

# TRANSFORMATIONS CHIMIQUES

Cours ET2 – J. Joubert, Z. Chen

## ► Plan du cours

### 1. Transformation vs. réaction

#### 1.1. Définitions

#### 1.2. Équation de réaction

#### 1.3. Constante d'équilibre

### 2. Évolution vers l'équilibre

#### 2.1. Critère d'évolution

#### 2.2. Composition à l'équilibre

## ► Compétences spécifiques

- Écrire une équation de réaction modélisant une transformation donnée.

- Déterminer une constante d'équilibre

## ► Compétences spécifiques

- Décrire qualitativement et quantitativement un système chimique dans un état d'avancement quelconque

- Exprimer l'activité d'une espèce chimique pure ou dans un mélange

- Exprimer le quotient réactionnel

- Prévoir le sens de l'évolution spontanée d'un système chimique

- Identifier un état d'équilibre chimique

- Déterminer la composition d'un système

# 1. Transformation vs. réaction

## 1.1. Définitions

Définition : une **transformation** est définie par le changement d'un  () à un  () et des conditions appliquées au système.

En chimie, le terme est le plus souvent utilisé pour un phénomène .

Exemple : Combustion du graphite ( $C_{(gr)}$ ) dans l'air :

État initial

État final

## 1.1. Définitions (suite)

La **transformation** d'un système peut être modélisée par   équations de réaction.

Une **équation de réaction** précise la  des constituants physico-chimiques modifiés par la transformation et les  de ces constituants.

Exemple : Combustion du graphite ( $C_{(gr)}$ ) dans l'air : on peut écrire



## 1.2. Équation de réaction

L'**équation de réaction** indique les proportions des **constituants physico-chimiques** qui **sont transformés**. Les proportions **sont indiquées** par les **nombre**s **stœchiométriques**.

Exemple :

---

---

---

---

---

## 1.2. Équation de réaction (suite)

Plusieurs **possibilités existent** pour les **nombre**s **stœchiométriques** : on **peut**  ou  l'équation de réaction. Il **faut** toujours  les proportions.

Exemple :



**ATTENTION !** Les **nombre**s **stœchiométriques** **doivent être ajustés**.

Exemple :



## 1.2. Équation de réaction (suite)

L'**équation de réaction**  les **quantités de matière** des **constituants physico-chimiques transformés** par cette réaction.

Définition : pour une réaction quelconque  $0 = \sum_k \nu_k A_k$ , on **définit** l'**avancement de la réaction**  $\xi$  :

$$\xi =$$

Unité de  $\xi$  : \_\_\_\_\_

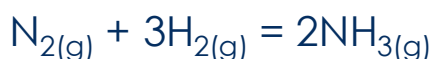
Remarque : la définition de  $\xi$  **est**  du **constituant**  $A_k$ .

## 1.2. Équation de réaction (suite)

L'**avancement maximum**  $\xi_{\max}$  **est limité** par le **réactif en défaut**.

$$\xi_{\max} = \min_{k \in \{\text{réactifs}\}} \left| \frac{n_{k,0}}{\nu_k} \right|$$

Exemples :



## 1.2. Équation de réaction (suite)

Définition : on appelle **état d'équilibre** l'état du système pour lequel il  d'**évolution spontanée** des .  
(définition incomplète qui sera précisée plus tard)

Propriété : à l'équilibre,  $\xi$  **peut être** quelconque. Il **dépend** des conditions de la transformation.

$$0 \leq \xi_{eq} \leq \xi_{max}$$

Exemple : Transformation de 100 mL de **solution aqueuse** de  $\text{CH}_3\text{CO}_2\text{H}$   $1,0 \cdot 10^{-2} \text{ mol.L}^{-1}$  à  $25^\circ \text{C}$  sous 1 bar

Équation de réaction : \_\_\_\_\_

$$\xi_{max} = \text{_____} \quad \xi_{eq} = \text{_____}$$

## 1.2. Équation de réaction (suite)

Définition : on appelle **avancement volumique** la grandeur  (en ).

Cette grandeur **est utilisée** pour les transformations à   (transformations ) en **phase liquide**.

Définition : on appelle **taux d'avancement** de la réaction la grandeur  $\tau = \text{} \left( \text{} \right)$

**Comment déterminer  $\xi$ ,  $x$  ou  $\tau$  ?**

### 1.3. Constante d'équilibre

Définition : à une température donnée, une **équation de réaction** est associée à une grandeur  appelée **constante thermodynamique d'équilibre**, noté . La constante  $K^\circ(T)$  détermine la position de l'équilibre ( $\xi_{eq}$ ).

Propriété : pour une réaction  $0 = \sum_k \nu_k A_k$

$$K^\circ(T) =$$

La grandeur  $a_k$  est appelée  du constituant physico-chimique  $A_k$ .

