complément

réaction trimoléculaire (B) 2 A + B → P k (r 7)

intégration de l'équation cinétique :

$$\mathrm{d}A/\mathrm{d}t \;=\; -kA^2(2B_0 - A_0 + A) \qquad (34)$$

Posons

$$m = 2B_0 - A_0$$

Il faut donc intégrer :

$$\int_{A0\to A} \mathrm{d}A/[A^2(m + A)] \;=\; -k \int_{0\to t} \mathrm{d}t \qquad (a)$$

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 3ème degré, nous avons besoin des 3 constantes P, Q et R pour effectuer cette transformation :

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

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 :

$$1/m^2\int_{A0\to A} dA/(m + A) + 1/m\int_{A0\to A} dA/A^2 - 1/m^2\int_{A0\to A} dA/A = -k\int_{0\to t} dt$$

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 $B = B_0 - A_0/2 + A/2$:

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