CH C4 - Suivi temporel et modélisation macroscopique

Thème 1 : Constitution et transformations de la matière

2. Modéliser l'évolution temporelle d'un système, siège d'une transformation

A) Suivre et modéliser l'évolution temporelle d'un système siège d'une transformation chimique

Notions et contenus	Capacités exigibles Activités expérimentales support de la formation
Suivi temporel et modélisation macroscopique Transformations lentes et rapides.	Justifier le choix d'un capteur de suivi temporel de l'évolution d'un système.
Facteurs cinétiques : température, concentration des réactifs. Catalyse, catalyseur.	Identifier, à partir de données expérimentales, des facteurs cinétiques. Citer les propriétés d'un catalyseur et identifier un catalyseur à partir de données expérimentales. *Mettre en évidence des facteurs cinétiques et l'effet d'un catalyseur.*
Vitesse volumique de disparition d'un réactif et d'apparition d'un produit. Temps de demi-réaction.	À partir de données expérimentales, déterminer une vitesse volumique de disparition d'un réactif, une vitesse volumique d'apparition d'un produit ou un temps de demi-réaction. *Mettre en œuvre une méthode physique pour suivre l'évolution d'une concentration et déterminer la vitesse volumique de formation d'un produit ou de disparition d'un réactif.*
Loi de vitesse d'ordre 1.	Identifier, à partir de données expérimentales, si l'évolution d'une concentration suit ou non une loi de vitesse d'ordre 1. **Capacité numérique :** À l'aide d'un langage de programmation et à partir de données expérimentales, tracer l'évolution temporelle d'une concentration, d'une vitesse volumique d'apparition ou de disparition et tester une relation donnée entre la vitesse volumique de disparition et la concentration d'un réactif.

CH C4 - Suivi temporel et modélisation macroscopique

La cinétique chimique est l'étude de la vitesse des réactions chimiques. Connaître les vitesses de réaction est très important dans la vie courante.
Exemples : explosion (moteur, airbag…), collage, dégradation (corrosion des matériaux, déchets, …).

1. Durée de réaction

1.1. Réaction lente ou rapide

La transformation d'un système chimique est dite :

- **rapide** si la réaction est instantanée ou ne dure que quelques secondes ; on ne peut pas la suivre à l'œil nu ou avec un capteur courant ;
- **lente** lorsque l'évolution du système dure de quelques secondes à plusieurs minutes ; on peut la suivre à l'œil nu ou avec un capteur courant ;
- **infiniment lente** lorsque le système met plusieurs jours voire plusieurs mois ou années pour évoluer.

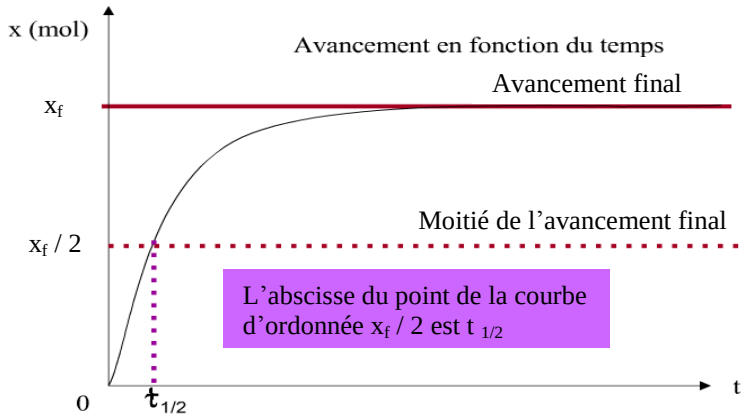
En fonction de la vitesse de la transformation, il faut donc être capable de choisir le bon capteur pour suivre l'évolution.

1.2. Evolution au cours du temps

Effectuer le suivi temporel de l'évolution d'un système chimique consiste à répéter la mesure de la quantité de matière (ou de la concentration) d'un réactif ou d'un produit à différents instants. Ce qui revient également à suivre l'**avancement** de la réaction en fonction du temps.
Pour mesurer une quantité de matière (ou une concentration) en fonction du temps, on dispose d'une méthode chimique (par titrage de prélèvements de la solution à intervalle de temps régulier), et de méthodes physiques (par conductimétrie, pHmétrie, spectrophotométrie, …).

1.3. Temps de demi-réaction

Dans la pratique, pour étudier le suivi de la réaction on détermine le temps de demi-réaction.
Le temps de demi-réaction $t_{1/2}$ est la durée nécessaire pour que l'avancement parvienne à la moitié de sa valeur finale.
L'évolution du système est pratiquement terminée au bout d'une durée de l'ordre de quelques $t_{1/2}$.



1.4. Vitesse volumique

La vitesse volumique de disparition d'un réactif **R** ou d'apparition d'un produit **P** montre la variation de la concentration de l'espèce en fonction du temps. Elle s'exprime en $mol.L^{-1}.s^{-1}$ et est positive.