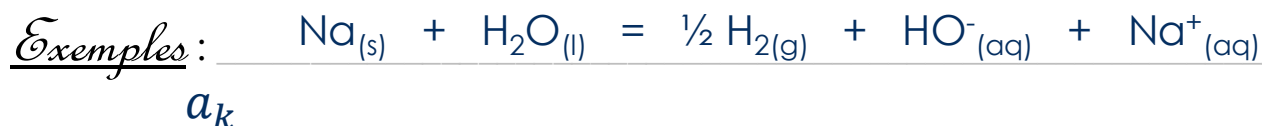
### 1.3. Constante d'équilibre

L'expression de l'**activité** dépend de la nature du constituant physico-chimique.

Expression de l'**activité** de quelques constituants physico-chimiques :

Constituant $A_k$	Activité $a_k$
Gaz parfait pur	<input type="text"/>
Gaz parfait dans un mélange idéal	<input type="text"/>
Soluté	<input type="text"/>
Solvant	<input type="text"/>
Corps condensé seul dans sa phase	<input type="text"/>
Corps condensé dans un mélange idéal	<input type="text"/>

### 1.3. Constante d'équilibre (suite)



Cas 1 :  $v_k$

Cas 2 :  $v'_k$

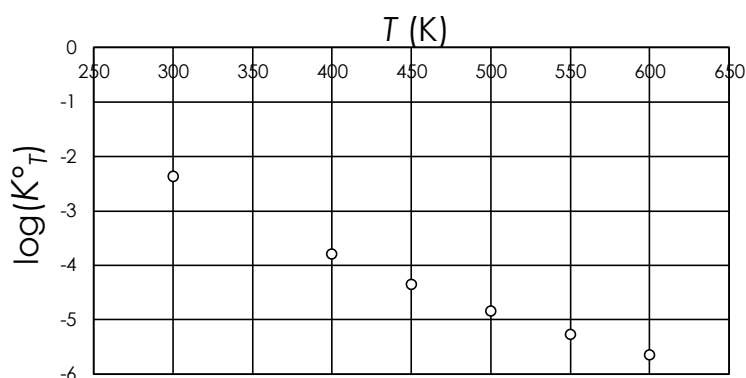
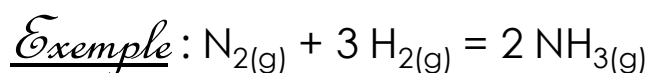
Quelques cas particuliers :

Produit ionique de l'eau :

Constante d'acidité :

### 1.3. Constante d'équilibre (suite)

Évolution de  $K^\circ_T$  avec la température :



Remarque :

- ▶ si  $K^\circ_T$   quand  $T$  augmente, la réaction est  ;
- ▶ si  $K^\circ_T$   quand  $T$  augmente, la réaction est .

### 1.3. Constante d'équilibre (suite)

Propriété: la constante d'équilibre  $K^\circ_{(R)}$  d'une équation de réaction (R),  de k équations (i)

$$(R) = \sum_{i=1}^k \alpha_i \cdot (i)$$

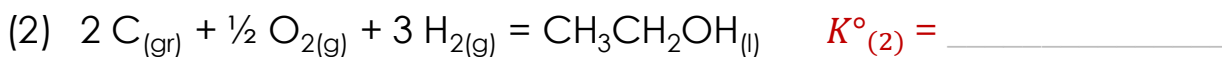
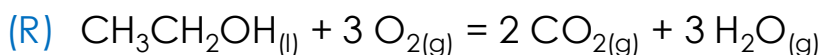
s'exprime sous la forme :

$$K^\circ_{(R)} =$$

Remarque: cette propriété sera démontrée plus tard dans le cours de thermodynamique

### 1.3. Constante d'équilibre (suite)

Exemples :



(R) = \_\_\_\_\_ (1) + \_\_\_\_\_ (2) + \_\_\_\_\_ (3) + \_\_\_\_\_ (4)

$K^\circ_{(R)} =$  \_\_\_\_\_



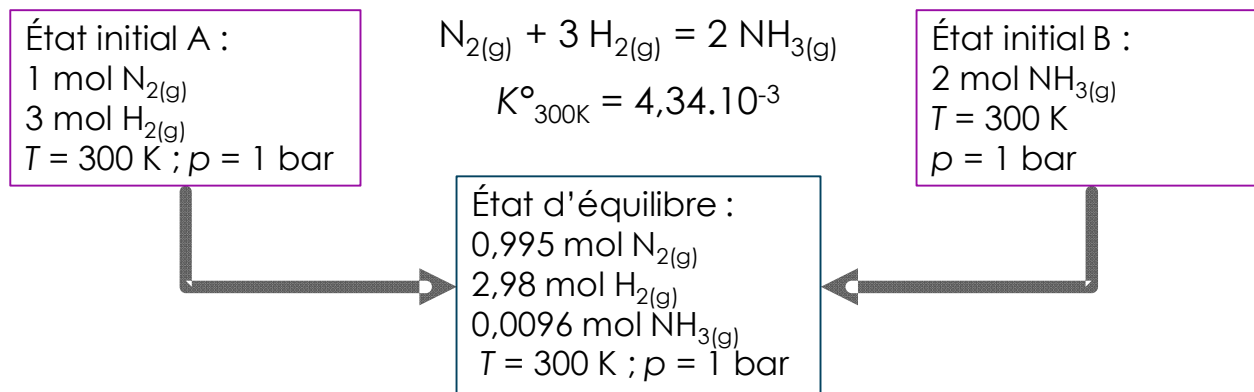
## 2. Évolution vers l'équilibre

### 2.1. Critère d'évolution

Les transformations **sont**  : elles **peuvent se produire** dans les deux **sens**. Le **sens dépend** des **conditions** .

