

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***.

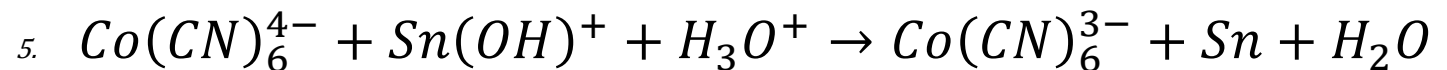
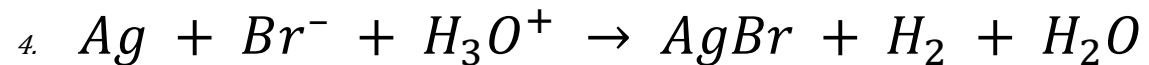
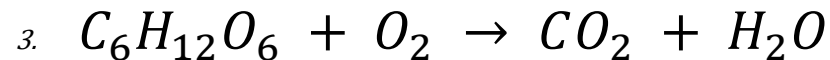
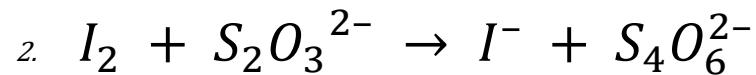
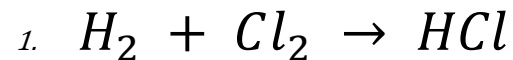
# Savoir-faire 2 - Équilibrer des équations-bilan

## Méthode : Équilibrer une équation

Équilibrer 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. Équilibrer 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

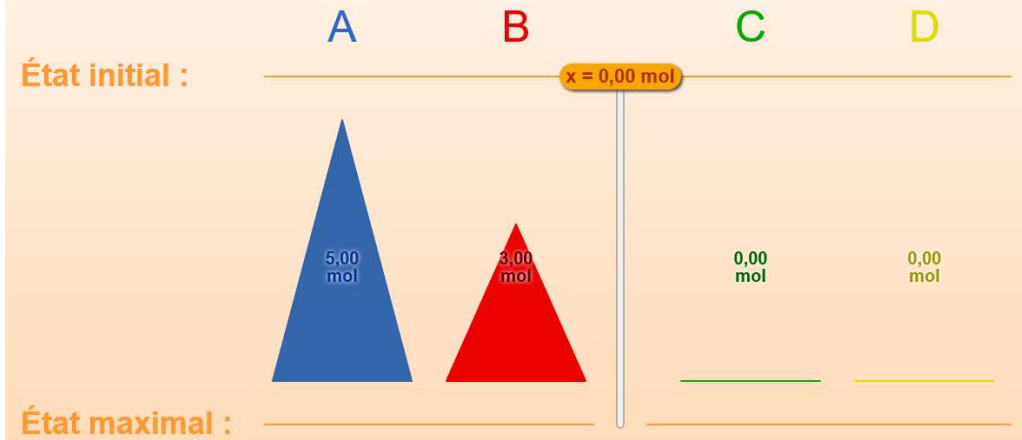
## Définition : Grandeurs pour décrire l'évolution de la réaction

- 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  $\xi$ , 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

