



---

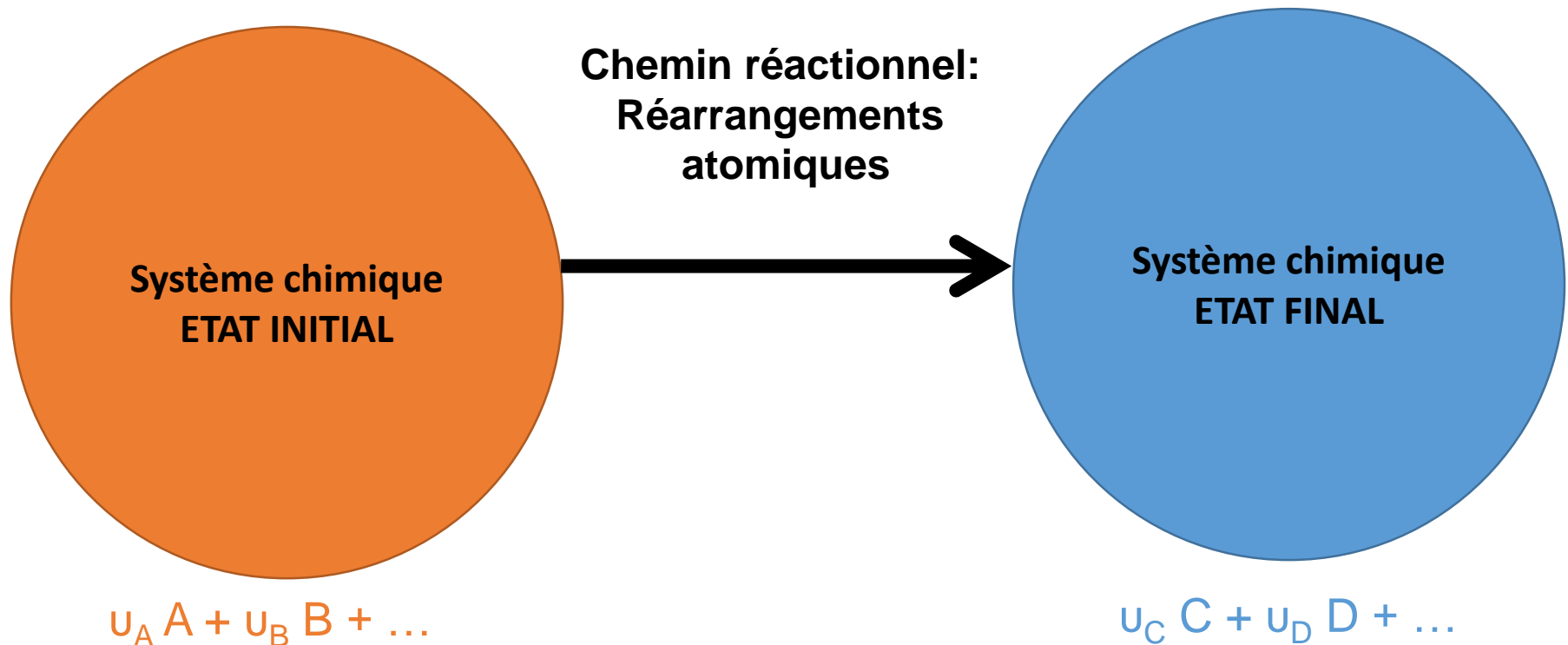
## **Chap. 2 – TRANSFORMATION CHIMIQUE ET SA MODELISATION**

---



# I- Modélisation d'une transformation chimique

## 1. Equation de la réaction

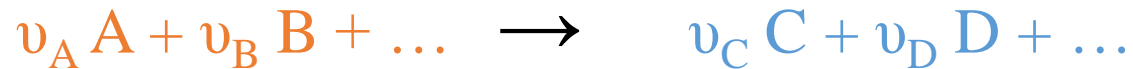


Une transformation chimique peut être représentée par une (ou plusieurs parfois) équation de réaction.



