

Description
de l'évolution d'un système physico-
chimique vers un état final

La transformation chimique

Définition : Transformation chimique

A l'occasion d'une ***transformation chimique***, il y a réorganisation des atomes d'une ou plusieurs substances. On observe la rupture et la formation de nouvelles liaisons entre atomes.

Loi : Equation chimique et lois de conservation

On traduit la réorganisation des atomes observée par une ***équation chimique***.

Au cours de la transformation chimique, les atomes et les électrons ne sont ni détruits ni créés : cela a pour conséquence les règles de ***conservation des éléments*** et de ***conservation des charges***.

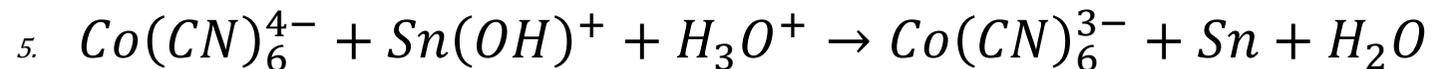
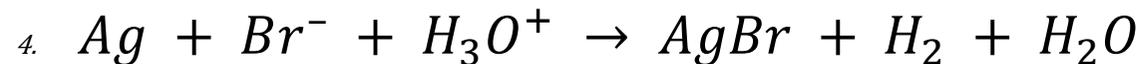
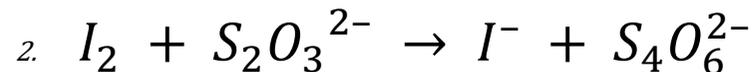
Savoir-faire 2 - Équilibrer des équations-bilan

Méthode : Equilibrer une équation

Equilibrer une équation chimique signifie rajouter des coefficients stœchiométriques devant chaque espèce (pas le droit de modifier les espèces !) afin de garantir le respect des lois de conservation.

1. Commencer par équilibrer les éléments n'apparaissant qu'une fois de chaque côté.
2. Equilibrer les éléments restants et les charges. Si l'un des coefficients imposés à l'étape 1 a été modifié, reprendre l'étape 1.

Équilibrer les équations bilan suivantes :



L'évolution du système

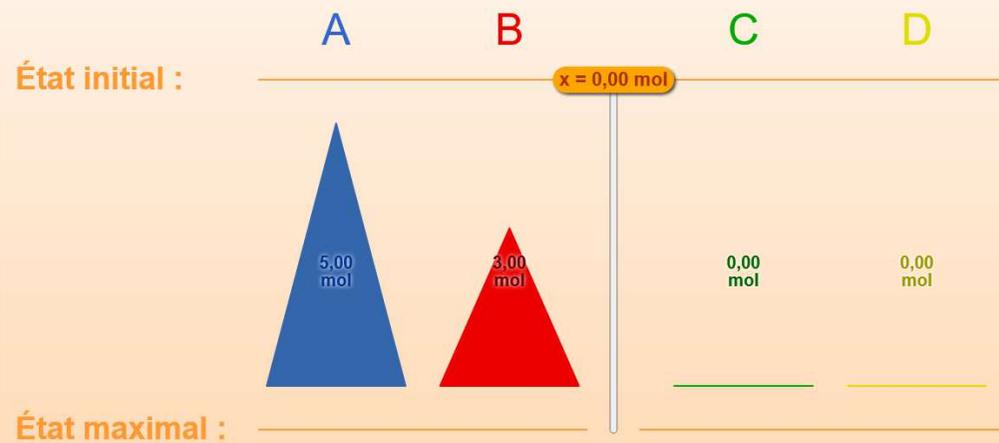
Définition : Grandeurs pour décrire l'évolution de la réaction

- Au cours de la réaction, les **réactifs** disparaissent et les **produits** apparaissent.
- L'évolution du système chimique est caractérisée par l'**avancement** de la réaction, noté ξ , et exprimé en mole. C'est une grandeur qui décrit l'état du système chimique au cours de la réaction.

Avancement d'une transformation chimique



Quantités de matières initiales : $\begin{cases} n_i(\text{A}) = 5 \text{ mol} \\ n_i(\text{B}) = 3 \text{ mol} \end{cases}$