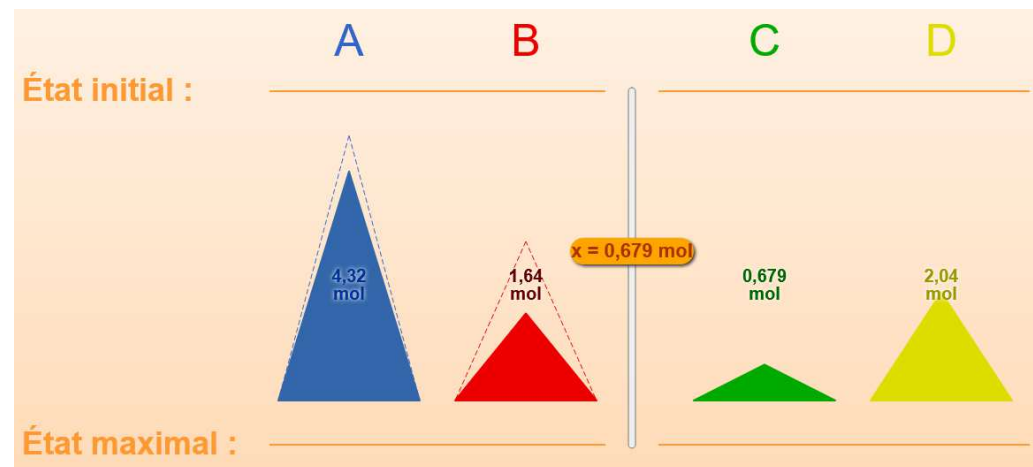
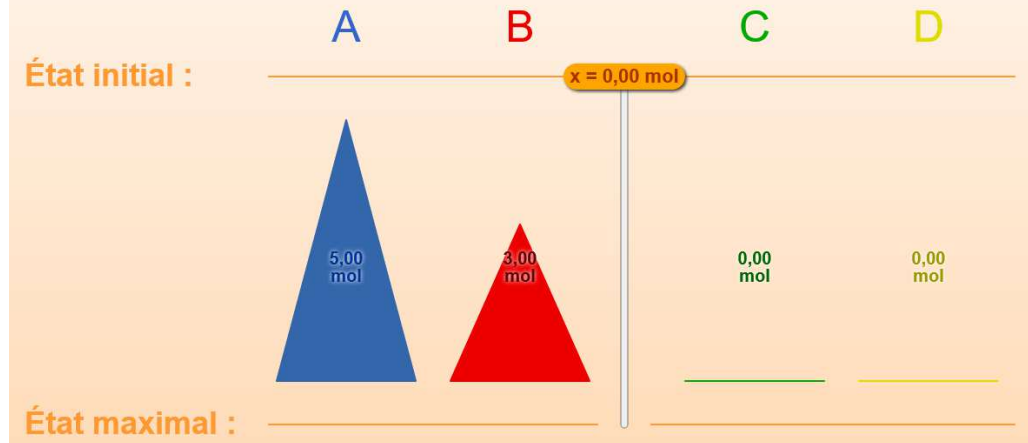
## Définition : Grandeurs pour décrire l'évolution de la réaction

- 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  $\xi$ , 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

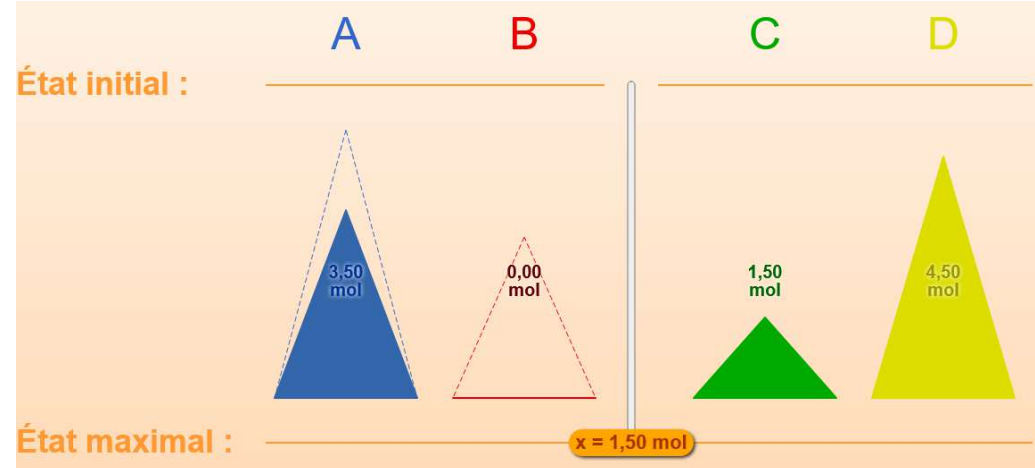
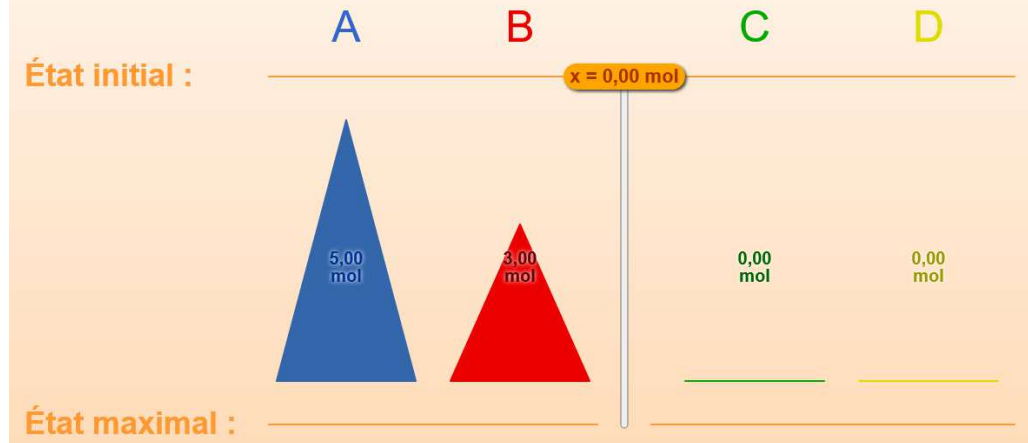
## Définition : Grandeurs pour décrire l'évolution de la réaction

