RÉACTIVITÉ

Partie-1 Introduction à la réactivité

INTRODUCTION ET BASE

- définition d'une réaction chimique et ses differents contrôles

ASPECT THERMODYNAMIQUE

- étude de faisabilité d'une réaction et formules
- introduction de l'enthalpie et entropie

ASPECT CINÉTIQUE

- étude de la vitesse de réaction (apparition et disparition)
- introduction de l'énergie d'activation Ea

LES PROFILS RÉACTIONNELS

- différents exemples et profils de réaction, 3 cas différents
- Postulat d'Hammond

avant de commencer le cours j'espère que vous êtes prêt car c'est la première d'une longue série, soyez concentrés ce cours est important et tombe tout le temps, vous avez en chimie un côté électronique avec les électrons et une partie réactionnel qui demande de la visualisation, il ne faut pas vous décourager, vos effort vont finir par payer, en repassant plusieurs fois dessus si il le faut, c'est rare de réussir dès la première fois, n'oubliez pas pourquoi vous êtes là face à cette fiche, pour qui vous le faites et ne perdez pas de vue vos objectifs cette année, si les autres l'ont fait alors pourquoi pas vous ?
sur ce commençons !!!

INTRO

Pour commencer, qu'est-ce qu'une réaction chimique ?

Réaction chimique : modification de l'agencement spatial des atomes des molécules par une grande instabilité ou un choc avec une autre molécule.

On représente une réaction chimique sous forme d'équation qui va s'écrire :

$$\alpha A + \beta B = \gamma C + \delta D$$

A et B sont les réactifs
C et D sont les produits
α, β, γ et δ sont les coefficients stœchiométriques

on reste sur des rappels de terminale normalement pour vous actuellement et si c'est pas le cas et que vous captez pas c'est pas grave posez vos questions sur le forum

Une équation doit toujours être équilibrée en termes d'éléments chimiques et de charges.
« Rien ne se créé tout se transforme »
Il faut donc qu'il y ait le même nombre de charges d'un côté et de l'autre et qu'on retrouve le même nombre d'atomes de chaque élément présent.

Exemple : 1 NaOH + 1 HCl = 1 NaCl + 1 H2O

Pour que la réaction se fasse, il y a certains prérequis énergétiques.
Les deux grands principes fondamentaux qui régissent la faisabilité et l'évolution de la réaction sont :

- La cinétique : c'est la vitesse de création du produit de la réaction

- La thermodynamique : c'est l'énergie échangée durant la réaction
>> traite des changements d'énergie et d'entropie
La réaction sera toujours dépendante de ces deux facteurs. Selon la réaction, elle peut être soit sous contrôle thermodynamique majoritaire soit sous contrôle cinétique principalement.

II. L'aspect thermodynamique

Pour tout système chimique en évolution on définit un quotient de réaction Qr qui dépend des activités des réactifs et des produits au sein du système
Qu'est-ce que ça veut dire ? le quotient de réaction est en fait la quantité de matière qui va réellement réagir. « a » est donc en fait la quantité de réactif qui va réagir, c'est donc une concentration.

$$Q_R = \frac{[C]^c \times [D]^d}{[A]^a \times [B]^b}$$

Une réaction va se produire dans un sens ou dans l'autre jusqu'à un point d'équilibre noté K. On dit qu'elle est réversible. Lorsque Qr = K, la réaction est à l'équilibre.
À ce point de la réaction, il y aura autant de produits que de réactifs formés.

L'équilibre de chaque réaction, K, dépend de la quantité d'énergie libérée durant la réaction. En termes scientifiques, on parle de variation de l'enthalpie libre standard ΔRG° (ou enthalpie de Gibbs). Pour lier les deux,
on a la relation :

$$\Delta RG^\circ = - R \times T \times \ln(K)$$

ΔRG° : enthalpie libre standard
R : constante des gaz parfaits
T : Température en Kelvins
K : Constante d'équilibre

A température constante, R et T sont constants et ΔRG° ne dépend que de K.

ΔRG° est donc la différence d'énergie entre l'état initial et l'état final de la réaction

Si votre K est très grand alors ΔRG° sera très négatif ce qui signifie que l'état final sera plus bas en énergie que l'état initial. La réaction va donc pouvoir se produire. On dit qu'elle est thermodynamiquement favorable.