L'évolution du système

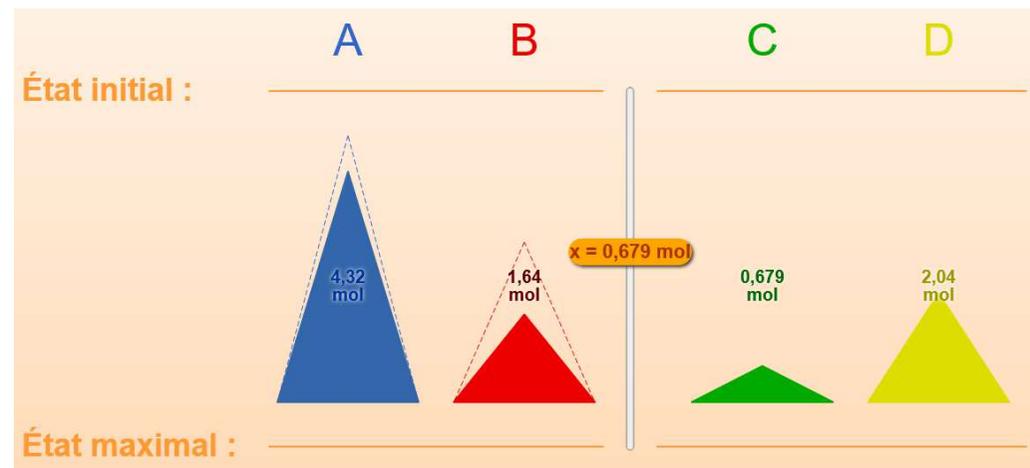
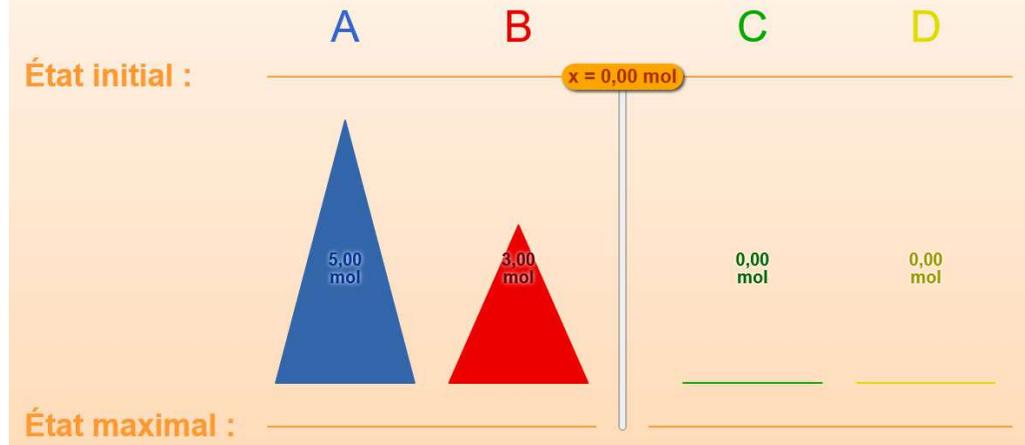
Définition : Grandeurs pour décrire l'évolution de la réaction

- Au cours de la réaction, les **réactifs** disparaissent et les **produits** apparaissent.
- L'évolution du système chimique est caractérisée par l'**avancement** de la réaction, noté ξ , et exprimé en mole. C'est une grandeur qui décrit l'état du système chimique au cours de la réaction.

Avancement d'une transformation chimique



$$\text{Quantités de matières initiales : } \begin{cases} n_i(\text{A}) = 5 \text{ mol} \\ n_i(\text{B}) = 3 \text{ mol} \end{cases}$$



L'évolution du système

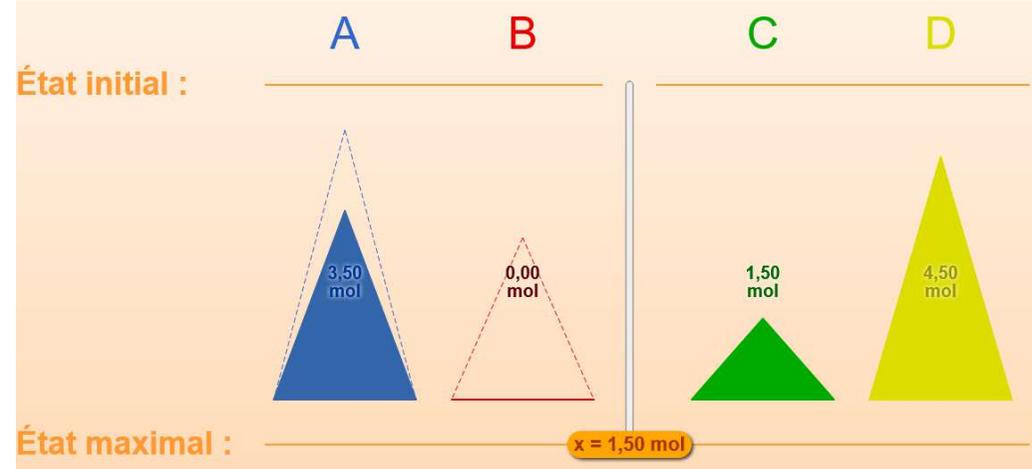
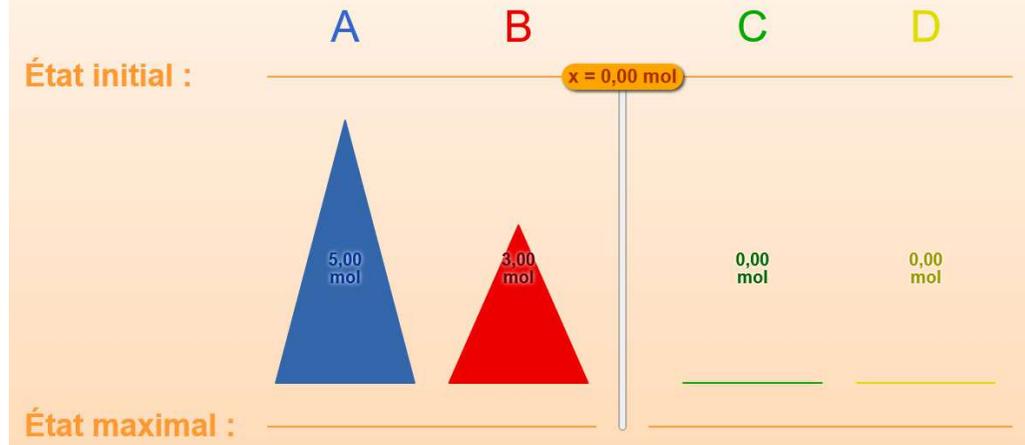
Définition : Grandeurs pour décrire l'évolution de la réaction