- 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  $\xi$ , 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 :  $\begin{cases} n_i(\text{A}) = 5 \text{ mol} \\ n_i(\text{B}) = 3 \text{ mol} \end{cases}$

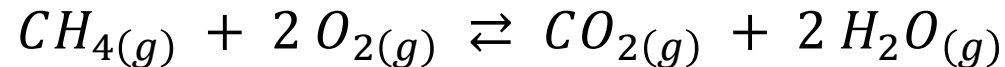


# L'évolution du système : tableau d'avancement

Equation chimique		$r_1 \mathbf{R}_1 + r_2 \mathbf{R}_2 \rightleftharpoons p_1 \mathbf{P}_1 + p_2 \mathbf{P}_2$			
Etat du système	Avancement	Quantité de matière de $\mathbf{R}_1$	Quantité de matière de $\mathbf{R}_2$	Quantité de matière de $\mathbf{P}_1$	Quantité de matière de $\mathbf{P}_2$
Etat initial	0	$n_0(\mathbf{R}_1)$	$n_0(\mathbf{R}_2)$	$n_0(\mathbf{P}_1)$	$n_0(\mathbf{P}_2)$
En cours de transformation	$\xi$	$n_0(\mathbf{R}_1) - r_1 \cdot \xi$	$n_0(\mathbf{R}_2) - r_2 \cdot \xi$	$n_0(\mathbf{P}_1) + p_1 \cdot \xi$	$n_0(\mathbf{P}_2) + p_2 \cdot \xi$
Etat final	$\xi_f$	$n_0(\mathbf{R}_1) - r_1 \cdot \xi_f$	$n_0(\mathbf{R}_2) - r_2 \cdot \xi_f$	$n_0(\mathbf{P}_1) + p_1 \cdot \xi_f$	$n_0(\mathbf{P}_2) + p_2 \cdot \xi_f$

