

Chapitre 7

AD. 7A – Acide faible dans l'eau(activité p. 210)

L'outil numérique permet, en chimie, d'effectuer des calculs et des tracés à partir de la théorie (constante d'acidité, relation entre pH et pK_A , etc.).

Objectif Utiliser un langage de programmation pour calculer le taux d'avancement final de la réaction entre un acide et l'eau et pour tracer un diagramme de distribution.

1 Calcul du taux d'avancement final

```
pKa=float(input("pKa du couple : "))
concentration=float(input("Concentration en
mol/L : "))
Ka=10**(-pKa)
### A MODIFIER ###
### Coefficients du polynome du deuxieme degre
a=...
b=...
c=...
### Discriminant
Delta=...
### Solution pour [H3O+]
h=...
### Taux d'avancement final
tau=...
### pH final
pH=-log10(h)
```

2 Tracé du diagramme de distribution

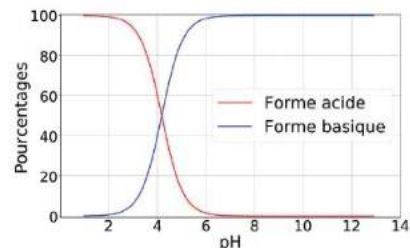
```
for i in range(120):
    pH.append(1+i/10)
    Pa.append(100/(1+10**(pH[i]-pKa)))
    Pb.append(100-Pa[i])
```

Pour ajouter à la fin de la liste L un élément x, on peut utiliser L.append(x)

3 Un couple acide-base

Pour le couple acide benzoïque/ion benzoate, $pK_A = 4,19$:

- Si $c_a = 2,50 \times 10^{-3} \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ alors :
 - le taux d'avancement final de la réaction entre l'acide et l'eau est 14,8 % ;
 - le pH de la solution est 3,43.
- Le diagramme de distribution est le suivant.



Questions

1 Taux d'avancement final d'une réaction entre un acide et l'eau

Soit AH un acide faible, du couple AH/A^- .

- Écrire l'équation de la réaction entre AH et l'eau.
- On note h la concentration en ions oxonium à l'équilibre, $h = [H_3O^+]_{\text{éq}}$ et c_a la concentration de la solution. On néglige les ions issus de l'autoprotolyse de l'eau. Exprimer les concentrations à l'équilibre $[AH]_{\text{éq}}$, $[A^-]_{\text{éq}}$, puis la constante d'acidité K_A du couple AH/A^- , en fonction de h , c_a et $c^0 = 1 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$.
- Montrer que h est solution d'une équation de la forme $ah^2 + bh + c = 0$, pour laquelle on donnera les expressions de a , b et c en fonction de K_A , c_a et c^0 .
- Donner l'expression de sa solution positive.
- Compléter le programme *tauxavancementfinal.py* fourni (hatier-clic.fr/pct210) (doc. 1) et le vérifier sur l'exemple du doc. 3.
- Pourquoi ce programme ne permet-il pas de prendre en compte des cas où la concentration c_a est très faible ?

2 Diagramme de distribution

Le programme *diagrammedistribution.py* fourni (hatier-clic.fr/pct210) réalise le diagramme de distribution d'un couple acide-base.

- Exécuter ce programme sur l'exemple du doc. 3 pour afficher le diagramme produit.
- Le doc. 2 reproduit un extrait du programme. Expliquer comment est construite la liste `pH`, et en particulier pourquoi on a choisi 120 itérations.
- En utilisant la définition de la constante d'acidité K_A du couple AH/A^- ou la relation entre pH et pK_A , montrer que $[A^-]_{\text{éq}} = [AH]_{\text{éq}} 10^{\text{pH} - \text{p}K_A}$.
- Si l'on note P_b le pourcentage de l'espèce basique A^- et P_a le pourcentage de l'espèce acide conjuguée AH, montrer que :

$$P_b = P_a 10^{\text{pH} - \text{p}K_A} \quad \text{et} \quad P_b + P_a = 100 \%$$

- Montrer, en résolvant ce système d'équations, que les lignes de calcul des listes `Pb` et `Pa` du programme calculent bien ces pourcentages.