

La cinétique chimique n'a donc pas comme seul objectif d'optimiser les réactions dans l'industrie chimique, l'un de ces domaines d'application est de valider ou non les mécanismes de réactions proposés et ainsi améliorer la compréhension des réactions chimiques.

Confronter la théorie et l'expérience fait partie du quotidien d'un chercheur spécialisé dans la cinétique chimique. Pour cela il s'appuie sur des programmes informatiques afin de résoudre les systèmes d'équations différentielles données par les mécanismes réactionnels, insolubles par l'homme, et pour vérifier que la modélisation correspond aux valeurs expérimentales.

Document 1 : Etude de la réaction non catalysée

On étudie la réaction d'oxydoréduction entre les ions iodures I^- et les ions peroxydisulfate $S_2O_8^{2-}$.

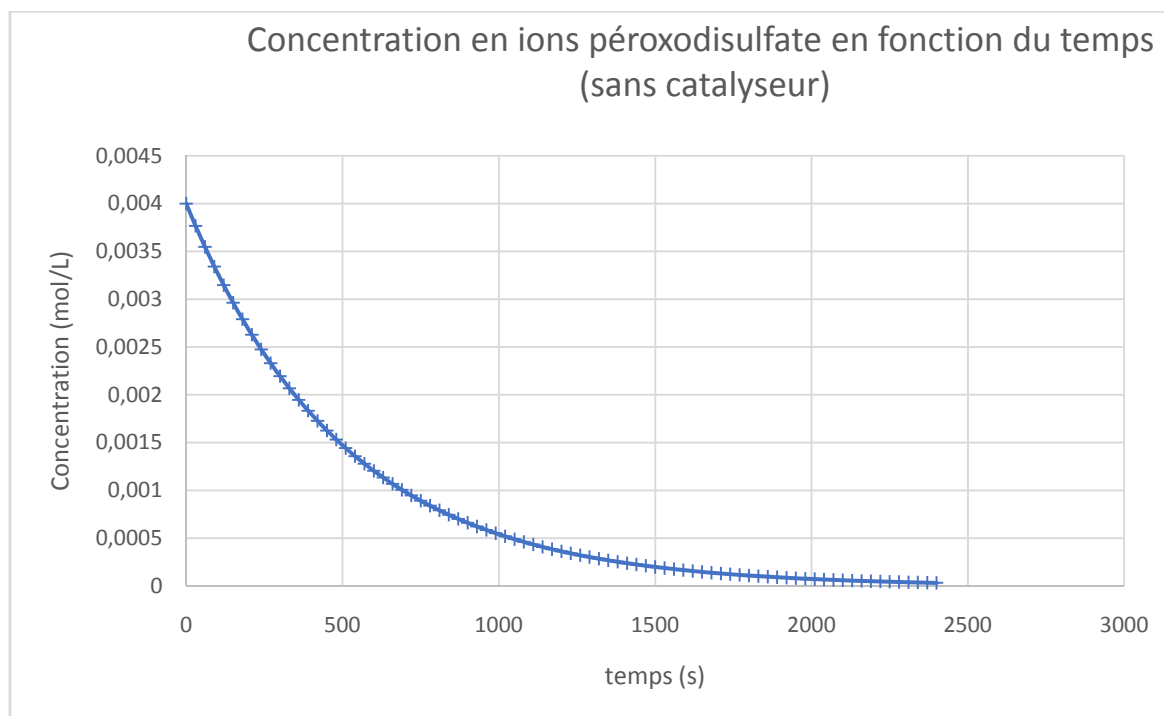
◇ *Solutions aqueuses mise à disposition :*

- S_1 : iodure de potassium ($K^+(aq) + I^-(aq)$) de concentration en quantité de matière $0,20 \text{ mol.L}^{-1}$.
- S_2 : peroxydisulfate de sodium ($2Na^+(aq) + S_2O_8^{2-}(aq)$) de concentration molaire $8,0 \cdot 10^{-3} \text{ mol.L}^{-1}$
- S_3 : sulfate de fer (II) ($Fe^{2+}(aq) + SO_4^{2-}(aq)$) de concentration molaire $0,10 \text{ mol.L}^{-1}$.

◇ Le protocole suivant a été mis en œuvre pour étudier la réaction sans catalyseur :

- On prélève 20,0 mL de solution S_2 et les introduire dans un bécher A.
- Dans un bécher B, introduire environ 20mL de solution S_1
- On verse le mélange obtenu dans une cuve que l'on introduit dans le spectrophotomètre réglé sur une longueur d'onde de 470nm.
- On lance l'acquisition automatique de l'absorbance toutes les 20secondes durant 10 minutes .

