

Transitions réactionnelles : un débat théorique tranché

Publié le jeudi 12 janvier 2006

Voir en ligne : <https://www.france-science.org/Transitions-reactionnelles-un.html>

Une équipe associant des chercheurs Brookhaven National Laboratory et de Stony Brook University a mis au point une technologie originale permettant de quantifier la répartition de l'énergie entre les différentes composantes d'une molécule impliquées dans une réaction chimique.

Selon le Dr. Gregory Hall et ses collègues, ces travaux apportent une validation expérimentale de la théorie moderne de l'état de transition (dont les bases ont été formulées par Eyring en 1935). Les états de transition correspondent à ceux où, dans le processus réactionnel, la molécule a accumulé une énergie potentielle préalablement à la formation des produits finaux de réaction.

Du point de vue appliqué, ils permettent de faire progresser la représentativité des modèles de dynamique moléculaire utilisés pour simuler des réactions complexes et, au final, d'optimiser des procédés industriels impliqués notamment dans des installations de combustion. En effet, les mesures réalisées permettent de décrire finement la répartition de l'énergie entre les composantes fractionnées d'une molécule, alors que la théorie de l'activation est essentiellement à fondement statistique.

Le dispositif expérimental employé par le Dr. Gregory Hall et son équipe est une imagerie ionique par tranche ("sliced ion imaging"). Il a été appliqué au fractionnement de la molécule de kétène (CH_2CO), souvent utilisée comme "proxie" de molécules organiques plus élaborées. Activées par laser, les molécules de kétène se séparent en deux fragments : méthylène et monoxyde de carbone, chacun porteur d'une fraction d'énergie. Le monoxyde de carbone est alors ionisé par un second laser, et accéléré vers un détecteur. La position d'un ion donné sur le détecteur dépend de son énergie initiale. L'innovation du procédé consiste à effectuer une "coupe" du nuage d'ions dans sa plus grande dimension au cours de sa migration vers le détecteur, afin d'obtenir une image possédant la meilleure résolution possible.

Source :

- E-news : http://www.bnl.gov/bnlweb/pubaf/pr/PR_display.asp?prID=06-01

-

<http://scitation.aip.org/getabs/servlet/GetabsServlet?prog=normal&id=JCPSA6000124000001014303000001&dtype=cvips&gifs=Yes>

- Complément sur la théorie de l'état de transition et son extension "variationnelle" (UCSD) : <http://www.sdsc.edu/chemdyn/classnotes/vtst.html>

Rédacteur :

Philippe Jamet, philippe.jamet@diplomatie.gouv.fr