L'enthalpie libre standard se calcule (normalement vous n'aurez pas à le faire mais il faut connaître la formule) en fonction de l'enthalpie H (forces de liaisons) et de l'entropie S (propension au chaos) Plus on va vers un système ordonné, moins il y a de désordre donc plus on diminue l'entropie.

$$\Delta RG^\circ = \Delta RH^\circ - T \times \Delta RS^\circ$$

bon je penses que c'est du chinois là pour vous, donc je vais vous expliquer.

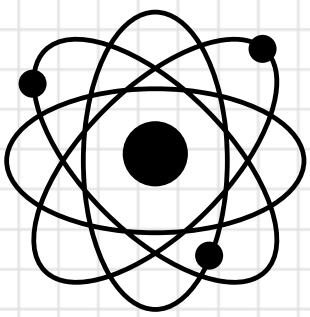
Une réaction chimique est influencée par deux "forces" :

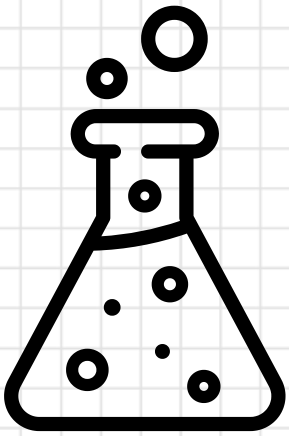
- L'enthalpie (ΔH) : est-ce que la réaction libère de l'énergie (chaleur) ?
- L'entropie (ΔS) : est-ce que la réaction augmente le désordre ?

donc traduction de la phrase en jaune, Plus les molécules sont libres de se déplacer, plus l'entropie est grande.
Plus elles sont rangées et organisées, plus l'entropie est faible, donc

- les molécules deviennent plus organisées ;
- il y a moins de façons de les disposer ;
- donc le désordre diminue ;
- et l'entropie diminue.

si vous avez encore du mal on pose des questions, on reste pas au point mort, sinon vous avancez pas 👌👀





III. Cinétique

On peut aussi étudier la réaction d'un point de vue cinétique. On étudie donc la vitesse de la réaction et la quantité de produit formés au cours du temps.

Il faut savoir que pour chaque équilibre il y aura deux constantes de vitesse k1 et k2. Ainsi, avec ces deux constantes on peut déterminer la constante d'équilibre du système K correspond au quotient des constantes de vitesses k1 et k2
donc 2 constantes de vitesse et une constante d'équilibre du système

$$\alpha A + \beta B \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} \gamma C + \delta D \qquad K = \frac{k_1}{k_2}$$

k1 et k2 sont les vitesses de formation des produits et de formation des réactifs dans le sens inverse. La constante de vitesse k intervient aussi dans les lois de vitesses des réactions :

$V = k[A][B]$ si réaction bimoléculaire (d'ordre 2) la vitesse dépend de la concentration des 2 réactifs
$V = k[A]$ si réaction monomoléculaire (d'ordre 1) la vitesse ne dépend de la concentration que d'un seul réactif

Plus k est grand, plus la vitesse sera rapide.

Pour calculer k, on va utiliser la loi d'Arrhenius :

$$k = Ae^{\frac{-Ea}{RT}}$$

·A : Constante qui dépend de la fréquence de collision et du facteur stérique

· Ea : Énergie d'activation

· R : Cte des gaz parfaits (8,314J.mol.K-1)

· T : température (K)

pour comprendre essayer de calculer la limite de cette fonction, la constante n'influence pas l'évolution, R et T sont constant si on considère que la temperature n'évolue pas, donc si Ea augmente alors le quotient est encore plus négatif donc l'exponentielle tend vers 0, K sera petit donc réaction lente, et inversement plus il est petit voir négatif alors le quotient se rapproche de valeur positive donc exp grandi, K aussi, la réaction ira donc plus vite.

Ainsi, plus l'énergie d'activation Ea est élevée, plus la réaction est lente.

pour une réaction donnée l'Ea est fixe, cette exemple sert à comparer la vitesse de réaction de 2 réaction différentes

Mais comment on peut faire varier la vitesse d'une réaction si l'énergie d'activation Ea est fixe, R est fixe et A est fixe ?

