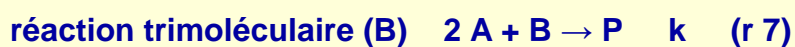


III. Cinétique des réactions élémentaires

complément



intégration de l'équation cinétique :

$$dA/dt = -kA^2(2B_0 - A_0 + A) \quad (34)$$

Posons

$$m = 2B_0 - A_0$$

Il faut donc intégrer :

$$\int_{A_0 \rightarrow A} dA/[A^2(m + A)] = -k \int_{0 \rightarrow t} dt \quad (a)$$

On utilise la méthode habituelle pour intégrer une fraction rationnelle, en réduisant celle-ci en une somme d'éléments plus simples.

La fraction à transformer, $1/[A^2(m+A)]$, étant du 3^{ème} degré, nous avons besoin des 3 constantes P, Q et R pour effectuer cette transformation :

$$1/[A^2(m+A)] = P/(m+A) + Q/A^2 + R/A \quad (b)$$

La réduction au même dénominateur de (b) conduit à l'identité :

$$(P+R)A^2 + (Q+mR)A + mQ \equiv 1$$

qui doit être vérifiée quel que soit A. P, Q et R sont donc les solutions du système :

$$P+R = 0$$

$$Q+mR = 0$$

$$mQ = 1$$

dont les solutions sont :

$$Q = 1/m$$

$$R = -1/m^2$$

$$P = 1/m^2$$

L'équation (a) devient alors :

$$\frac{1}{m^2} \int_{A_0 \rightarrow A} dA / (m + A) + \frac{1}{m} \int_{A_0 \rightarrow A} dA / A^2 - \frac{1}{m^2} \int_{A_0 \rightarrow A} dA / A = -k \int_{0 \rightarrow t} dt$$

soit :

$$(1/m) \ln \{ [(m+A)A_0] / [(m+A_0)A] \} + (A-A_0)/(A_0A) = -mkt$$

ou, en remplaçant m par sa valeur, en changeant les signes et en faisant apparaître $B = B_0 - A_0/2 + A/2$:

$$\frac{1}{(2B_0 - A_0)} \ln [(B_0A)/(A_0B)] + (A_0 - A)/(A_0A) = (2B_0 - A_0)kt \quad (35)$$