Réaction Chimique

Équation bilan

coefficients stoechiométriques

$$\underbrace{r_1\mathrm{R}_1 + r_2\mathrm{R}_2 + \dots}_{\text{réactifs}} \rightleftarrows \underbrace{p_1\mathrm{P}_1 + p_2\mathrm{P}_2 + \dots}_{\text{produits}}$$

$$\sum_i \nu_i B_i = 0$$

coefficients stoechiométriques algébriques, positifs pour les produits, négatifs pour les réactifs

Exemple :

$$\underset{r_1=1}{\mathrm{CH_4}} + \underset{r_2}{2}\,\underset{R_2}{\mathrm{O_2}} \rightleftarrows \underset{p_1=1}{\mathrm{CO_2}} + \underset{p_2}{2}\,\underset{P_2}{\mathrm{H_2O}}$$

$$\underset{\nu_1}{1}\,\underset{B_1}{\mathrm{CO_2}} + \underset{\nu_2}{2}\,\underset{B_2}{\mathrm{H_2O}} \underset{\nu_3}{-1}\,\underset{B_3}{\mathrm{CH_4}} - \underset{\nu_4}{2}\,\underset{B_4}{\mathrm{O_2}} = 0$$

Avancement

avancement (mol)

variation de la qté de matière

$$\xi(t) = \frac{\Delta n_i}{\nu_i} = \frac{n_i(t) - n_i(0)}{\nu_i}$$

coefficient stoechiométrique algébrique

Tableau d'avancement

permet de suivre l'évolution de la composition du système

$$\mathrm{CH_4} + 2\,\mathrm{O_2} \rightleftarrows \mathrm{CO_2} + 2\,\mathrm{H_2O}$$

État initial	n_1	n_2	n_3	n_4
Plus tard	$n_1 - \xi$	$n_2 - 2\xi$	$n_3 + \xi$	$n_4 + 2\xi$

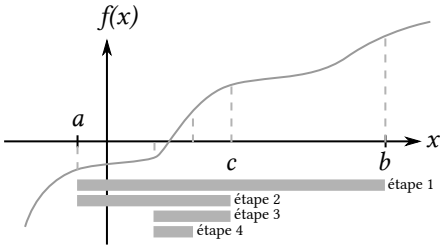
"-" pour les réactifs

"+" pour les produits

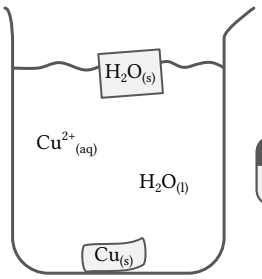
On détermine l'avancement à l'équilibre en résolvant cette équation

$$K = \frac{(n_3+\xi)(n_4+2\xi)^2}{(n_1-\xi)(n_2-2\xi)^2}$$

La résolution doit souvent se faire numériquement, par exemple par la méthode de dichotomie :



Système physico-chimique



Constituants physico-chimiques : $H_2O_{(s)}$ $H_2O_{(l)}$ $Cu^{2+}_{(aq)}$ $Cu_{(s)}$

Espèces chimiques $H_2O_{(s)}$ $Cu^{2+}_{(aq)}$ $Cu_{(s)}$

corps composé — corps simple

Éléments chimiques H Cu O

Lorsqu'il n'y a qu'une espèce chimique, le système est un corps pur. Sinon c'est un mélange.

Quantité de matière
1 mol = 6,02 10^{23} molécules

Fraction molaire

qté de matière du constituant i

$$x_i = \frac{n_i}{n_{tot}}$$

sans unité — qté de matière totale

Concentration molaire

qté de matière du constituant i

$$c_i = [A_i] = \frac{n_i}{V}$$

(mol/l) — volume (l)

Concentration molaire

masse (g)

$$M = \frac{m}{n}$$

(g/mol) — quantité de matière (mol)

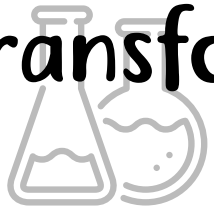
Pression partielle

qté de matière du gaz i

$$p_i = \frac{n_i}{n_{tot}} p_{tot} = x_i p_{tot}$$

pression totale — qté de matière totale de gaz

Transformation chimique



Équilibre chimique

Activité

Corps pur liquide solide

$a_i = 1$

Un solvant (l'eau) se comporte comme un corps pur

Espèce diluée

concentration

$$a_i = \frac{c_i}{c_0}$$

c_0 = 1 mol/l

Gaz parfait

pression partielle

$$a_i = \frac{p_i}{p_0}$$

p_0 = 1 bar

$$p_i V = n_i R T$$

Pa — m³ — mol — K

8.31 J/mol/K

Équilibre

Quotient réactionnel $\quad Q = \dfrac{a_{P_1}^{p_1} \times a_{P_2}^{p_2} \times \dots}{a_{R_1}^{r_1} \times a_{R_2}^{r_2} \times \dots} = \prod_i a_{B_i}^{\nu_i}$

Équilibre = La réaction n'évolue plus.

Constante d'équilibre $\quad K = Q_{eq}$

valeur du quotient réactionnel à l'équilibre

Évolution

$Q < K$ — K — $Q > K$ — Q

réactifs → produits | réactifs ← produits

système à l'équilibre