# I- Modélisation d'une transformation chimique

## 1. Equation de la réaction



A, B ....: REACTIFS

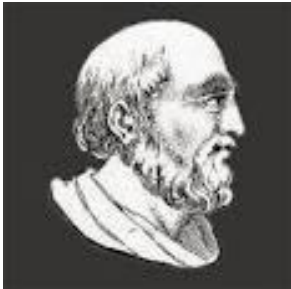
C, D ....: PRODUITS

$v_1, v_2$  : coefficients stœchiométriques

$v_3, v_4$  : coefficients stœchiométriques

Conservation de **TOUS** les atomes :

*« Rien ne se perd,  
rien ne se crée,  
tout se transforme »*

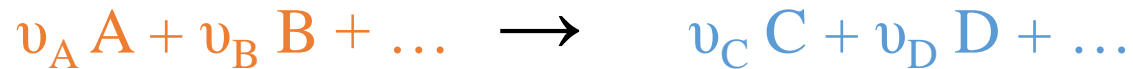


Anaxagore (antiquité) puis Lavoisier  
(XVIIIe)



# I- Modélisation d'une transformation chimique

## 1. Equation de la réaction



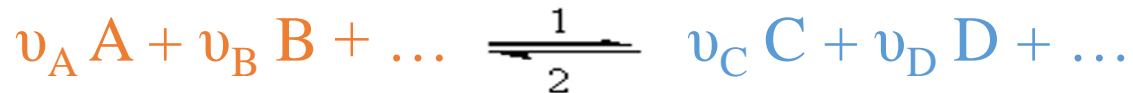
A, B ....: REACTIFS

C, D ....: PRODUITS

$v_1, v_2$  : coefficients stœchiométriques

$v_3, v_4$  : coefficients stœchiométriques

- **Simple flèche** : La réaction est **TOTALE**
  - La réaction n'est possible que dans le sens de la flèche



- **Double flèche** : La réaction est **EQUILIBREE**
  - réaction possible dans le sens 1: sens DIRECT
  - réaction possible dans le sens 2 : sens INVERSE (INDIRECT)

# I- Modélisation d'une transformation chimique

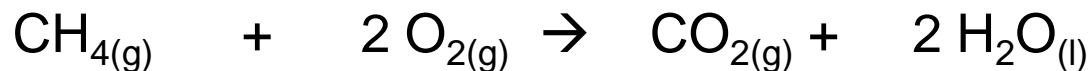
---

## 1. Equation de la réaction

*Exemples :*

- **La combustion du méthane**

La réaction est **TOTALE** et produit du dioxyde de carbone et de l'eau



- **La réaction de l'acide éthanoïque avec l'eau**

La réaction est **EQUILIBREE** et produit des ions éthanoate et des ions oxonium



# I- Modélisation d'une transformation chimique

## 2. Le tableau d'avancement

a) Cas d'une réaction TOTALE: la combustion du méthane

Qtés de matière	Avancement	$\text{CH}_{4(g)} + 2 \text{O}_{2(g)} \rightarrow \text{CO}_{2(g)} + 2 \text{H}_2\text{O}_{(l)}$			
Etat initial					
Etat intermédiaire					
Etat final					

# I- Modélisation d'une transformation chimique

## 2. Le tableau d'avancement

a) Cas d'une réaction TOTALE: la combustion du méthane

Qtés de matière	Avancement	$\text{CH}_{4(g)} + 2 \text{O}_{2(g)} \rightarrow \text{CO}_{2(g)} + 2 \text{H}_2\text{O}_{(l)}$			
Etat initial	0	$n_i(\text{CH}_4)$	$n_i(\text{O}_2)$	0	0
Etat intermédiaire	$\xi$	$n_i(\text{CH}_4) - \xi$	$n_i(\text{O}_2) - 2\xi$	$\xi$	$2\xi$
Etat final	$\xi_f$	$n_i(\text{CH}_4) - \xi_f$	$n_i(\text{O}_2) - 2\xi_f$	$\xi_f$	$2\xi_f$