La transformation **évolue** en **direction** de .

Exemple :



COURS ET2 – 2. ÉVOLUTION VERS L'ÉTAT D'ÉQUILIBRE

17

### 2.1. Critère d'évolution

Le sens  →  est appelé **sens**

Le sens  →  est appelé **sens**  (ou ).

Remarque : le **sens** de la transformation **dépend** du   
de **l'équation de réaction**.

---

---

---

COURS ET2 – 2. ÉVOLUTION VERS L'ÉTAT D'ÉQUILIBRE

18

## 2.1. Critère d'évolution

Définition : Pour une équation de réaction de la forme

$$0 = \sum_k \nu_k A_k$$

on appelle **produit de réaction** (ou **quotient de réaction**) la grandeur sans dimension

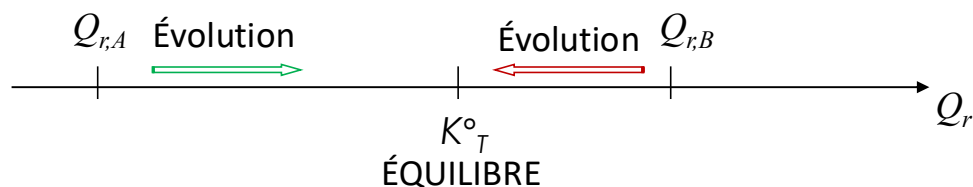
$$Q_r =$$

**ATTENTION !** En général  $Q_r \neq K_T^\circ$

## 2.1. Critère d'évolution

Propriétés :

- ▶ Si  $Q_r < K_T^\circ$ , il y a une évolution dans le sens
- ▶ Si  $Q_r > K_T^\circ$ , il y a une évolution dans le sens
- ▶



Justification :

---

---

---

---

## 2.1. Critère d'évolution

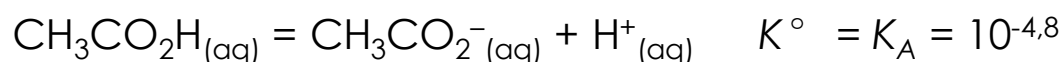
Cas particuliers :

Pour une équation de réaction avec des nombres stœchiométriques entiers les plus petits possibles,

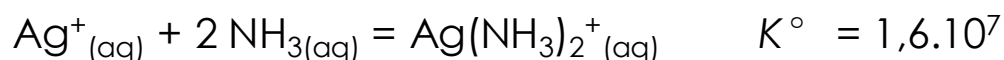
- ▶ si  $K^\circ$  est très grand () , on a en général  :  .  
On dit que la réaction est .
- ▶ si  $K^\circ$  est très petit () ,  . On dit que la réaction est .

## 2.1. Critère d'évolution

Exemples :



$$[\text{CH}_3\text{CO}_2\text{H}_{(\text{aq})}]_0 = 0,1 \text{ mol.L}^{-1} \Rightarrow x_{\text{eq}} = 1,25 \cdot 10^{-3} \text{ mol.L}^{-1}$$



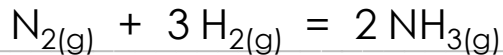
$$[\text{Ag}^{+}{}_{(\text{aq})}]_0 = \frac{1}{2} \cdot [\text{NH}_{3(\text{aq})}]_0 = 0,1 \text{ mol.L}^{-1} \Rightarrow x_{\text{eq}} = 0,0988 \text{ mol.L}^{-1}$$

## 2.2. Composition à l'équilibre

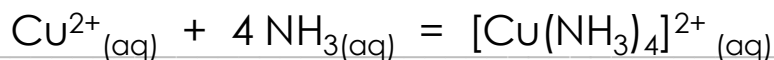
Les quantités de matière des constituants physico-chimiques sont reliées à l'avancement (). On peut représenter ceci par un tableau d'avancement (ou bilan de matière).

Exemples :

Pour les réactions en gazeux



Pour les réactions en solution aqueuse



## 2.2. Composition à l'équilibre

Méthode pour trouver la composition d'un système à l'équilibre :

- ▶ Écrire l'équation de la réaction qui modélise la transformation ;
- ▶ Évaluer sa constante d'équilibre ;
- ▶ Écrire un tableau d'avancement ;
- ▶ Reporter les expressions du tableau d'avancement dans l'expression de la constante  $K_T^\circ$  ;
- ▶ Résoudre l'équation mathématique.

Remarque : pour résoudre l'équation mathématique, on peut faire des approximations (si  ou )