

Révision de l'équation d'Arrhenius en cinétique chimique pour analyser les données cinétiques de naphtoxazine-spiro-indolines photochromiques

Jonathan Hobley

OndaLabs R&D Consultancy, Deca Homes, Clark Free-Port, Barangay Margot, Angeles, 2009, Philippines

RÉSUMÉ

Lors du premier cycle d'études, la cinétique et la thermodynamique sont enseignées comme les matières séparées. C'est le résultat du fait que les données thermodynamiques sur l'équilibre ne traitent pas la vitesse d'atteindre l'équilibre, ce qui représente en effet la cinétique. Il est vrai que même si une réaction chimique est thermodynamiquement favorable, elle peut ne jamais se produire pour des raisons cinétiques. Cependant, cette séparation de la cinétique et de la thermodynamique est regrettable à certains égards. Dans ce travail, est exploré le lien entre la cinétique chimique et la thermodynamique, les deux étant définies par un seul diagramme d'énergie potentielle. Une erreur habituelle provoquée par les cours du premier cycle en cinétique chimique est l'affirmation que l'équation d'Arrhenius est déficiente car elle n'offre pas de définition précise du terme pré-exponentiel A . Les cours du premier cycle proposent souvent des théories plus sophistiquées sous forme de théorie de la collision CT (angl.) et de théorie de l'état de transition TST (angl.), résultant en équation d'Eyring. Ces deux dernières théories sont nécessaires pour montrer formellement que le terme pré-exponentiel contient l'information sur les exigences d'entropie de la réaction. Dans cette recherche, il sera montré qu'en examinant la relation entre la thermodynamique et la cinétique, il est possible de démontrer que A est déjà implicitement lié au produit de l'entropie de l'activation de la réaction et de la fréquence

naturelle de la réaction. Cet article utilise des résultats précédemment publiés et non publiés des naphtoxazine-spiro-indolines photochromiques pour comparer les différentes théories.

Mots-clés : équation d'Arrhenius, théorie de l'état de transition, théorie de la collision, naphtoxazine-spiro-indoline, photochromique, cinétique chimique.