- Au cours de la réaction, les **réactifs** disparaissent et les **produits** apparaissent.
- L'évolution du système chimique est caractérisée par l'**avancement** de la réaction, noté ξ , et exprimé en mole. C'est une grandeur qui décrit l'état du système chimique au cours de la réaction.

Avancement d'une transformation chimique



Quantités de matières initiales : $\begin{cases} n_i(\text{A}) = 5 \text{ mol} \\ n_i(\text{B}) = 3 \text{ mol} \end{cases}$

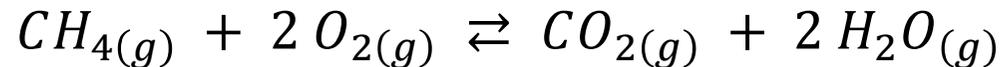


L'évolution du système : tableau d'avancement

Equation chimique		$r_1 R_1 + r_2 R_2 \rightleftharpoons p_1 P_1 + p_2 P_2$			
Etat du système	Avancement	Quantité de matière de R_1	Quantité de matière de R_2	Quantité de matière de P_1	Quantité de matière de P_2
Etat initial	0	$n_0(R_1)$	$n_0(R_2)$	$n_0(P_1)$	$n_0(P_2)$
En cours de transformation	ξ	$n_0(R_1) - r_1 \cdot \xi$	$n_0(R_2) - r_2 \cdot \xi$	$n_0(P_1) + p_1 \cdot \xi$	$n_0(P_2) + p_2 \cdot \xi$
Etat final	ξ_f	$n_0(R_1) - r_1 \cdot \xi_f$	$n_0(R_2) - r_2 \cdot \xi_f$	$n_0(P_1) + p_1 \cdot \xi_f$	$n_0(P_2) + p_2 \cdot \xi_f$