Vitesse d'apparition d'un produit :

$$v_a = \frac{d[P](t)}{dt}$$

Avec [P](t) : concentration du produit P qui varie en fonction du temps
$\frac{d}{dt}$: dérivée par rapport au temps

Vitesse de disparition d'un réactif :

$$v_d = -\frac{d[R](t)}{dt}$$

Avec [R](t) : concentration du réactif R qui varie en fonction du temps
Le signe – se justifie pour avoir une vitesse positive puisque la concentration de R diminue au cours du temps.

Remarque mathématique :
La dérivée par rapport au temps d'une grandeur x sert à montrer la variation de x par rapport au temps. Ainsi, si l'on choisit deux instants successifs très proches, on peut faire l'approximation :

$$\frac{dx}{dt} \approx \frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{x_2 - x_1}{t_2 - t_1}$$

Loi de vitesse d'ordre 1 :

Si la vitesse de disparition d'un réactif est proportionnelle à la concentration du réactif, alors on dira que la vitesse suit une loi d'ordre 1.

Ainsi : $v_d = k \,.\, [R](t)$ avec k : constante de vitesse en s^{-1}.

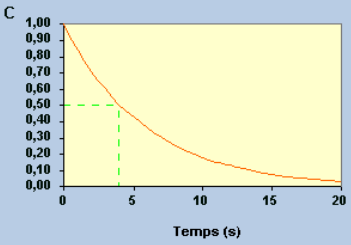
Comment savoir si l'évolution d'une concentration suit ou non une loi de vitesse d'ordre 1 ?

On a $v_d = k \,.\, [R](t)$ d'où $-\frac{d[R](t)}{dt} = k \times [R](t)$

C'est une équation différentielle d'ordre 1 sans second membre dont la résolution donne une fonction exponentielle :

$$[R](t) = [R]_i \times e^{-k \times t}$$

Avec $[R]_i$: concentration initiale du réactif R.



On peut donc vérifier que la concentration d'un réactif suit une loi de vitesse d'ordre 1 si :

+ la concentration [R] en fonction du temps est modélisable par une fonction exponentielle ;

ou

+ la vitesse de disparition v_d en fonction de la concentration du réactif est modélisable par une fonction linéaire.

2. Facteurs cinétiques

Un facteur cinétique est un paramètre capable d'influencer la vitesse de la transformation chimique. La **température**, la **concentration des réactifs** sont des facteurs cinétiques mais il y en a d'autres comme la pression, la lumière, l'état physique, la surface de contact, le solvant ...

2.1. La température

En général, la réaction chimique est d'autant plus rapide que sa température est élevée. En effet, l'augmentation de la température provoque une augmentation de l'agitation thermique c'est-à-dire une augmentation de la vitesse des molécules. Ainsi, la fréquence des chocs entre les espèces pouvant réagir est améliorée et la réaction s'effectue beaucoup plus rapidement.
Le **montage à reflux** utilise ce principe pour réaliser une synthèse rapidement.
Par ailleurs l'effet inverse est utilisé pour la conservation des aliments en les plaçant au réfrigérateur ou au congélateur.

2.2. La concentration des réactifs

En général, la réaction chimique est d'autant plus rapide que les concentrations des réactifs sont élevées. En effet, plus les espèces sont nombreuses plus la fréquence des chocs est améliorée et donc plus la réaction s'effectue rapidement.
Cependant, au cours de la transformation, les réactifs sont consommés et les chocs sont donc moins fréquents. C'est pourquoi la vitesse des réactions chimiques décroît généralement au fur et à mesure de leur avancement.

3. Catalyse

Un catalyseur est une espèce chimique qui diminue la durée d'une réaction sans en modifier le bilan. Lors de la transformation, il est consommé et intervient en accélérant la transformation mais il est ensuite régénéré ce qui fait qu'il n'apparaît dans l'équation bilan. Bien choisi, il peut aussi éviter des réactions parasites, on parle alors de **catalyse sélective**.

3.1. Catalyse hétérogène

Une catalyse est dite **hétérogène** lorsque les réactifs et le catalyseur forment deux phases distinctes. Dans le cas d'un catalyseur solide, la réaction se produit à la surface du catalyseur. Cette surface, qui se retrouve inchangée à la fin de la réaction, doit être la plus grande possible. C'est pourquoi on utilise en général des poudres ou des mousses métalliques mais le prix est élevé.

3.2. Catalyse homogène

Une catalyse est dite **homogène** lorsque les réactifs et le catalyseur ne forment qu'une seule phase (liquide ou gazeuse). Ce type de catalyse est moins coûteux mais il est plus difficile d'extraire le catalyseur.

3.3. Catalyse enzymatique

Une catalyse est dite **enzymatique** lorsque le catalyseur est une enzyme (souvent une protéine) élaborée par les systèmes vivants. Les enzymes sont des catalyseurs très **efficaces et sélectifs**. En biologie par exemple, dans les cellules, les enzymes très nombreuses, jouent ces rôles d'accélérateur dans les processus biochimiques tels que : la digestion, la reproduction, la transcription de l'information génétique, mais aussi pour le yaourt, la pâte à pain, etc.