◇ Résultats de l'expérience sans catalyseur : courbe suivante

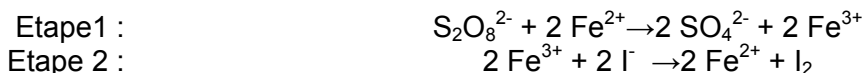
**Document 2 : Etude de la réaction catalysée:**

- ◇ On suit le même protocole que le celui du document 1 mais on ajoute 0,5mL de solution S_3 contenant le présumé catalyseur Fe^{2+} .
- ◇ On obtient un fichier CSV contenant les données de l'acquisition : « Abs_Temps_catalyseur.csv »
- ◇ Récupérer ce fichier depuis l'atelier, le copier en local sur D:\ dans un dossier nommé "suivi-cinétique-python"

Document 3 : Le mécanisme proposé :

Une étude montre que les catalyseurs lors d'une réaction modifient le mécanisme réactionnel, ils peuvent notamment décomposer des étapes de la réaction lentes en plusieurs étapes rapides.

Ici, les couples oxydants-réducteurs suggèrent que le catalyseur Fe^{2+} décompose la réaction en deux étapes :



Dans l'hypothèse où ce mécanisme est correct, deux options sont possibles :

- Option 1 : L'étape 1 impose sa vitesse à la réaction, dans ce cas la loi de vitesse prévoit que l'ordre de $\text{S}_2\text{O}_8^{2-}$ soit de 1.
- Option 2 : L'étape 2 impose sa vitesse à la réaction, dans ce cas la loi de vitesse prévoit que l'ordre de $\text{S}_2\text{O}_8^{2-}$ soit de 0.

Document 4 : L'ordre d'une réaction :

En chimie, une réaction admet un ordre par rapport à un réactif A si la loi de vitesse est de la forme :

$$V = k [A]^n$$

n : ordre du réactif (nombre entier).

k : constante de vitesse de la réaction.

A partir de cette loi de vitesse et de la définition de la vitesse on peut établir que :

- **Si n = 0 (ordre 0)** : alors la concentration de A en fonction du temps est une fonction affine décroissante :

$$[A] = -k t + [A]_0$$

- **Si n = 1 (ordre 1)** : alors la concentration de A en fonction du temps est une fonction exponentielle décroissante :

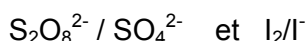
$$[A] = [A]_0 \exp(-kt)$$

Préparation du programme informatique de modélisation :

- ◇ Récupérer le fichier : "Suivi_cinetique-eleve.py" depuis l'atelier, le copier en local sur D:\ dans le dossier précédemment créé "suivi-cinétique-python"
- ◇ Ouvrir le programme Python avec Edupython depuis le menu-démarrer/programmes/prog reseau/info

Ce programme est incomplet, il faut renseigner les informations de la réaction étudiée :

- 1) Écrire l'équation de la réaction qui a lieu sachant que les couples oxydants réducteurs mis en jeu sont :



- 2) Déterminer la concentration initiale en ions peroxodisulfate dans le mélange et entrer sa valeur dans le programme Python (ligne 18).

.....
.....
.....
.....
.....

- 3) Établir la relation entre l'absorbance et la concentration en diiode.

.....
.....
.....
.....

- 4) Compléter le tableau d'avancement ci-dessous et établir l'expression de la concentration en ions peroxodisulfate en fonction de l'absorbance. Compléter le programme Python(ligne 31).

	+ → +			
État initial (x = 0)				
État intermédiaire (x)				

[illegible]

- 5) On peut définir la vitesse de réaction comme la vitesse de disparition des ions peroxydisulfate. Donner l'expression de la vitesse de réaction v en fonction de la concentration en ion peroxydisulfate. Relever les lignes d'instruction réalisant ce calcul dans le programme Python.

.....

.....

.....

.....

- 6) Une fois complété, exécuter le programme et copier ci-dessous les courbes obtenues en notant les équations des modélisations associées.**

1) Efficacité des ions Fe^{2+} comme catalyseurs :

La détermination graphique des temps de demi-réactions pour la réaction avec et sans catalyseur donne les résultats suivants :

Par conséquent, nous pouvons affirmer que les ions Fe^{2+} sont

2) Ordre de la réaction :

L'expérience a permis d'établir que la réaction est d'ordre en effet, les graphiques montrent que

3) Mécanisme de la réaction :

La confrontation entre les résultats expérimentaux et les lois de vitesse prévues par les différentes options du mécanisme permet d'affirmer que