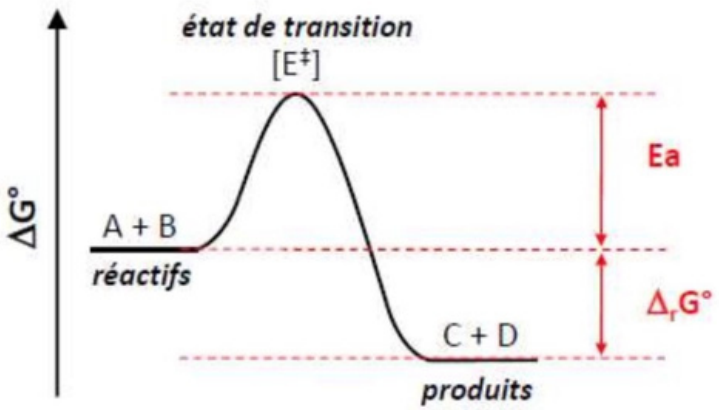
On joue sur la TEMPÉRATURE !

Une augmentation de T permet d'accélérer la réaction alors qu'une baisse de la T ralentira la réaction.

Un autre facteur qui joue sur la vitesse est la taille des molécules. Plus on va augmenter la taille des molécules ou l'encombrement stérique au niveau du site réactionnel, plus on aura tendance à ralentir la vitesse de la réaction. (Le site réactif est encombré, les molécules ne bougent pas comme elles veulent, c'est plus difficile de réagir)

IV les profils réactionnels

Grâce à tout ce qu'on a vu, on peut faire une courbe qui décrit l'énergie de la réaction depuis les réactifs jusqu'aux produits :



On remarque plusieurs choses :

l'énergie d'activation qu'est le pic qu'il faut franchir énergétiquement pour déclencher la réaction. Cela correspond à l'énergie et l'instabilité de l'intermédiaire de la réaction

.

La différence d'enthalpie entre les réactifs et les produits. Plus elle est élevée, plus la réaction sera thermodynamiquement favorable

État de Transition E‡ : barrière à franchir pour passer aux produits, il n'est ni isolable, ni caractérisable. l'énergie lui correspondant est l'Ea.

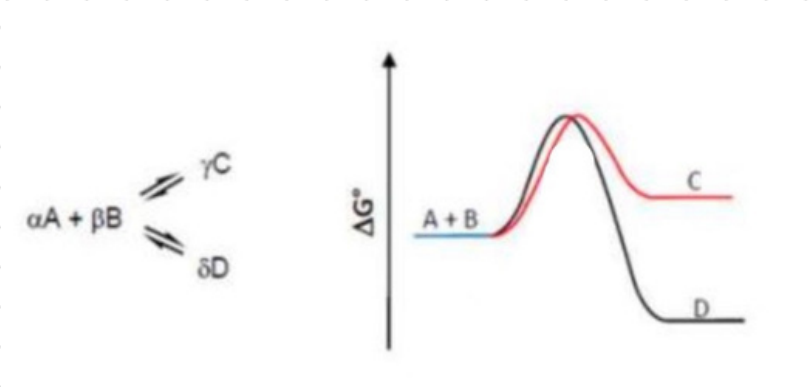
La différence d'énergie entre réactif et état de transition E‡ (Ea) aura une influence sur la cinétique de la réaction

La différence d'énergie entre réactifs et produits ΔRG° aura une influence sur la thermodynamique de la réaction.

L'énergie d'activation Ea : différence entre les réactifs et l'état de transition E ‡ .

Cas de réactions compétitives:

Nos deux composants pour observer l'évolution d'une réaction chimique sont donc Ea et ΔRG°. Pour faire une analyse de la réaction on peut étudier plusieurs cas.



Cas n°1

Comment savoir quel produit sera majoritaire ? C ou D ? Comment ça fonctionne ?