Savoir-faire 3 – Utiliser un tableau d'avancement

On étudie la combustion du méthane, dont l'équation bilan s'écrit



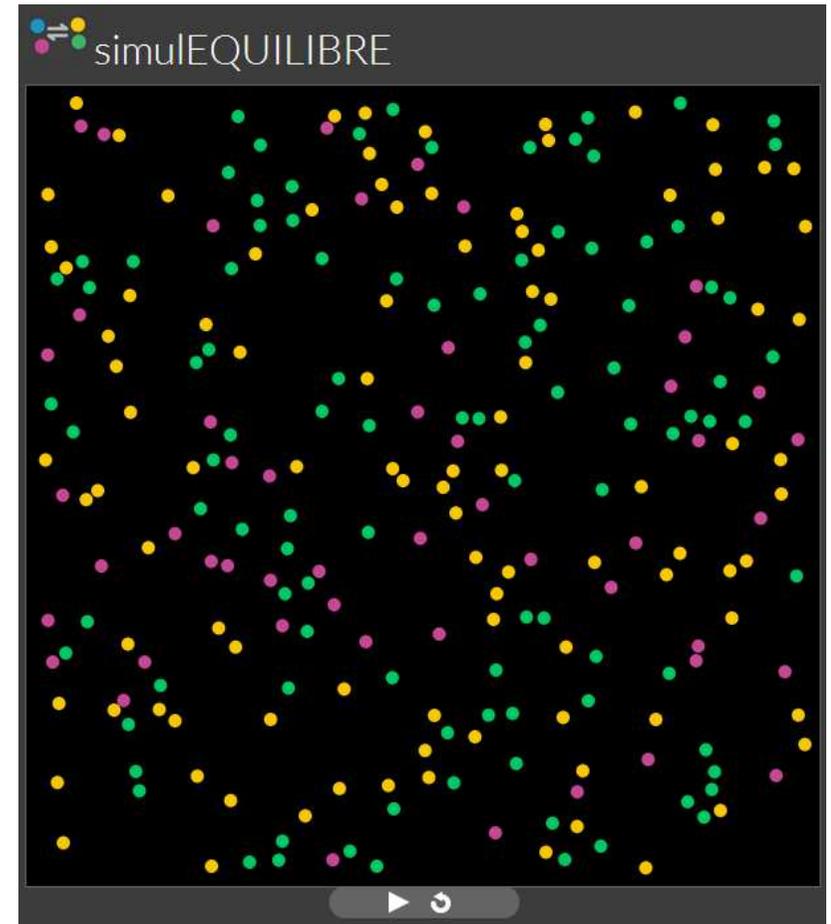
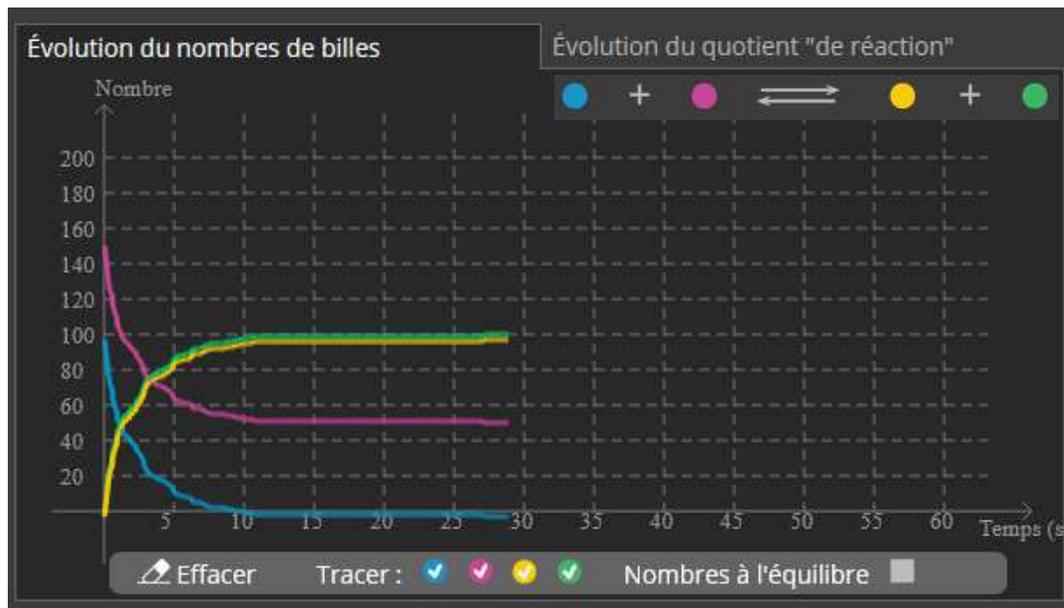
avec pour conditions initiales $n_i(CH_4) = 4,0$ mol et $n_i(O_2) = 6,0$ mol et aucun produit.

1. Construire le tableau d'avancement en distinguant l'état initial (*i*), un état en cours de réaction et l'état final (*f*). On note ξ l'avancement de la réaction.
2. Déterminer toutes les quantités de matière à l'instant où $\xi = 1,5$ mol.
3. Identifier le réactif limitant et la valeur de l'avancement maximal ξ_{max} .
4. On suppose que la réaction est totale : à l'état final, $\xi_f = \xi_{max}$. En déduire la quantité de matière finale de chacune des espèces.

État final d'une transformation chimique

Définition : Etat final

Une réaction chimique atteint son **état final** lorsque les **concentrations des espèces chimiques** présentes **cessent d'évoluer** et deviennent donc **constantes**.



