



Approche nanoscopique de la réaction chimique

Notion d'entité chimique

On appelle entité chimique tout arrangement d'atomes stables (ion, molécule, atome isolé, ...)

Seules au monde ?

Une entité chimique est extrêmement petite. Ainsi, le moindre verre d'eau contient de l'ordre de 10^{24} molécules d'eau. Une transformation chimique implique donc un grand nombre d'entités. On peut alors utiliser une approche statistique et probabiliste lors de l'étude d'une transformation chimique.

Chacun chez soi ?

1. Etat solide.

Milieu compact et ordonné. Les entités chimiques constituant le solide vibrent autour de leur position d'équilibre, mais entrent très peu en contact les unes avec les autres.

2. Etat gazeux.

Milieu dispersé et très désordonné. Les entités chimiques constituant le gaz circulent librement dans un "vaste" espace. Elles peuvent parcourir de "grandes" distances avant de rencontrer une autre entité.

Rq : Cette caractéristique est à l'origine de l'approximation des gaz parfaits. Lors de l'étude d'un tel gaz, on considère que les entités gazeuses n'interagissent pas entre elles. Elles agissent comme si elles étaient seules dans le milieu étudié. Toutefois, à haute pression, on ne peut plus négliger l'interaction entre entités constituant le gaz.

3. Etat liquide.

Milieu compact et désordonné. Les entités chimiques constituant le liquide se déplacent librement dans un "espace réduit", et ont donc de nombreuses occasions de se croiser.

C'est pour cette raison qu'une grande partie de la chimie se fait à l'état liquide.

Choc

La rencontre entre deux entités est plutôt du genre brutal.

Cette collision, peut, selon la vitesse (et donc l'énergie) de chacune des entités, avoir 2 conséquences :

- Choc **peu énergétique** : entités juste **déviées** de leur trajectoire.
- Le choc se fait **avec suffisamment d'énergie** pour rompre une ou plusieurs liaisons covalentes. On parle alors de **choc efficace**.



Retour à la stabilité.

Les entités issues du choc ne sont généralement pas stables.

Elles vont donc chercher à se combiner entre elles pour reformer de nouvelles espèces chimiques stables.

Pour cela, elles peuvent :

- Reforme les mêmes entités qu'avant le choc.
C'est alors comme s'il ne s'était rien passé.

- Former de nouvelles entités stables.

Il y a alors eu **transformation chimique**.

Transformation chimique.

Une transformation chimique est **modélisée** par une équation de réaction.

Cette équation indique **l'évolution du système de l'état initial vers l'état final le plus stable, et donc le plus probable**.

A travers l'utilisation de coefficients stœchiométriques, elle traduit le **principe de conservation de la matière** : Rien ne se perd ! Rien ne se crée !

Les coefficients stœchiométriques indiquent par ailleurs les proportions dans lesquelles se fait une transformation : Tout se transforme !

La construction d'un **tableau d'avancement** permet le suivi théorique de l'évolution du système au cours du temps, de l'état initial jusqu'à l'état final.

Rq : L'état final, EF correspond à l'état ne montrant plus aucune évolution macroscopique : Les quantités de matières des réactifs et des produits n'évoluent plus. Expérimental, il est accessible par la mesure d'une grandeur caractéristique du système (conductivité ou conductance, pH, absorbance, ...)