L'avancement final est la valeur de  $\xi$  qui annule :

- la quantité de matière du réactif limitant ;
- les quantités de matière de tous les réactifs dans le cas d'un mélange initial stœchiométrique.

$$\xi_f = \xi_{\max} \text{ pour une réaction totale}$$

*Remarque: le tableau d'avancement peut être établi en concentrations si toutes les espèces (autres que l'eau) sont en solution et si le volume est constant.*

# I- Modélisation d'une transformation chimique

## 2. Le tableau d'avancement

b) Cas d'une réaction EQUILIBREE : la réaction de l'acide éthanoïque avec l'eau

Qtés de matière	Avancement	$\text{CH}_3\text{COOH}_{(\text{aq})} + \text{H}_2\text{O}_{(\text{l})} \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{COO}^-_{(\text{aq})} + \text{H}_3\text{O}^+$			
Etat initial					
Etat intermédiaire					
Equilibre					



# I- Modélisation d'une transformation chimique

## 2. Le tableau d'avancement

b) Cas d'une réaction EQUILIBREE : la réaction de l'acide éthanoïque avec l'eau

Qtés de matière	Avancement	$\text{CH}_3\text{COOH}_{(aq)} + \text{H}_2\text{O}_{(l)} \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{COO}^-_{(aq)} + \text{H}_3\text{O}^+$			
Etat initial	0	$n_i(\text{CH}_3\text{COOH})$	Excès	0	0
Etat intermédiaire	$\xi$	$n_i(\text{CH}_3\text{COOH}) - \xi$	Excès	$\xi$	$\xi$
Etat final = Equilibre	$\xi_{\text{eq}}$	$n_i(\text{CH}_3\text{COOH}) - \xi_{\text{eq}}$	Excès	$\xi_{\text{eq}}$	$\xi_{\text{eq}}$

$$\xi_f = \xi_{\text{eq}} < \xi_{\text{max}}$$

- La réaction est réversible
- Dans son état final, le système est constitué d'un mélange en équilibre
- Cet équilibre est caractérisée par une constante d'équilibre  $K$  qui ne dépend que de la  $T$

# I- Modélisation d'une transformation chimique

## 2. Le tableau d'avancement

b) Cas d'une réaction EQUILIBREE : la réaction de l'acide éthanoïque avec l'eau

Qtés de matière	Avancement	$\text{CH}_3\text{COOH}_{(\text{aq})} + \text{H}_2\text{O}_{(\text{l})} \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{COO}^-_{(\text{aq})} + \text{H}_3\text{O}^+$			
Etat initial	0	$n_i(\text{CH}_3\text{COOH})$	Excès	0	0
Etat intermédiaire	$\xi$	$n_i(\text{CH}_3\text{COOH}) - \xi$	Excès	$\xi$	$\xi$
Etat final = Equilibre	$\xi_{\text{eq}}$	$n_i(\text{CH}_3\text{COOH}) - \xi_{\text{eq}}$	Excès	$\xi_{\text{eq}}$	$\xi_{\text{eq}}$

$$\xi_f = \xi_{\text{eq}} < \xi_{\text{max}}$$

La valeur de  $\xi_f = \xi_{\text{eq}}$  peut être déterminée à partir de la quantité de matière initiale d'acide éthanoïque, du volume d'eau, et de la valeur de la constante d'équilibre.