État final d'une transformation chimique

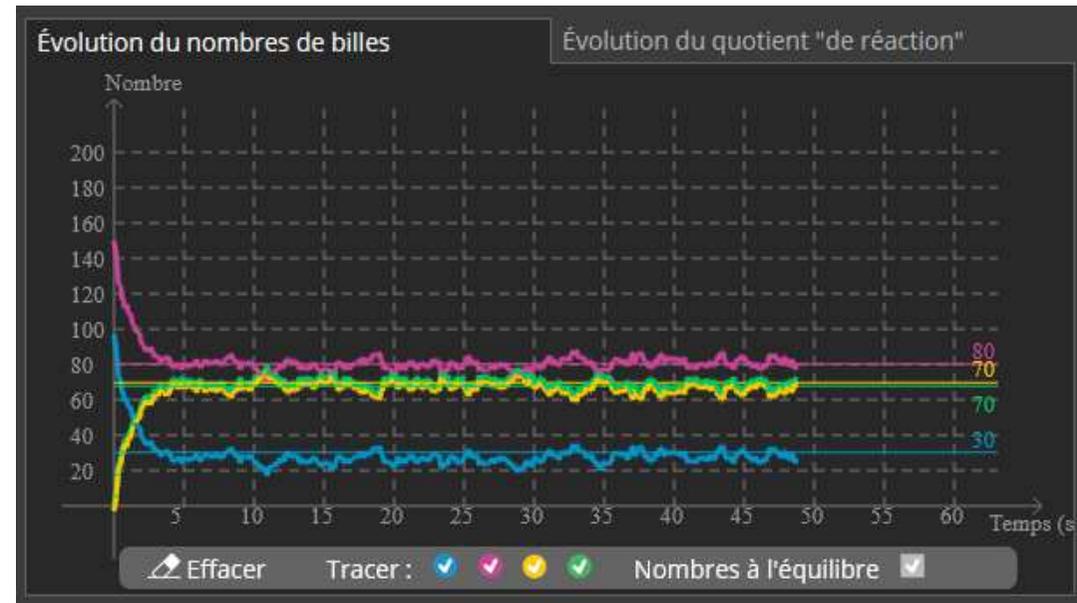
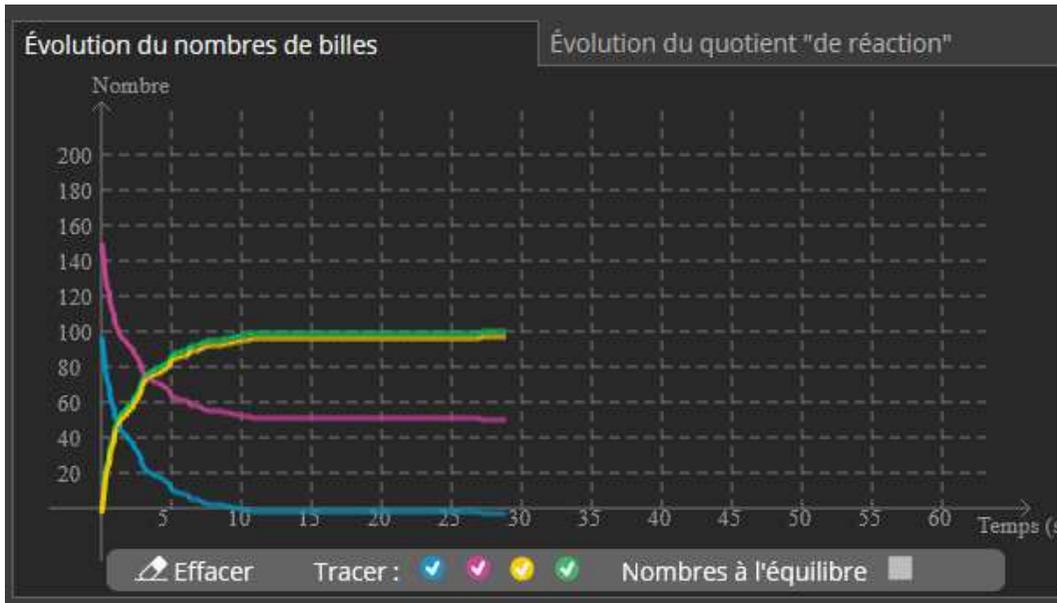


3.2. Réaction totale

- L'un des réactifs est totalement consommé à l'état final : c'est le **réactif limitant**.
- L'avancement final ξ_f de la réaction est maximal : $\xi_f = \xi_{\max}$.

vs. Réaction non totale

- A l'état final, il y a présence à la fois de tous les réactifs et des produits.
- L'avancement final ξ_f inférieur à l'avancement maximal : $\xi_f < \xi_{\max}$.



État final d'une transformation chimique



3.2. Réaction totale

- L'un des réactifs est totalement consommé à l'état final : c'est le **réactif limitant**.
- L'avancement final ξ_f de la réaction est maximal : $\xi_f = \xi_{\max}$.

vs. Réaction non totale

- A l'état final, il y a présence à la fois de tous les réactifs et des produits.
- L'avancement final ξ_f inférieur à l'avancement maximal : $\xi_f < \xi_{\max}$.

Définition : Taux d'avancement final

Le **taux d'avancement final** τ_f mesure la proportion de réactif limitant qui a réellement réagi :

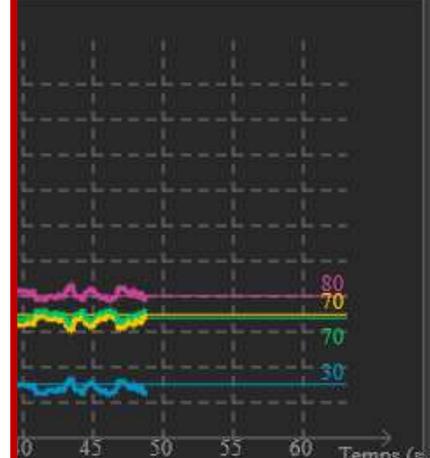
$$\tau_f = \frac{\xi_f}{\xi_{\max}}$$

- Pour une **réaction totale**, le taux d'avancement final vaut 1 (100%).
- Pour une **réaction limitée**, le taux d'avancement final est inférieur à 1.

