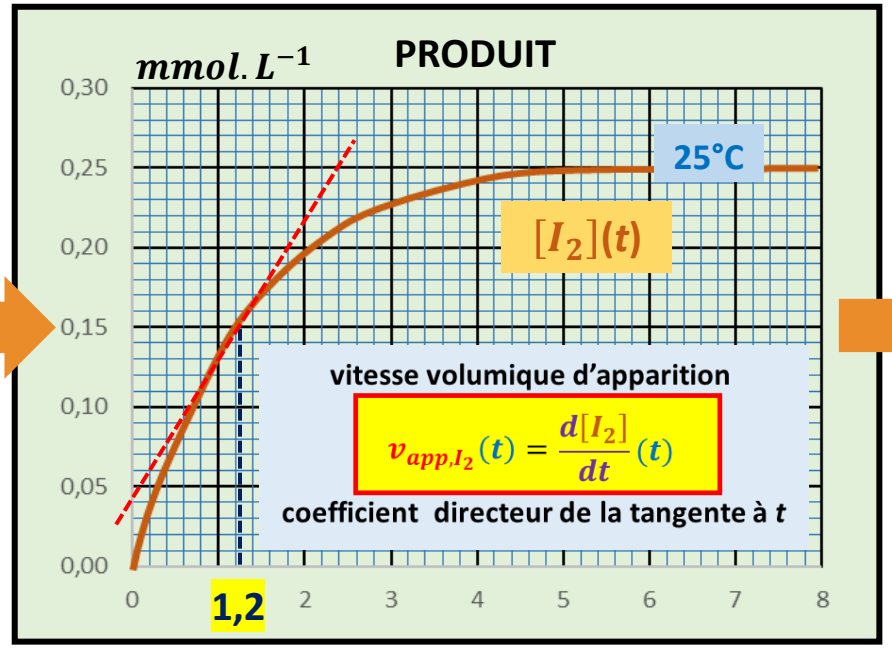
$V_{mél} = 20\ mL$

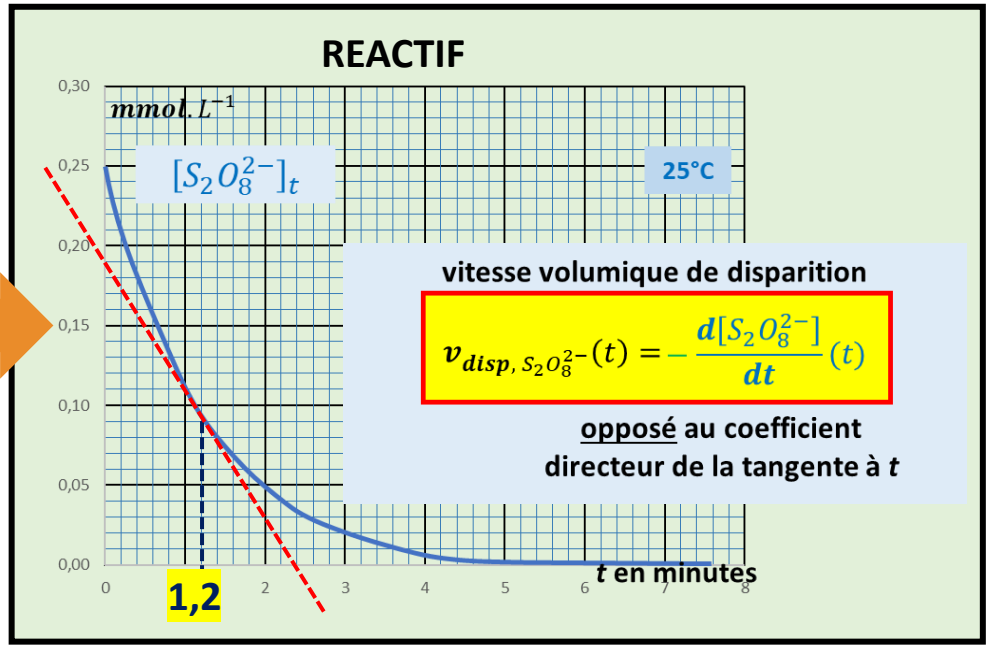
25°C

à 470 nm

suivi temporel possible de :

- l'absorbance
- la pression
- la conductivité



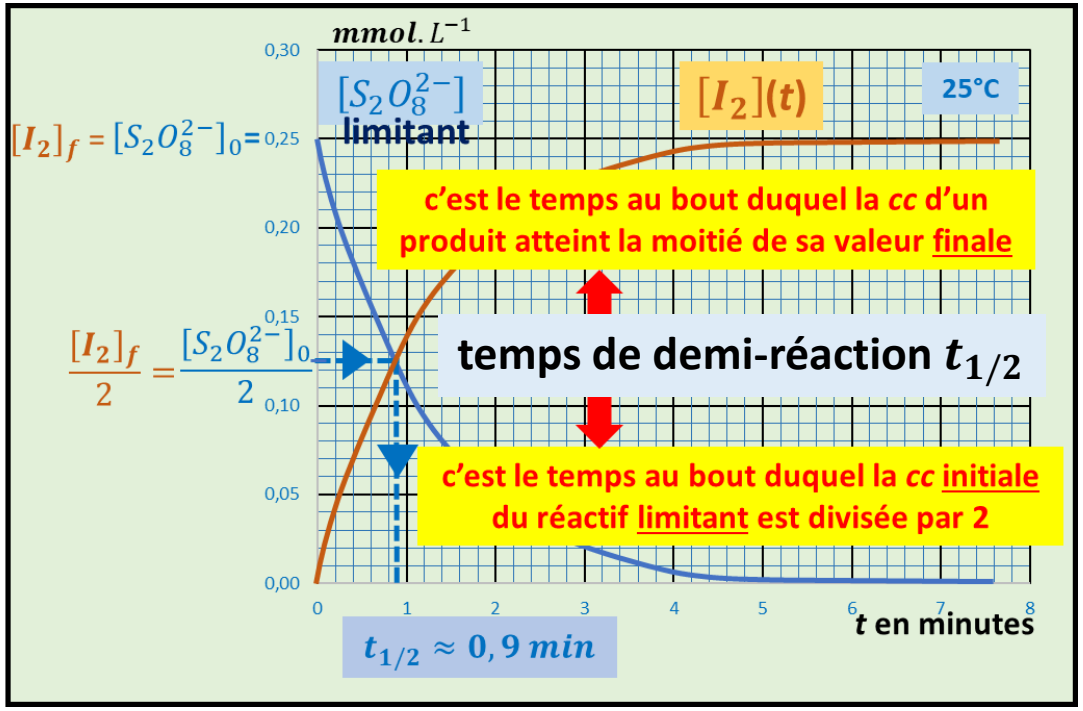


Les facteurs cinétiques

→ paramètres physiques dont la variation modifie la vitesse d'une réaction

pas dans l'équation de réaction !

catalyseur

consommé mais intégralement régénéré à la fin !

accélère la réaction