# 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.

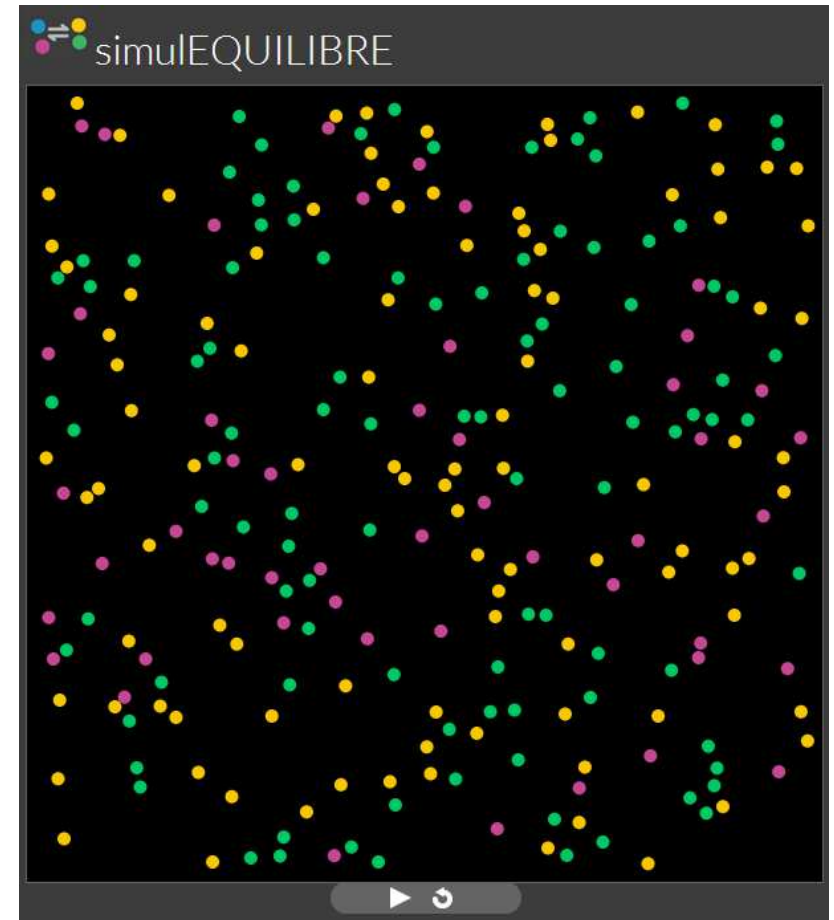
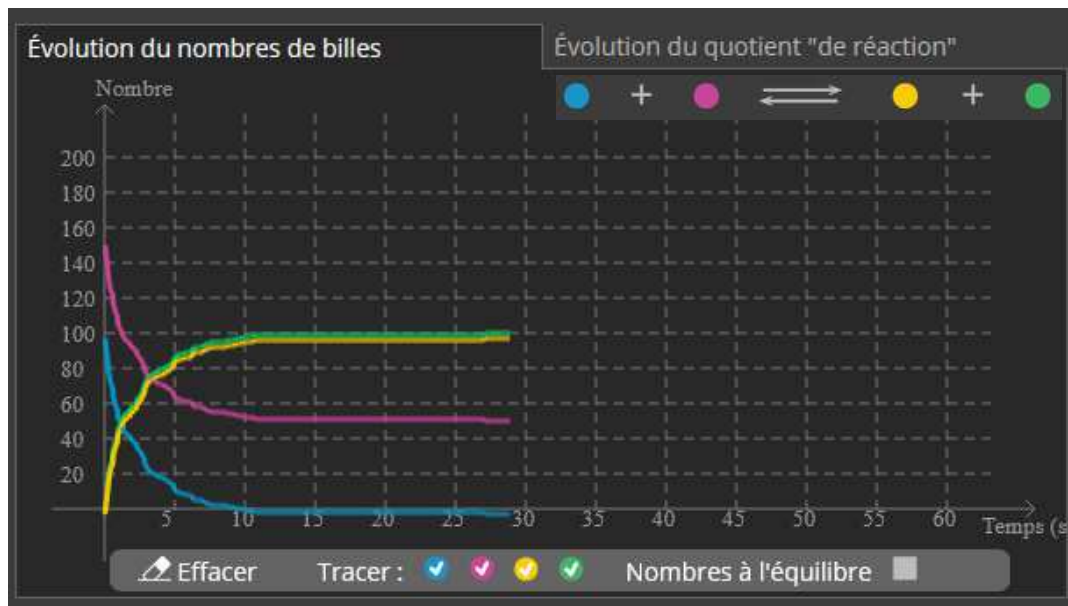
1. Construire le tableau d'avancement en distinguant l'état initial ( $i$ ), un état en cours de réaction et l'état final ( $f$ ). On note  $\xi$  l'avancement de la réaction.
2. Déterminer toutes les quantités de matière à l'instant où  $\xi = 1,5$  mol.
3. Identifier le réactif limitant et la valeur de l'avancement maximal  $\xi_{max}$ .
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