Évolution du nombre de bi



du quotient "de réaction"



Effacer

Tracer :

Nombres à l'équilibre

Effacer

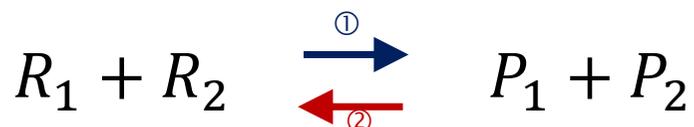
Tracer :

Nombres à l'équilibre

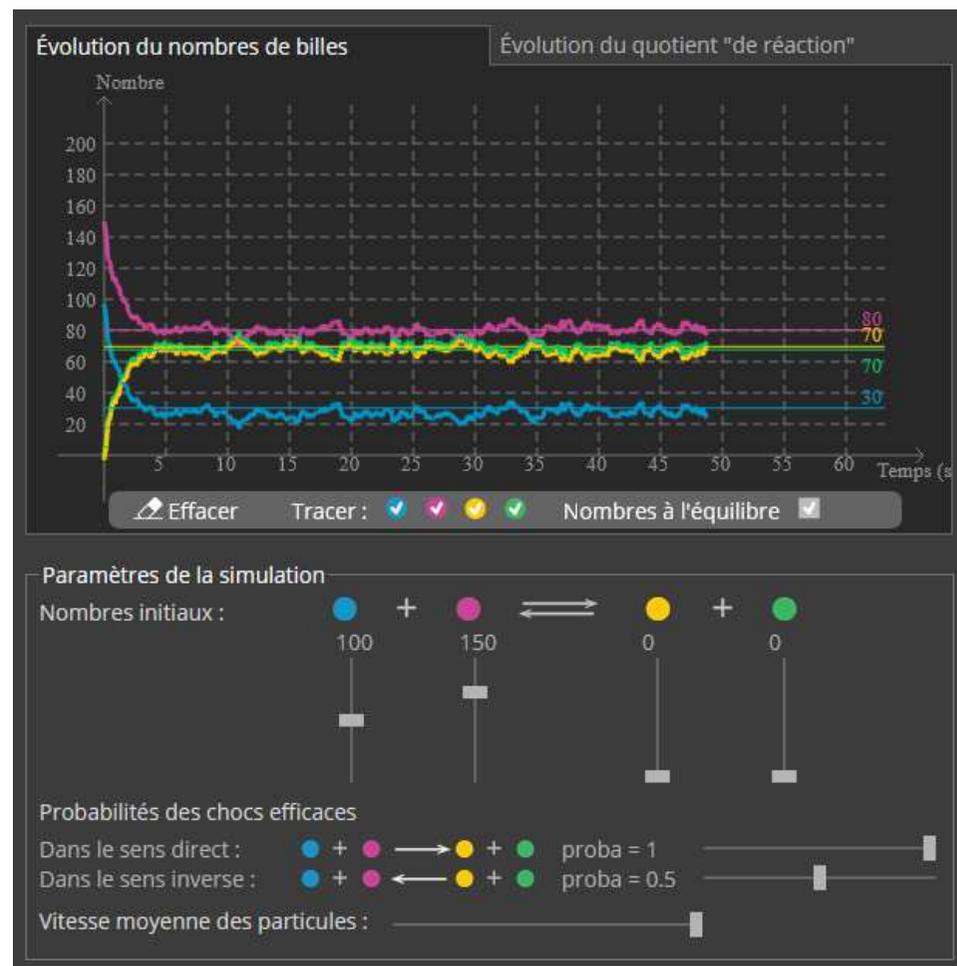
Etat d'équilibre dynamique

Définition : Equilibre dynamique

Dans une réaction non totale, la **réaction directe** ① (entre les réactifs R_1 et R_2) est en partie compensée par la **réaction opposée** ② (entre les produits P_1 et P_2) :



Quand les réactions opposées se compensent exactement, le système est dans un état d'**équilibre dynamique**. Les deux réactions opposées continuent de se produire mais les quantités des réactifs et des produits n'évoluent plus.



Prévoir l'évolution spontanée d'un système chimique

Définition : Quotient de réaction

A chaque réaction chimique d'équation :



r_1, r_2, p_1, p_2 étant les nombres stœchiométriques, on associe un **quotient de réaction** Q_r défini par :

$$Q_r = \frac{a(P_1)^{p_1} \cdot a(P_2)^{p_2}}{a(R_1)^{r_1} \cdot a(R_2)^{r_2}}$$

Prévoir l'évolution spontanée d'un système chimique

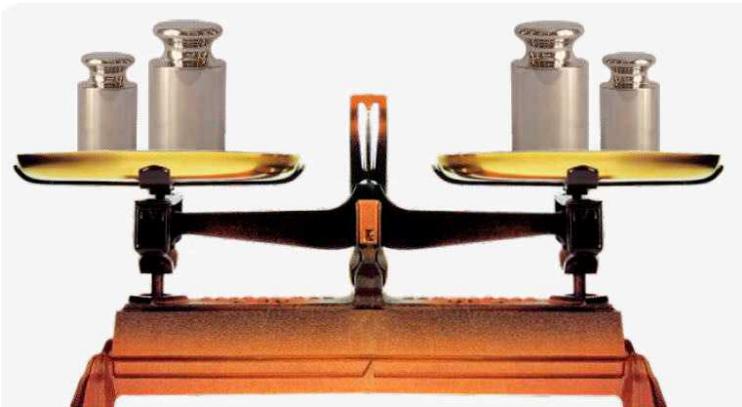
Définition : Quotient de réaction

A chaque réaction chimique d'équation :



r_1, r_2, p_1, p_2 étant les nombres stœchiométriques, on associe un **quotient de réaction** Q_r défini par :

$$Q_r = \frac{a(P_1)^{p_1} \cdot a(P_2)^{p_2}}{a(R_1)^{r_1} \cdot a(R_2)^{r_2}}$$



