Simulation d'une transformation chimique par « rencontre de boules et tirage de dés »

	R	+ B	→	V	+ J	(solvant)	
Départ	$n_i(R)$	$n_i(B)$		$n_i(V)$	$n_i(J)$	$n_i(S)$	
Date t	n(R)	n(B)		n(V)	n(J)	n(S)	
Date t + Δt	n(R) – Δn	n(B) – Δn		n(V) + Δn	n(J) + Δn		

Rem : habituellement le tableau d'avancement comporte des quantités de matière et ici n : nb d'entités élémentaires mais les grandeurs sont proportionnelles et avancement de réaction $x = \Delta n / N_A$

Avec Δn = variation du nombre d'entités proportionnelle à P : probabilité de chocs assurant le passage aux produits
Or $P = P_u \times P_E$ avec P_u = probabilité de chocs utile (choc entre R et B) et P_E = Probabilité d'efficacité du choc

$$P_u = \text{probabilité de chocs} = \frac{\text{nb de chocs favorables}}{\text{nb de chocs possibles}}$$

Nb de chocs possibles = nb de combinaison possible pour prendre 2 « boules » parmi n_{Total} avec $n_{Total} = \Sigma n$

$$= \frac{n_{Total} \times (n_{Total} - 1)}{2} = C^2_{nTotal}$$

Nb de chocs favorables = n(R) x n(B)

Donc $P_u = \dfrac{2 \times n(R) \times n(B)}{n_{Total} \times (n_{Total} - 1)} \approx \dfrac{2 \times n(R) \times n(B)}{n_{Total} \times n_{Total}}$ soit deux fois les proportions respectives de R et B

Simulation envisageant l'évolution que de « gauche à droite » (voir logiciel en classe et cahier de texte !)

Conditions initiales du système								*Commentaires*
Nb R	Nb B	Nb V	Nb J	Nb Solv	Prob direc	Prob inv	Nb Choc/tp	
250	250	0	0	0	50%	0	20	Suivre A, B et C Les courbes obtenues servent de courbes de « référence » avec celle de C qui correspond au suivi de x : avancement
500	250	0	0	0	50%	0	20	Même état final (suivi de C)que référence : même réactif limitant mais $t_{1/2}$ plus petit (bien que la courbe soit identique au début) En effet, il est intéressant de calculer la probabilité de choc: Au départ : référence $P_u \approx \frac{2 \times n(R) \times n(B)}{n_{Total} \times n_{Total}} = 2 \times \frac{250}{500} \times \frac{250}{500} = 0{,}50$ ici $P_u \approx \frac{2 \times n(R) \times n(B)}{n_{Total} \times n_{Total}} = 2 \times \frac{500}{750} \times \frac{250}{750} = 0{,}44$ mais quand la moitié des « réactifs » a disparu : référence $P_u \approx \frac{2 \times n(R) \times n(B)}{n_{Total} \times n_{Total}} = 2 \times \frac{125}{500} \times \frac{125}{500} = 0{,}125$ ici $P_u \approx \frac{2 \times n(R) \times n(B)}{n_{Total} \times n_{Total}} = 2 \times \frac{375}{750} \times \frac{125}{750} = 0{,}166$
250	250	0	0	500	50%	0	20	Même état final (suivi de C)que référence : même réactif limitant mais $t_{1/2}$ plus petit (diminution des concentrations) donc P_u décroît
250	250	0	0	0	50%	0	40	Même état final (suivi de C)que référence : même réactif limitant mais $t_{1/2}$ plus grand P_u inchangé mais ΔN augmente : influence de la température
250	250	0	0	0	80%	0	20	Même état final (suivi de C)que référence : même réactif limitant mais $t_{1/2}$ plus petit modification de P_E
250	250	250	250	0	50%	0	20	Même état final (suivi de C)que référence : même réactif limitant mais $t_{1/2}$ plus grand diminution de P_u en augmentant N_{total}

Si on envisage une probabilité de rencontre V + J qui redonne R + B (évolution de « droite à gauche »

=> équilibre chimique ! (vitesse égale dans les deux sens : évolution microscopique mais pas macroscopique)

Equilibre dynamique !