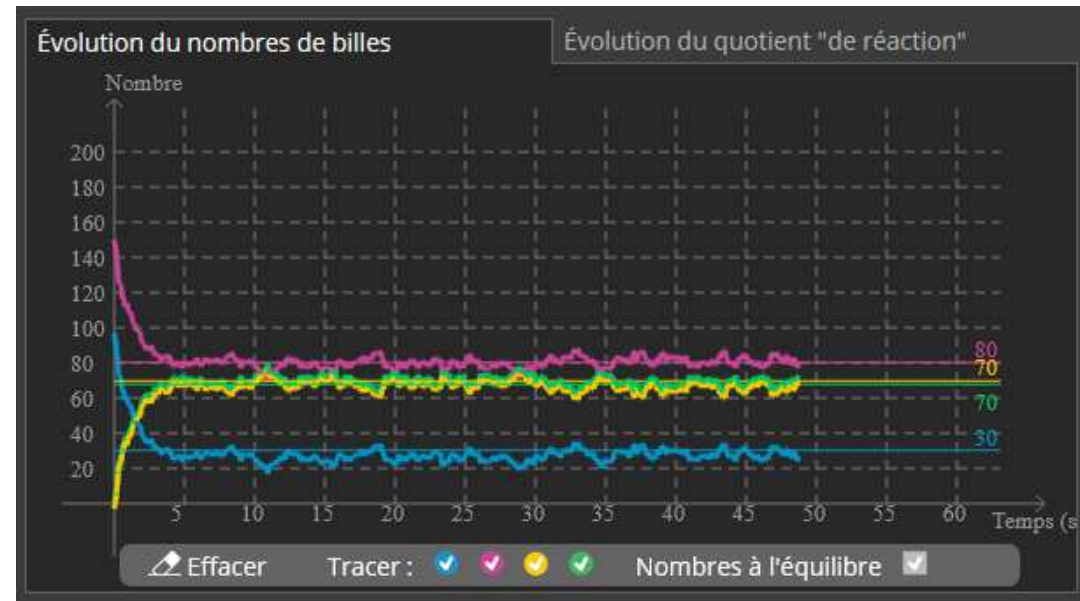
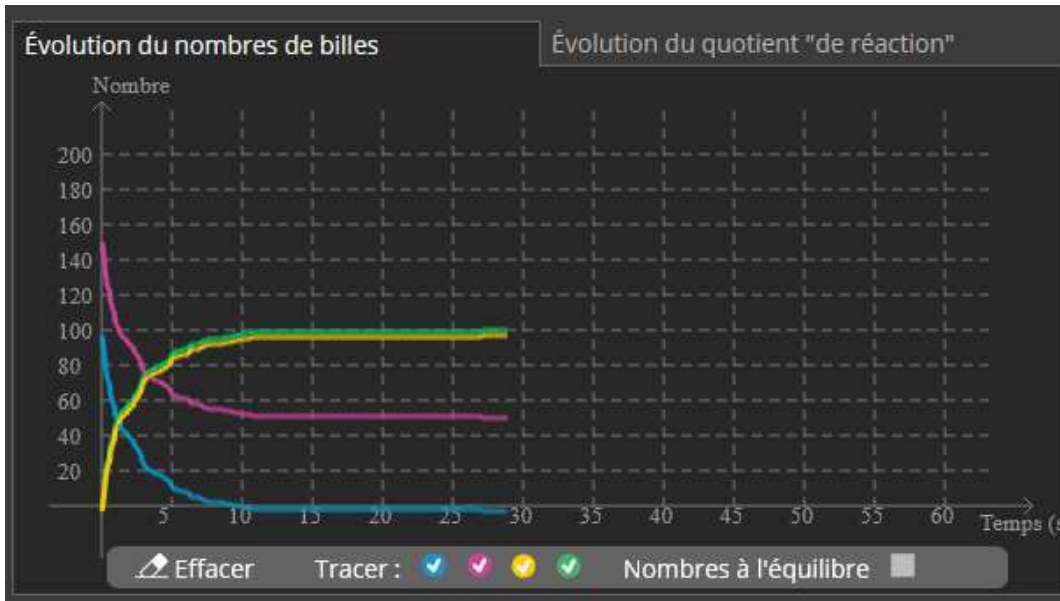


## 3.2. Réaction totale

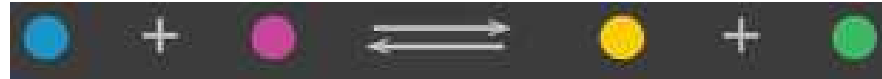
- L'un des réactifs est totalement consommé à l'état final : c'est le **réactif limitant**.
- L'avancement final  $\xi_f$  de la réaction est maximal :  $\xi_f = \xi_{\max}$ .

## 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  $\xi_f$  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  $\xi_f$  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  $\xi_f$  inférieur à l'avancement maximal :  $\xi_f < \xi_{\max}$ .