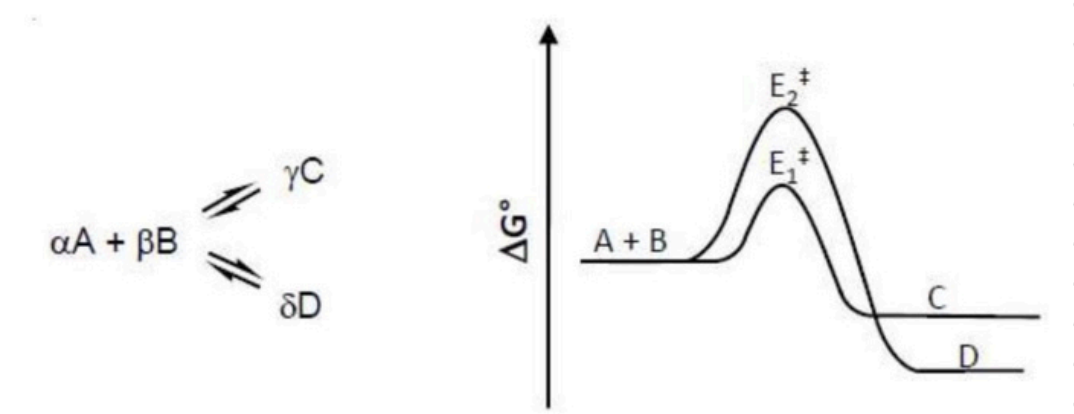
Cas simple avec 2 réactifs qui vont réagir entre eux pour donner un produit. Par exemple : le produit C ou D

Si on a la même énergie d'activation Ea (ici on remarque que l'état de transition est au même niveau pour les 2 voies). Entre la voie A+B → C et A+B → D on a le même état de transition, ainsi, la voie est identique au départ pour les deux réactions. La cinétique de la réaction est identique dans les deux voies !

En revanche, dans la voie qui conduit au produit C on constate que l'énergie du produit est supérieure à l'énergie des réactifs, tandis que le produit D son énergie est inférieure aux réactifs.

Il faut savoir que si ΔRG°>0 la réaction est endergonique (consomme de l'énergie), à l'inverse ΔRG°<0 la réaction est exergonique (libère de l'énergie).

Le but c'est de produire le produit le plus stable possible, avec le moins d'énergie possible, donc on va produire préférentielle le produit D. Comme les Ea sont égales on dit que la formation de D est thermodynamiquement favorisée.

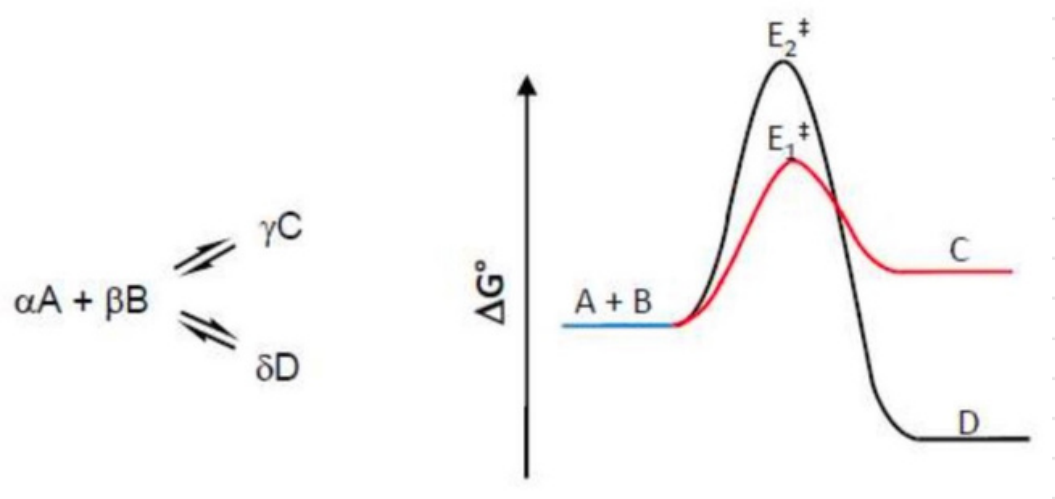


Cas n°2:

On observe ici que les Ea sont différentes ce qui a pour impact de créer des états de transition différents tel que E‡2< E‡1.
E2 étant supérieur à E1 la voie conduisant à C est cinétiquement favorisée. D'un point de vue cinétique on va donc préférentiellement vers la synthèse de C par rapport à celle de D. En revanche, on remarque ΔRG° de D est inférieur à celui de C. Donc D est thermodynamiquement favorisé par rapport à la synthèse de C.

