

Duck AI**Prompt**

"On dispose de 50 mL d'une solution aqueuse d'acide acétique de concentration en soluté apporté 0,01 mol/L et dont on mesure le pH à 3,4. Peux-tu me donner, pour cette solution, le tableau d'avancement en moles (littéral) et en détaillant les calculs effectués, l'avancement maximal x_{\max} , l'avancement final x_f , le taux d'avancement et préciser si la réaction est totale ou non. Ensuite, peux-tu me donner les concentrations des différentes espèces chimiques en solution (acide acétique, ions H_3O^+ , ions acétates) à l'issue de la réaction ainsi que la valeur de la constante d'acidité et du pK_a du couple. Il faut négliger la quantité de matière initiale d'ions oxonium dans la solution et les calculs et les notations doivent être en accord avec un niveau de l'enseignement de spécialité en terminale."

Hypothèses et données initiales

- Volume de la solution : $V = 50,0 \text{ mL} = 0,0500 \text{ L}$.
- Concentration initiale en soluté apporté (acide acétique) : $c_0 = 0,0100 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$.
- pH mesuré = 3,40.
- Température supposée : $25 \text{ }^\circ\text{C}$ (activité \approx concentration).
- Négliger la quantité initiale d'ions oxonium (H_3O^+) due à l'eau pure.
- Espèces en jeu : CH_3COOH (acide acétique, noté HAc), CH_3COO^- (Ac^-), H_3O^+ .
- On appellera x l'avancement de la réaction de dissociation $\text{HA} \rightleftharpoons \text{H}^+ + \text{A}^-$ (en moles).

Calculs en moles (littéral puis numérique) et tableau d'avancement.

1) Quantité initiale d'acide (n_0)

Littéral : $n_0 = c_0 \cdot V$.

Numérique : $n_0 = 0,0100 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1} \times 0,0500 \text{ L} = 5,00 \cdot 10^{-4} \text{ mol}$.

2) Tableau d'avancement (en moles) — général (littéral)

Réaction : $\text{HAc} \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+ + \text{Ac}^-$

- Quantité initiale (mol) : $\text{HAc} = n_0$; $\text{H}_3\text{O}^+ = \approx 0$; $\text{Ac}^- = 0$.
- Avancement : $+x$ pour produits, $-x$ pour réactif.
- Quantité finale (mol) : $\text{HAc} = n_0 - x$; $\text{H}_3\text{O}^+ = x$; $\text{Ac}^- = x$.

Tableau (valeurs numériques) :

- HAc : initial $5,00 \cdot 10^{-4}$; variation $-x$; finale $5,00 \cdot 10^{-4} - x$.
- H_3O^+ : initial ≈ 0 ; variation $+x$; finale x .
- Ac^- : initial 0 ; variation $+x$; finale x .

3) Détermination de x_{final} à partir du pH

$\text{pH} = 3,40 \Rightarrow [\text{H}_3\text{O}^+] = 10^{(-\text{pH})}$.

Numérique : $[\text{H}_3\text{O}^+] = 10^{(-3,40)} = 3,98 \cdot 10^{-4} \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ (valeur arrondie).

Comme la solution totale a un volume $V = 0,0500 \text{ L}$, la quantité molaire finale d'ions H_3O^+ est :

$x_{\text{final}} = n(\text{H}_3\text{O}^+) = [\text{H}_3\text{O}^+] \cdot V = 3,98 \cdot 10^{-4} \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1} \times 0,0500 \text{ L} = 1,99 \cdot 10^{-5} \text{ mol}$.

(Remarque : on a supposé que toute source de H_3O^+ provient de la dissociation de l'acide acétique — si d'autres contributions négligeables, la méthode reste valide.)

4) Avancement maximal théorique x_{\max} (si réaction totale)

Si l'acide se dissociait complètement $\rightarrow x_{\max_théorique} = n_0 = 5,00 \cdot 10^{-4} \text{ mol}$.