Prévoir l'évolution spontanée d'un système chimique

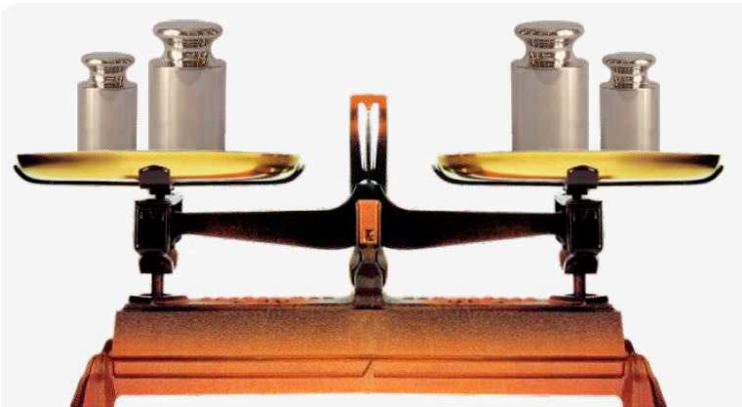
Définition : Quotient de réaction

A chaque réaction chimique d'équation :



r_1, r_2, p_1, p_2 étant les nombres stœchiométriques, on associe un **quotient de réaction** Q_r défini par :

$$Q_r = \frac{a(\mathbf{P}_1)^{p_1} \cdot a(\mathbf{P}_2)^{p_2}}{a(\mathbf{R}_1)^{r_1} \cdot a(\mathbf{R}_2)^{r_2}}$$



Définition : Activité chimique

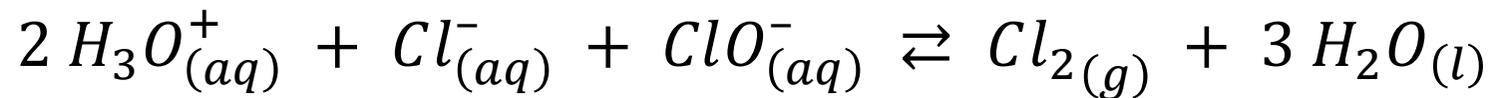
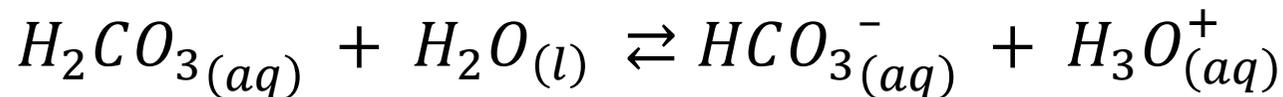
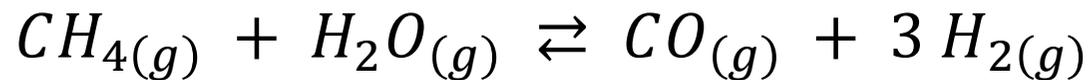
L'**activité chimique** $a(X)$ d'une espèce X est une **grandeur intensive, sans dimension**, caractéristique de son état physico-chimique et de son comportement.

On admettra :

- $a(X) = \frac{[X]}{c^0}$ pour un soluté dans une solution peu concentrée ($[X] < 0,1 \text{ mol.L}^{-1}$), avec $c^0 = 1 \text{ mol.L}^{-1}$;
- $a(X) = 1$ pour un solvant ;
- $a(X) = 1$ pour un solide ;
- $a(X) = \frac{P(X)}{P^0}$ pour un gaz, où $P(X)$ est la pression partielle en X , et $P^0 = 1 \text{ bar}$.

Savoir-faire 4 - Exprimer le quotient de réaction d'une réaction chimique

Donner l'expression du quotient de réaction des réactions suivantes :



Prévoir l'évolution spontanée d'un système chimique

Définition : Quotient de réaction

A chaque réaction chimique d'équation :



r_1, r_2, p_1, p_2 étant les nombres stœchiométriques, on associe un **quotient de réaction** Q_r défini par :

