**Leçon de Chimie**

 **Cinétique , étape élémentaire**

**Elément imposé: effet isotopique**

Référence:

chimie physique atkins théorie eyring

Définition d’une étape élémentaire: ce qui est décrit au niveau macro correspond à ce qui se déroule au niveau micro

Caractéristiques d’une étape élémentaire:

Ordre global=molécularité

Ordre partiel=coefficient stoechiométrique

la réaction inverse est aussi élémentaire

Conséquence si on forme beaucoup de produits cela ne peut pas correspondre à une étape élémentaire.

Pour les exemples de réactions élémentaires et non élémentaires ne pas prendre de réaction radicalaire . Il faut se méfier des radicaux en cinétique.

Mon exemple sur la recombinaison de 2 $H^{.}$ en $H\_{2}$ n’est pas correct (livre Cinétique et Catalyse Gérard Scacchi Lavoisier 2ème édition ). La réaction n’est pas élémentaire à cause de la conservation de l’énergie potentielle en énergie vibrationnelle qui sépare $H\_{2}$.

Il y a en fait un partenaire de collision et le choc est un choc trimoléculaire.

Définition de la molécularité: C’est le nombre d’espèces chimiques qui participent à l’acte élémentaire (équation écrite avec les coefficients stoechiométriques entiers les plus petits possibles).

C’est mieux de définir la vitesse de réaction avant la vitesse de formation ou de disparition des produits on comprends mieux les vitesses spécifiques.

Est ce qu’il y a un ordre pour chaque réaction ? NON lorsque les produits interviennent dans la loi de vitesse ( $H\_{2} + Br\_{2} \rightarrow 2HBr $ la loi de vitesse est un quotient , elle n’admet pas d’ordre). Une réaction peut avoir un ordre initial et pas d’ordre par la suite.

La loi d’arrhénius l’énergie d’activation est la superposition des énergies d’activations de toutes les étapes de la réaction.

$2NO + O\_{2 }\rightarrow 2NO\_{2}$ (l’énergie d’activation est négative , 2 étapes $\leftrightarrow puis \rightarrow $ )

Si la réaction est élémentaire (1 seule étape) alors dans ce cas l’énergie d’activation est bien l’énergie de cette étape.

Avec la théorie d’Eyring , l’énergie d’activation est celle de l’étape élémentaire . ( thermostat calcul des rapport de population)

Pour cette leçon il est nécessaire de faire le lien entre la courbe de Morse et la vitesse de réaction. On montre que l’effet isotopique fait varier la hauteur de la barrière d’activation.

SCHEMA

Il faut savoir ce qu’est la coordonnée réactionnelle: c’est l'abscisse curviligne le long du chemin réactionnel d’énergie minimale .

Phénomène d'hyperconjugaison, la liaison C-H d’un groupement méthyle sur le carbone voisin du carbocation se comporte comme un groupement donneur de 2 e- dans la théorie de Hückel. L’orbitale C-H va interagir avec l’orbitale p vacante (recouvrement stabilisant

Plan suggéré par le prof:

vitesse de réaction

Ordre pas ordre

Ordre=molécularité ou pas

mécanisme

étape élémentaire

conséquences

substitutions isotopiques : montrer l’élucidation d’un mécanisme par $O^{18}$

les effets isotopiques très important avec H et D mais après les autres c’est plus compliqué car le rapport des masses réduites n’est plus de $\sqrt{2}$

Cette leçon peut être une leçon de cinétique beaucoup plus pure.