Le taux d'avancement (degré de dissociation α) :

$\alpha = x_{\text{final}} / x_{\max_théorique} = 1,99 \cdot 10^{-5} / 5,00 \cdot 10^{-4} = 0,0398 \approx 3,98 \%$.

Donc la réaction n'est pas totale ; le degré de dissociation est $\approx 0,0398$.

5) Concentrations finales des espèces en solution

Concentrations = quantité finale / volume.

- $[H_3O^+] = x_{\text{final}} / V = 1,99 \cdot 10^{-5} \text{ mol} / 0,0500 \text{ L} = 3,98 \cdot 10^{-4} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ (cohérent avec pH).

- $[Ac^-] = x_{\text{final}} / V = 3,98 \cdot 10^{-4} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ (égale à $[H_3O^+]$).

- $[HAc] = (n_0 - x_{\text{final}}) / V = (5,00 \cdot 10^{-4} - 1,99 \cdot 10^{-5}) / 0,0500 \text{ L} = (4,80 \cdot 10^{-4}) / 0,0500 = 9,60 \cdot 10^{-3} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$.

Vérification rapide : concentration totale en acide apporté ($HAc + Ac^-$) = $9,60 \cdot 10^{-3} + 3,98 \cdot 10^{-4} = 0,0100 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ (cohérent avec c_0).

Résumons les concentrations finales (arrondies raisonnablement) :

- $[H_3O^+] = 3,98 \cdot 10^{-4} \text{ M}$

- $[Ac^-] = 3,98 \cdot 10^{-4} \text{ M}$

- $[HAc] = 9,60 \cdot 10^{-3} \text{ M}$

6) Calcul de K_a et pK_a du couple HAc/Ac^-

Définition : $K_a = [H_3O^+][Ac^-] / [HAc]$.

Numérique :

$K_a = (3,98 \cdot 10^{-4}) \times (3,98 \cdot 10^{-4}) / (9,60 \cdot 10^{-3})$

$= (1,584 \cdot 10^{-7}) / (9,60 \cdot 10^{-3})$

$= 1,65 \cdot 10^{-5}$ (approx).

$pK_a = -\log_{10}(K_a) = -\log_{10}(1,65 \cdot 10^{-5}) \approx 4,78$.

(Remarque : valeur tabulée du pK_a de l'acide acétique à $25^\circ \text{C} \approx 4,76$; notre résultat 4,78 est cohérent compte tenu des arrondis.)

7) Récapitulatif final (tableau d'avancement en moles et résultats numériques)

Tableau d'avancement (moles) :

- $n_0(HAc) = 5,00 \cdot 10^{-4} \text{ mol}$

- variation = $-x_{\text{final}} = -1,99 \cdot 10^{-5} \text{ mol}$

- $n_{\text{final}}(HAc) = 4,80 \cdot 10^{-4} \text{ mol}$

- $n_0(H_3O^+) \approx 0$; variation $+1,99 \cdot 10^{-5}$; $n_{\text{final}}(H_3O^+) = 1,99 \cdot 10^{-5} \text{ mol}$

- $n_0(Ac^-) = 0$; variation $+1,99 \cdot 10^{-5}$; $n_{\text{final}}(Ac^-) = 1,99 \cdot 10^{-5} \text{ mol}$

Concentrations finales :

- $[H_3O^+] = 3,98 \cdot 10^{-4} \text{ M}$

- $[Ac^-] = 3,98 \cdot 10^{-4} \text{ M}$

- $[HAc] = 9,60 \cdot 10^{-3} \text{ M}$

Avancement maximal théorique : $x_{\text{max}} = n_0 = 5,00 \cdot 10^{-4} \text{ mol}$.

Avancement réel $x_{\text{final}} = 1,99 \cdot 10^{-5} \text{ mol}$.

Taux d'avancement (degré de dissociation) $\alpha \approx 3,98 \%$.

Constante d'acidité et pK_a :

- $K_a \approx 1,65 \cdot 10^{-5}$

- $pK_a \approx 4,78$

Si tu veux, je peux fournir les calculs intermédiaires avec plus de chiffres significatifs ou refaire les arrondis différemment.