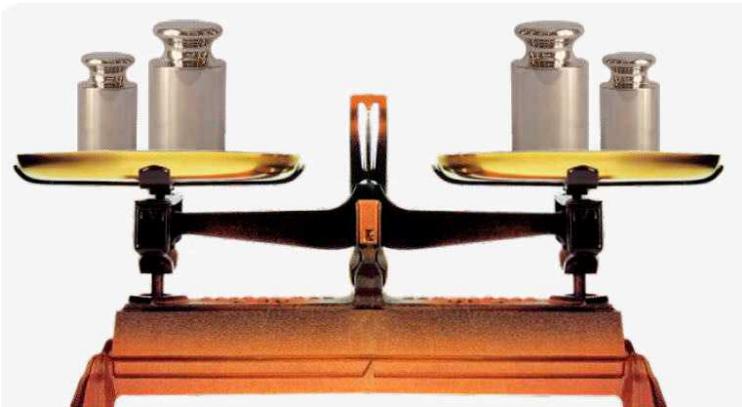
$$Q_r = \frac{a(P_1)^{p_1} \cdot a(P_2)^{p_2}}{a(R_1)^{r_1} \cdot a(R_2)^{r_2}}$$

Loi : Loi d'action de masse

La valeur du quotient de réaction Q_r dans *l'état d'équilibre* ne dépend pas de la composition initiale du système chimique ; c'est une **constante** qui ne dépend que de la température T . On le note $K^0(T)$ et on l'appelle **constante d'équilibre** :

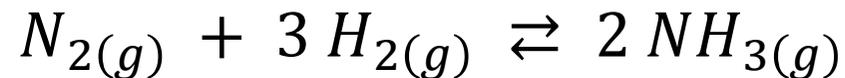
$$K^0(T) = \frac{a_{eq}(P_1)^{p_1} \cdot a_{eq}(P_2)^{p_2}}{a_{eq}(R_1)^{r_1} \cdot a_{eq}(R_2)^{r_2}}$$

Cette relation s'appelle aussi la **loi de Guldberg et Waag**.



Savoir-faire 5 - Déterminer une constante d'équilibre en connaissant l'état final d'une réaction chimique

On considère la réaction



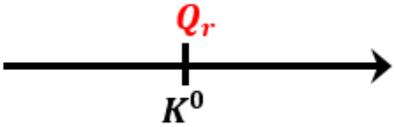
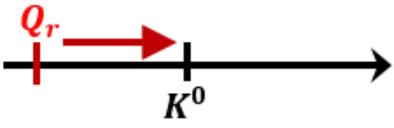
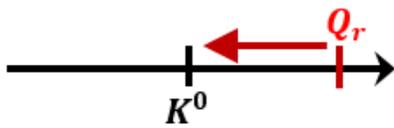
Les pressions partielles à l'équilibre sont : $p(NH_3) = 2,6 \cdot 10^5$ Pa, $p(N_2) = 8 \cdot 10^3$ Pa et $p(H_2) = 5 \cdot 10^3$ Pa.

1. Calculer la constante d'équilibre.

Prévoir l'évolution spontanée d'un système chimique

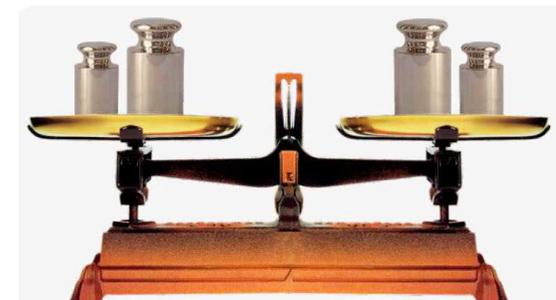
Méthode : Déterminer le sens d'évolution d'une réaction chimique

Le système évolue spontanément afin de diminuer l'écart entre le quotient de réaction Q_r et la constante d'équilibre K^0 de la réaction.

$Q_r = K^0$	Aucune évolution. L'état d'équilibre est atteint.	
$Q_r < K^0$	$Q_r \nearrow$ La transformation évolue spontanément vers la droite (sens direct).	
$Q_r > K^0$	$Q_r \searrow$ La transformation évolue spontanément vers la gauche (sens inverse).	

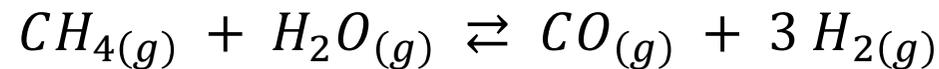
Une réaction pour laquelle $K^0 \gg 1$ est **favorisée dans le sens direct** (elle sera considérée comme quasi-totale si $K^0 \geq 10^4$).

Réciproquement, une réaction pour laquelle $K^0 \ll 1$ est **favorisée dans le sens indirect** (très peu de produits formés).



Savoir-faire 6 - Prévoir le sens d'évolution d'une réaction chimique

On considère la réaction



Dans les conditions proches des conditions industrielles ($T = 950^\circ\text{C}$ et $P = 10 \text{ bar}$), on a une constante d'équilibre $K^0 = 10,6 \cdot 10^3$.

Si on insère $n_1 = 4$ mol de méthane, $n_2 = 8$ mol d'eau, $n_3 = 6$ mol de monoxyde de carbone et $n_4 = 2$ mol de dihydrogène, dans quel sens la réaction se fera-t-elle ?