### Définition : Taux d'avancement final

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

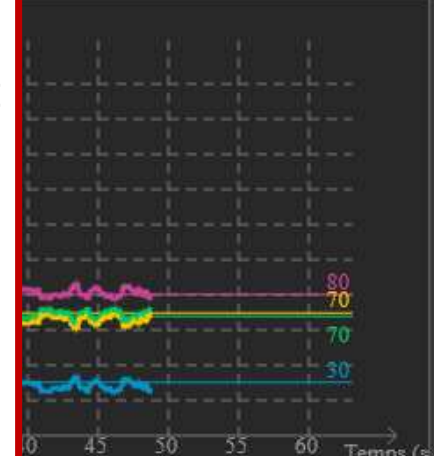
$$\tau_f = \frac{\xi_f}{\xi_{\max}}$$

- 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

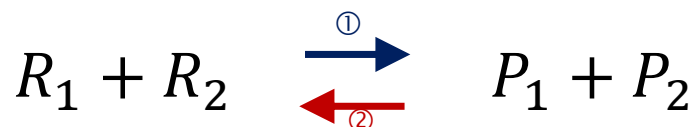
Tracer :

Nombres à l'équilibre

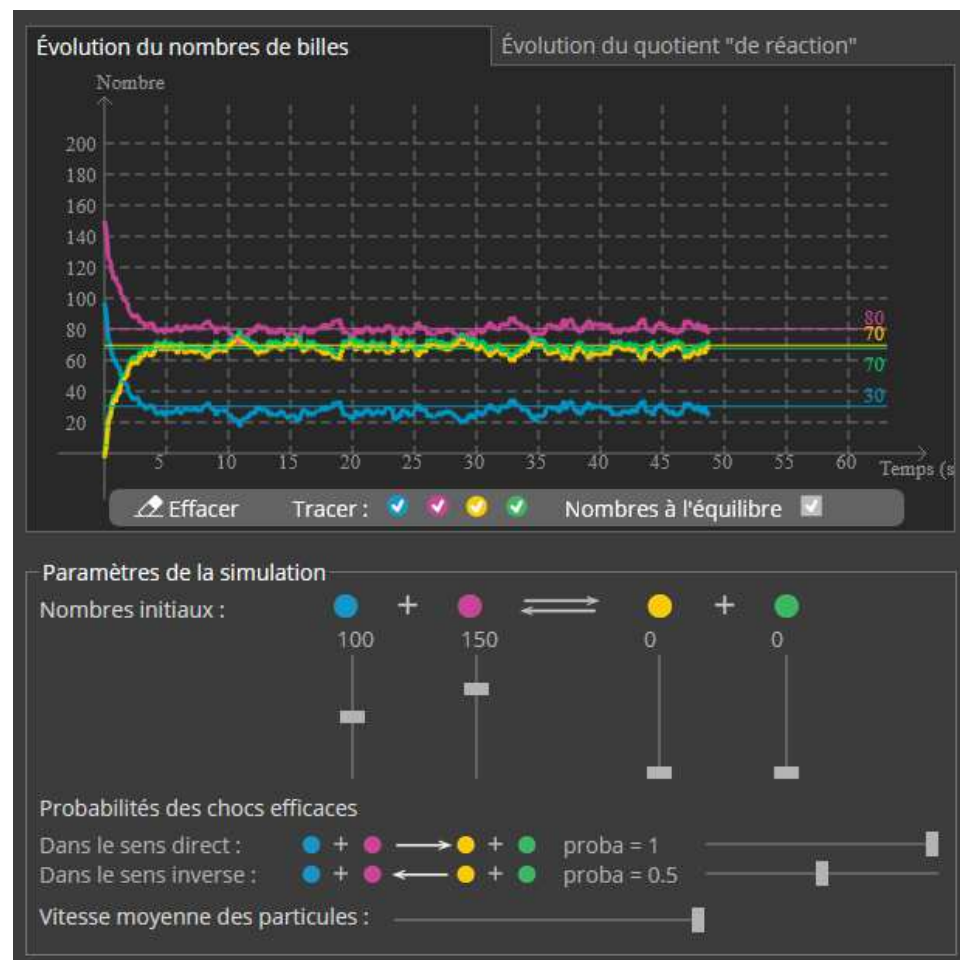
# Etat d'équilibre dynamique

## 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  $P_2$ ) :



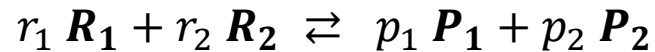
Quand les réactions opposées se compensent exactement, le système est dans un état d'**équilibre dynamique**. Les deux réactions opposées continuent de se produire mais les quantités des réactifs et des produits n'évoluent plus.