*Remarque: le tableau d'avancement peut être établi en concentrations si toutes les espèces (autres que l'eau) sont en solution et si le volume est constant.*

# I- Modélisation d'une transformation chimique

## 3. Le taux d'avancement d'une réaction

Qtés de matière	Avancement	$\text{CH}_{4(g)} + 2 \text{O}_{2(g)} \rightarrow \text{CO}_{2(g)} + 2 \text{H}_2\text{O}_{(l)}$			
Etat initial	0	$n_i(\text{CH}_4)$	$n_i(\text{O}_2)$	0	0
Etat intermédiaire	$\xi$	$n_i(\text{CH}_4) - \xi$	$n_i(\text{O}_2) - 2\xi$	$\xi$	$2\xi$
Etat final	$\xi_f$	$n_i(\text{CH}_4) - \xi_f$	$n_i(\text{O}_2) - 2\xi_f$	$\xi_f$	$2\xi_f$

L'évolution d'une réaction est estimée grâce à son avancement  $\xi$  et son degré ou taux d'avancement :

$$x = \frac{\xi}{\xi_{max}}$$

- Si  $\xi_f = \xi_{max}$ ,  $x = 1$ , **la réaction totale** (on dit qu'elle est quantitative)
- Si  $\xi_f = \xi_{eq} < \xi_{max}$ ,  $x < 1$ , **la réaction est équilibrée**

## II- La constante d'équilibre en solution aqueuse

### 1. Notion d'activité d'une espèce dans un mélange

- Pour une espèce dissoute (molécule ou ion) en concentration  $< \text{ou} = \text{à } 0,1 \text{ mol.L}^{-1}$ :

$$a_i = \frac{[X_i]}{C^o} \quad C^o = 1 \text{ mol.L}^{-1}$$

L'activité n'a pas d'unité!

On pourra écrire:

$$\begin{array}{l} a_i = [X_i] \\ \text{si } [X_i] \text{ en mol.L}^{-1} \end{array}$$

- Pour le solvant:

$$a(\text{solvant}) = 1 \quad \text{soit} \quad \text{ici} \quad a(\text{H}_2\text{O}) = 1$$

## II- La constante d'équilibre en solution aqueuse

---

### 1. Notion d'activité d'une espèce dans un mélange

- Pour les solides ou liquides purs:

$$a(\text{sol ou liq pur}) = 1$$

- Pour les gaz, supposés parfaits:

$$a(\text{gaz}) = \frac{P(\text{gaz})}{P^\circ} \quad P^\circ = 1 \text{ bar}$$

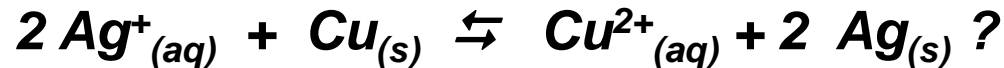
## II- La constante d'équilibre en solution aqueuse

### 2. Le quotient réactionnel $Q_r$

Pour la réaction :  $\alpha_1 A_1 + \alpha_2 A_2 \rightleftharpoons \alpha'_1 A'_1 + \alpha'_2 A'_2$  :

$$Q_r = \frac{\prod (a'_i)^{\alpha'_i}}{\prod (a_i)^{\alpha_i}}$$

*Expression du quotient réactionnel de la réaction :*



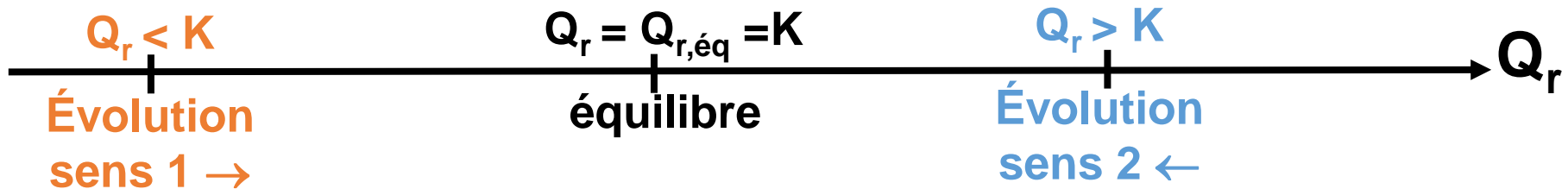
## II- La constante d'équilibre en solution aqueuse

### 3. La constante d'équilibre

Pour la réaction :  $\alpha_1 A_1 + \alpha_2 A_2 \xrightleftharpoons[2]{1} \alpha'_1 A'_1 + \alpha'_2 A'_2$

$$K = Q_{r, \text{éq}} = \frac{\prod (a_i')^{\alpha_i'}}{\prod (a_i)^{\alpha_i}}$$

La constante d'équilibre ne dépend que de la température pour un équilibre donné.