Le chat

Voici une réponse détaillée et structurée à ton problème de chimie sur la solution d'acide acétique.

1. Données initiales

- **Volume de la solution (V)** : 50 mL = 0,050 L
 - **Concentration initiale en soluté apporté (C₀)** : 0,01 mol/L
 - **pH mesuré** : 3,4
-

2. Calcul de la concentration initiale en acide acétique (CH₃COOH)

La concentration initiale en acide acétique est donnée directement :

$$[\text{CH}_3\text{COOH}]_0 = C_0 = 0,01 \text{ mol/L}$$

3. Calcul de la concentration en ions H₃O⁺ à partir du pH

Le pH est défini par :

$$\text{pH} = -\log([\text{H}_3\text{O}^+])$$

Donc :

$$[\text{H}_3\text{O}^+] = 10^{-\text{pH}} = 10^{-3,4} \approx 3,98 \times 10^{-4} \text{ mol/L}$$

4. Tableau d'avancement de la réaction

L'acide acétique (CH₃COOH) réagit avec l'eau selon l'équilibre suivant :

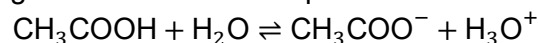


Tableau d'avancement (en moles)

On travaille avec des concentrations, mais on peut aussi exprimer l'avancement en moles pour 1 L de solution (car les concentrations sont en mol/L).

Espèce	Quantité initiale (mol)	Quantité finale (mol)
CH ₃ COOH	$n_0 = C_0 \times V = 0,01 \times 0,05 = 5 \times 10^{-4}$	$n_0 - x_f$
H ₂ O	Excès (non limité)	Excès
CH ₃ COO ⁻	0	x_f
H ₃ O ⁺	0	x_f

Remarque : L'eau est en excès, donc sa concentration reste constante.

5. Calcul de l'avancement final x_f

À l'équilibre, la concentration en ions H₃O⁺ est égale à x_f (car x_f est la quantité de matière d'ions H₃O⁺ formés par litre). Donc :

$$x_f = [\text{H}_3\text{O}^+] = 3,98 \times 10^{-4} \text{ mol/L}$$

Pour 50 mL (0,050 L) :

$$x_f = 3,98 \times 10^{-4} \times 0,050 = 1,99 \times 10^{-5} \text{ mol}$$

6. Avancement maximal x_{max}

L'avancement maximal correspond à la réaction totale de l'acide acétique :

$$x_{\text{max}} = n_0 = 5 \times 10^{-4} \text{ mol}$$

7. Taux d'avancement τ

Le taux d'avancement est donné par :

$$\tau = \frac{x_f}{x_{\max}} = \frac{1,99 \times 10^{-5}}{5 \times 10^{-4}} \approx 0,0398 \text{ soit } 3,98\%$$

Conclusion : La réaction n'est **pas totale** ($\tau \ll 100\%$).

8. Concentrations des espèces chimiques à l'équilibre

- **Acide acétique restant** :

$$[\text{CH}_3\text{COOH}]_{\text{éq}} = C_0 - x_f = 0,01 - 3,98 \times 10^{-4} \approx 9,60 \times 10^{-3} \text{ mol/L}$$

- **Ions acétate (CH_3COO^-)** :

$$[\text{CH}_3\text{COO}^-]_{\text{éq}} = x_f = 3,98 \times 10^{-4} \text{ mol/L}$$

- **Ions H_3O^+** :

$$[\text{H}_3\text{O}^+]_{\text{éq}} = 3,98 \times 10^{-4} \text{ mol/L}$$

9. Constante d'acidité K_a et pKa

La constante d'acidité K_a est donnée par :

$$K_a = \frac{[\text{CH}_3\text{COO}^-][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{CH}_3\text{COOH}]} = \frac{(3,98 \times 10^{-4})^2}{9,60 \times 10^{-3}} \approx 1,65 \times 10^{-5}$$