# Prévoir l'évolution spontanée d'un système chimique

## **Définition : Quotient de réaction**

A chaque réaction chimique d'équation :



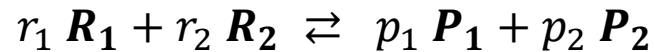
$r_1, r_2, p_1, p_2$  étant les nombres stœchiométriques, on associe un **quotient de réaction**  $Q_r$  défini par :

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

# Prévoir l'évolution spontanée d'un système chimique

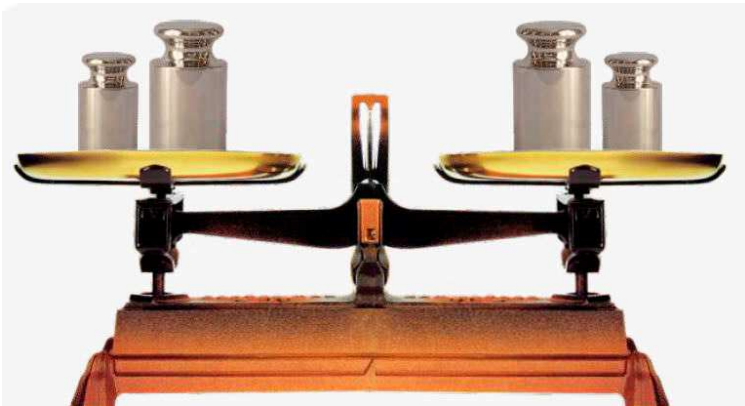
## Définition : Quotient de réaction

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 :

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

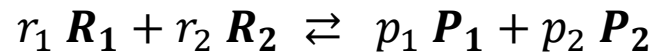




# Prévoir l'évolution spontanée d'un système chimique

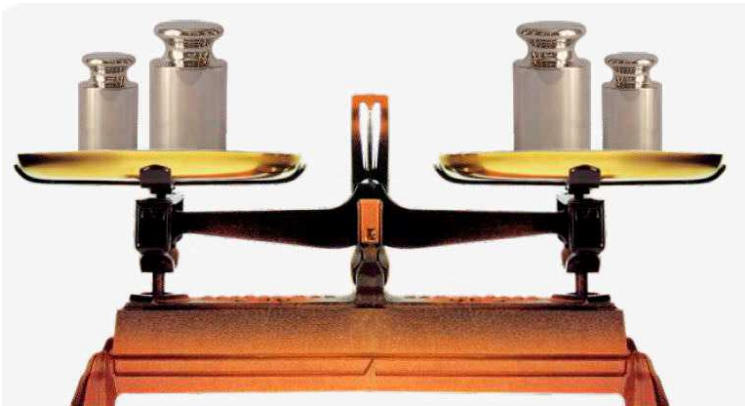
## Définition : Quotient de réaction

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

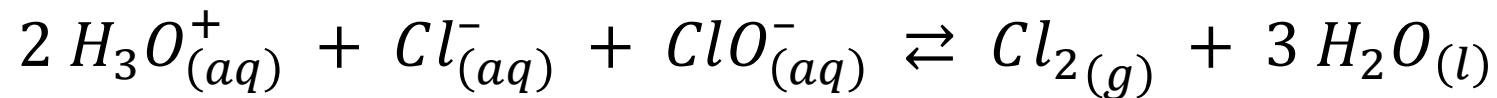
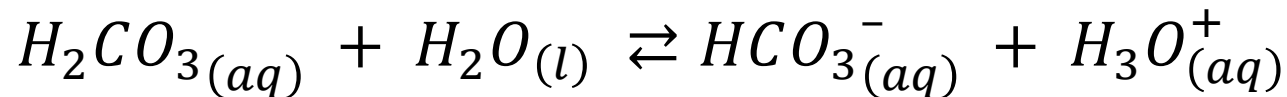
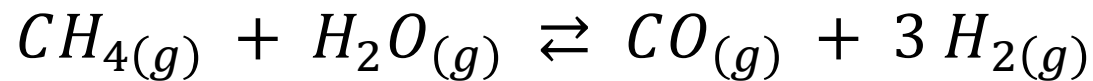
L'**activité chimique**  $a(X)$  d'une espèce  $X$  est une **grandeur intensive, sans dimension**, caractéristique de son état physico-chimique et de son comportement.