Comment faire pour trancher ?

Dans cette situation, les deux voies sont exergoniques car les ΔRG° sont tous deux négatifs. Ainsi, la différence d'enthalpie entre C et D est faible et que ces deux voies de synthèse sont exergoniques on va préférentiellement s'orienter vers la synthèse de C car elle est exergonique + favorisée cinétiquement !
D'ailleurs, pour savoir si le ΔRG° est négatif ou positif on regarde l'énergie des réactifs (à gauche) et
si celle des produits (à droite) est supérieure -> endergonique -> positif mais si elle est inférieure ->
exergonique -> négatif
La voie qui conduit vers C est donc plus réactive.
Qu'est-ce que ça veut dire ? pour des paramètres thermodynamique égaux (ou proches), c'est la réaction la plus rapide, qui demande une énergie d'activation la moins importante qui sera cinétiquement favorisée.



Cas n°3:

Ici tous les paramètres sont diffèrent, comment savoir quel produit est favorisé...

On s'intéresse d'abord au paramètre thermodynamique. Comme ΔRG°(C) est positif il faut apporter davantage d'énergie pour arriver à C par rapport à D.

Il est donc plus facile d'aller vers D que vers C. La voie D est donc favorisé par rapport à celle de C. Si on veut encore plus favoriser la voie D, il suffit d'augmenter la température, on va diminuer le rapport K (Cf. la loi d'Arrhenius) et donc plus facilement (et plus rapidement, et oui c'est un contrôle cinétique !) franchir la barrière d'activation.
En effet, il est possible d'exercer un contrôle sur l'évolution de la réaction en jouant sur la température :

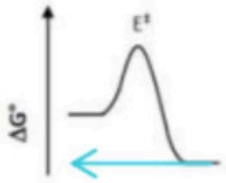
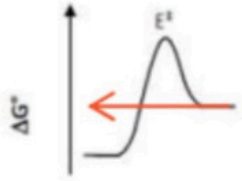
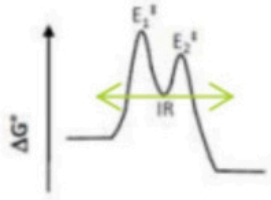
Augmentation de température → $E^‡2$ sera plus facilement franchi pour aller vers le produit D qui est le plus stable (car moins élevé en énergie)

Baisse de température → favorise la voie la moins demandeuse en énergie (d'activation Ea), donc ici la voie C

Postulat de Hammond:

Postulat de Hammond : la structure de l'état de transition se rapprochera de celle de la molécule isolable la plus proche en énergie.

En d'autres termes :

Dans une réaction sans IR (intermédiaire réactionnels) :	
E‡ sera structurellement proche des réactifs dans une réaction exergonique	
E‡ sera structurellement proche des produits dans une réaction endergonique	
Dans une réaction avec IR :	
E‡ sera structurellement proche des IR dans dans tous les cas.	

La connaissance du niveau énergétique des états de transition est indispensable pour connaître la cinétique de la réaction. Le problème c'est que ces états ne sont pas isolables, on ne peut pas définir leur structure et donc classer leur stabilité. Ces états de transition ne peuvent être connus, mais on peut émettre des suppositions pour savoir à quoi ils ressemblent via ce postulat

dédi à oumayma aïcha et bouchra
dédi à yazouzou, kasousou moumoune cycle de krebs et masry
dédi à la parisienne d'alger
dédi à khobz khobz khobz
dédi à pas de buzz, schtrumpfs compresser et nachos
dédi à moi et moi même
dédi aux 2H hamza et hedi
dédi au philosophe 👀 abdel
dédi à rideaux
dédi à moha
dédi à mon pouce
dédi à shai et margaux
dédi à assia lydia et sheryne



dédi à marwa vieille tutrice kiné 10/10 😎
dédi à elgrandetoto
dédi à la voilée de janvier
dédi à la vicieuse d'avril
dédi à la décla de décembre
dédi à la folle de juillet
dédi à l'3sal of the smen
dédi à chapati
dédi à mes cousins les 2S et 2H
safwen souhaib hassan et hamdi
dédi à celle qui a ruiner mon couple
dédi à friday de booba
dédi à booba
dédi à 92 uuuzzuiiii