Le pKa est donc :

$$\text{p}K_a = -\log(K_a) \approx 4,78$$

10. Résumé des résultats

- **Avancement maximal** x_{\max} : 5×10^{-4} mol
 - **Avancement final** x_f : $1,99 \times 10^{-5}$ mol
 - **Taux d'avancement** τ : 3,98%
 - **Réaction totale ?** : Non
 - **Concentrations à l'équilibre** :
 - $[\text{CH}_3\text{COOH}]_{\text{éq}} = 9,60 \times 10^{-3}$ mol/L
 - $[\text{CH}_3\text{COO}^-]_{\text{éq}} = 3,98 \times 10^{-4}$ mol/L
 - $[\text{H}_3\text{O}^+]_{\text{éq}} = 3,98 \times 10^{-4}$ mol/L
 - **Constante d'acidité** K_a : $1,65 \times 10^{-5}$
 - **pKa** : 4,78
-

Si tu veux que je t'explique un point en particulier ou que je vérifie un calcul, n'hésite pas !

Le chat

"Peux-tu me générer un programme python qui permettent de calculer le taux d'avancement de la réaction d'un acide dans l'eau si je donne le pKa et la concentration en soluté apporté. Je dois pouvoir ensuite l'utiliser dans différents cas de figure en donnant au programme le pKa et la concentration il doit me calculer le taux d'avancement"

Pour calculer le **taux d'avancement** d'une réaction acido-basique en solution aqueuse, on utilise généralement la relation entre le **pKa**, la **concentration initiale** de l'acide, et la **constante d'acidité (Ka)**. Le taux d'avancement τ est défini comme le rapport entre la quantité d'acide qui a réagi et la quantité initiale d'acide.

Hypothèses et formules

1. **Réaction** : $AH + H_2O \rightleftharpoons A^- + H_3O^+$
2. **Constante d'acidité** : $K_a = \frac{[A^-][H_3O^+]}{[AH]}$
3. **pKa** : $pKa = -\log(K_a)$
4. **Taux d'avancement** : $\tau = \frac{x}{C_0}$, où x est la concentration d'acide qui a réagi et C_0 la concentration initiale.

Pour un acide faible, on peut montrer que :

$$\tau \approx \frac{\sqrt{K_a \cdot C_0}}{C_0} = \sqrt{\frac{K_a}{C_0}}$$

où $K_a = 10^{-pKa}$.

Programme Python

Voici un programme Python qui calcule le taux d'avancement τ en fonction du **pKa** et de la **concentration initiale** C_0 (en mol/L) :

```
import math

def calcul_taux_avancement(pKa, C0):
    """
    Calcule le taux d'avancement d'une réaction acido-basique en solution aqueuse.

    Args:
        pKa (float): pKa de l'acide.
        C0 (float): Concentration initiale de l'acide en mol/L.

    Returns:
        float: Taux d'avancement (tau) en %.
    """
    Ka = 10 ** (-pKa)
    tau = math.sqrt(Ka / C0)
    return tau * 100 # Retourne le taux en pourcentage

# Exemple d'utilisation
pKa = float(input("Entrez le pKa de l'acide : "))
C0 = float(input("Entrez la concentration initiale (en mol/L) : "))

tau = calcul_taux_avancement(pKa, C0)
print(f"Le taux d'avancement de la réaction est de {tau:.2f} %.")
```

Explications

- **Entrées** : Le programme demande le **pKa** et la **concentration initiale** C_0 .
- **Calcul** : Il calcule $K_a = 10^{-\text{pKa}}$, puis $\tau = \sqrt{\frac{K_a}{C_0}}$.
- **Sortie** : Le taux d'avancement est affiché en pourcentage.

Cas d'usage

- **Acide faible** : Ce programme est valable pour les acides faibles (ex : acide acétique, $\text{pKa} \approx 4.76$).
- **Concentration** : Assurez-vous que C_0 est en **mol/L**.
- **Limites** : Pour les acides forts ou des concentrations très faibles, cette approximation peut ne pas être valable.

Utilisation

1. Copiez ce code dans un fichier .py (ex : taux_avancement.py).
2. Exécutez-le avec Python.
3. Entrez les valeurs demandées.