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 :

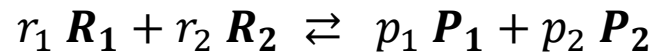




# Prévoir l'évolution spontanée d'un système chimique

## 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 :

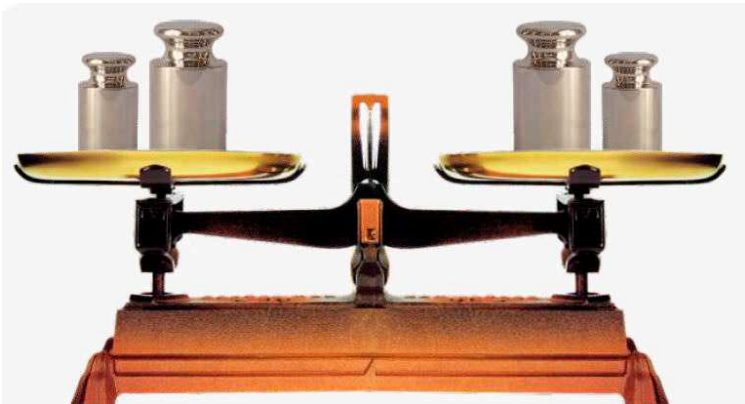
$$Q_r = \frac{a(P_1)^{p_1} \cdot a(P_2)^{p_2}}{a(R_1)^{r_1} \cdot a(R_2)^{r_2}}$$

## 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** :

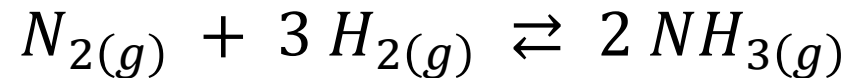
$$K^0(T) = \frac{a_{eq}(P_1)^{p_1} \cdot a_{eq}(P_2)^{p_2}}{a_{eq}(R_1)^{r_1} \cdot a_{eq}(R_2)^{r_2}}$$

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



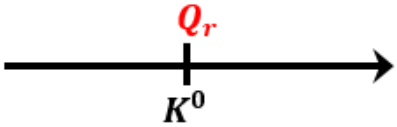
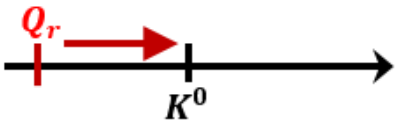
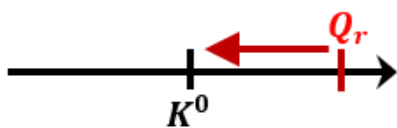
Les pressions partielles à l'équilibre sont :  $p(NH_3) = 2,6 \cdot 10^5$  Pa,  $p(N_2) = 8 \cdot 10^3$  Pa et  $p(H_2) = 5 \cdot 10^3$  Pa.

1. Calculer la constante d'équilibre.

# Prévoir l'évolution spontanée d'un système chimique

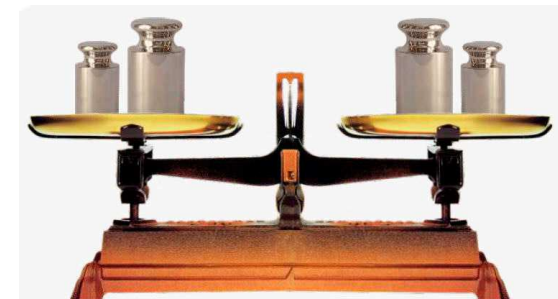
## Méthode : Déterminer le sens d'évolution d'une réaction chimique

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).	

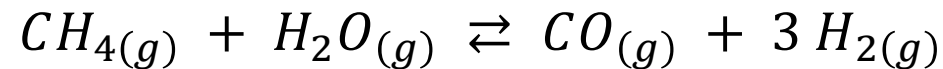
Une réaction pour laquelle  $K^0 \gg 1$  est **favorisée dans le sens direct** (elle sera considérée comme quasi-totale si  $K^0 \geq 10^4$ ).

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 ?