## II- La constante d'équilibre en solution aqueuse

---

### 3. La constante d'équilibre

#### Exemples :

- 1- Donner l'expression littérale de la constante d'équilibre de la réaction d'autoprotolyse de l'eau.
- 2- Donner l'expression littérale de la constante d'équilibre de la réaction de l'acide acétique  $\text{CH}_3\text{COOH}$  avec l'eau.
- 3- Donner l'expression littérale de la constante d'équilibre de la réaction de dissolution de l'hydroxyde de calcium dans l'eau, sachant que ce solide est peu soluble.



## II- La constante d'équilibre en solution aqueuse

---

### 3. La constante d'équilibre

#### ATTENTION:

- **Le taux d'avancement d'une réaction ( $\xi_{\text{eq}} / \xi_{\text{max}}$ ) dépend de la constante d'équilibre, mais aussi de la composition initiale du système.**  
Il n'est donc pas possible en principe de donner une valeur de  $K$  au-delà de laquelle la réaction puisse être considérée comme totale.
- **Cependant, dans la plupart des cas, une réaction est quantitative (= quasi-totale) dans le sens 1 de gauche à droite si  $K > 10^4$ .**
- **Inversement, dans la plupart des cas, une réaction sera quasi totale dans le sens 2 de droite à gauche quand  $K < 10^{-4}$ .** Cela veut dire que cette réaction ne se fait quasiment pas dans le sens 1.
- Une réaction dont la constante d'équilibre est proche de 1 est équilibrée.
- Si  $K > 1$ , le sens 1 est favorisé et inversement.

## II- La constante d'équilibre en solution aqueuse

---

### **4. Influence des concentrations des réactifs sur l'avancement de réaction**

*Soit une solution d'acide acétique:*

*$c_a = 10^{-2} \text{ mol.L}^{-1}$ , on mesure à l'équilibre une concentration en ions  $\text{H}_3\text{O}^+$  égale à  $4,2 \cdot 10^{-4} \text{ mol.L}^{-1}$ . Calculer le coefficient de dissociation  $\alpha$ .*

*$C_a' = 10^{-3} \text{ mol.L}^{-1}$ , on mesure à l'équilibre une concentration en ions  $\text{H}_3\text{O}^+$  égale à  $1,25 \cdot 10^{-4} \text{ mol.L}^{-1}$ . Calculer le coefficient de dissociation  $\alpha'$ .*

## II- La constante d'équilibre en solution aqueuse

---

### 4. Influence des concentrations des réactifs sur l'avancement de réaction

*Soit une solution d'acide acétique:*

*$c_a = 10^{-2} \text{ mol.L}^{-1}$ , on mesure à l'équilibre une concentration en ions  $\text{H}_3\text{O}^+$  égale à  $4,2 \cdot 10^{-4} \text{ mol.L}^{-1}$ . Calculer le coefficient de dissociation  $\alpha$  (0,042).*

*$C_a' = 10^{-3} \text{ mol.L}^{-1}$ , on mesure à l'équilibre une concentration en ions  $\text{H}_3\text{O}^+$  égale à  $1,25 \cdot 10^{-4} \text{ mol.L}^{-1}$ . Calculer le coefficient de dissociation  $\alpha'$  (0,125).*

$$\alpha' > \alpha$$

**Conclusion : quand la concentration de l'acide acétique diminue, le pourcentage de molécules ionisées augmente.**

On constate que quand on dilue un électrolyte faible, son coefficient d'ionisation augmente. Ce résultat est connu sous le nom de « LOI de dilution d'OSTWALD » .