

CTM2 : MODELISATION D'UNE TRANSFORMATION

1/ Evolution d'un système chimique

a/ Transformation chimique et équation-bilan

Au cours d'une transformation chimique, des espèces chimiques sont modifiées :

- ✓ sont consommés et leurs quantités de matière diminuent ;
- ✓ sont formés et leurs quantités de matière augmentent.

A l'échelle macroscopique, on décrit le système chimique par le modèle de la réaction chimique et de l'équation de réaction qui lui est associée.

L'équation de la réaction rend compte des proportions dans lesquelles les réactifs réagissent et les produits se forment. L'écriture d'une équation de réaction respecte les lois de conservation :

- ✓ de part et d'autre de la flèche ;
- ✓ de part et d'autre de la flèche.

Pour cela, il faut ajuster placés devant les réactifs et les produits.

Important : Ne pas faire apparaître les espèces spectatrices dans l'équation-bilan !!

b/ Tableau d'avancement d'une transformation chimique

❖ Avancement d'une réaction

..... est une grandeur qui permet de suivre l'évolution des quantités de matière des réactifs et des produits au cours de la réaction chimique. Il s'exprime en

A l'état initial, il est égal à 0 et augmente au cours de la réaction pour atteindre sa valeur finale quand la réaction est terminée.

Exemple : Combustion du méthane : $\text{CH}_4(g) + 2 \text{O}_2(g) \rightarrow \text{CO}_2(g) + 2 \text{H}_2\text{O}(l)$

Au cours de la réaction : Il disparaît x moles de CH_4 et $2x$ moles de O_2 . Il se forme x mol de CO_2 et $2x$ moles de H_2O .

Si la quantité de matière initiale de CH_4 est n_{i,CH_4} , alors la quantité de CH_4 qui reste est $n_{i,\text{CH}_4} - x$.

Si la quantité de matière initiale de O_2 est n_{i,O_2} , alors la quantité de O_2 qui reste est : $n_{i,\text{O}_2} - 2x$.

❖ Tableau d'avancement et bilan de matière :

Pour noter l'évolution des quantités de matière des réactifs et des produits, on utilise un tableau qui réalise, sur chaque ligne, le bilan de matière (composition en mol du système) : à l'état initial, en cours de transformation, à l'état final.

L'équation générale d'une réaction s'écrit :



où a, b, c, d sont des nombres stœchiométriques et A, B, C, D les formules des réactifs et des produits.

Équation – bilan		a A	+	b B	→	c C	+	d D
État du système	Avancement x (en mol)	Quantités de matière (en mol)						
État initial (E.I.)								
État en cours de transformation (E.C.T.)								
État final (E.F.)								

❖ Avancement maximal d'une réaction

L'avancement maximal noté x_{max} (en mol) est

Pour déterminer la valeur de l'avancement maximal x_{max} , on calcule les valeurs des avancements qui annulent les quantités de matière de chacun des réactifs. La plus petite de ces valeurs fournit l'avancement maximal x_{max} .

Pour déterminer x_{max} , il faut donc faire autant d'hypothèses qu'il y a de réactifs :

- ✓ Hypothèse 1 : si A est le réactif limitant, alors
- ✓ Hypothèse 2 : si B est le réactif limitant, alors

La plus petite de ces valeurs fournit l'avancement maximal x_{max} . Le réactif qui lui est associé est appelé

Quelques remarques importantes :

- Souvent, les quantités de matière des réactifs à l'état initial ne sont pas données : il faut les calculer. Le calcul des quantités de matière à l'état initial n'a rien à voir avec les coefficients stœchiométriques !
- Ce n'est pas parce que l'un des réactifs est en plus petite quantité à l'état initial qu'il est nécessairement le réactif limitant ! Cela n'est vrai que si les réactifs ont le même coefficient stœchiométrique.

Exemple : On mélange $n_{i,Ca} = 6,0 \cdot 10^{-4}$ mol d'ions calcium $Ca_{(aq)}^{2+}$ avec $n_{i,PO_4} = 1,0 \cdot 10^{-3}$ mol d'ions phosphate $PO_4^{3-}_{(aq)}$. Il se forme un précipité de phosphate de calcium $Ca_3(PO_4)_2(s)$.

- Equation de la réaction :
- Tableau d'avancement :

Équation – bilan		→		
État du système	Avancement x (en mol)	Quantités de matière (en mol)		
État initial (E.I.)				
État en cours de transformation (E.C.T.)				
État final (E.F.)				

- *Avancement maximale et réactif limitant :*

.....

.....

.....

.....

❖ Mélange stœchiométrique, un cas particulier :

Lorsque les réactifs s'épuisent tous en même temps, on dit qu'ils ont été introduits dans les proportions stœchiométriques. Dans ce cas, x_{max} a la même valeur pour les deux hypothèses.

Cela implique que :

Pour un mélange stœchiométrique, les quantités de matière à l'état final des réactifs sont nulles. Seuls les produits de la réaction sont présents à l'état final.

❖ Réaction totale et non totale

De façon implicite, on s'attend à vérifier qu'à l'état final, on aura bien atteint l'avancement maximal x_{max} mais il n'est pas toujours atteint.

✓ Si , alors la réaction est totale.

✓ Si , alors la réaction est non totale. Une réaction non totale s'arrête avant d'avoir consommé tous ses réactifs. Le reste des réactifs et les produits formés coexistent et forment un équilibre.

2/ Application aux réactions d'oxydoréduction

a/ Couple oxydant-réducteur

Un oxydant est une espèce chimique capable de

Un réducteur est espèce chimique capable de

A tout oxydant est associé un réducteur au sein d'un couple oxydant-réducteur noté

Exemple : $\text{Cu}_{(aq)}^{2+} / \text{Cu}_{(s)}$, $\text{Cu}_{(aq)}^{2+}$ est l'oxydant et $\text{Cu}_{(s)}$ est le réducteur.

b/ Demi-équation rédox

La demi-équation électronique correspond à l'écriture symbolique de l'échange électronique entre les deux espèces d'un couple rédox :

Exemple : $\text{Cu}_{(aq)}^{2+} + 2 e^- = \text{Cu}_{(s)}$

Méthode pour trouver les demi-équations rédox :Exemple du couple : $MnO_4^- (aq) / Mn^{2+} (aq)$

Mettre l'oxydant à gauche et le réducteur à droite du signe = en laissant de la place .	$MnO_4^- (aq) = Mn^{2+} (aq)$
Equilibrer les éléments communs autres que O et H :	$MnO_4^- (aq) = Mn^{2+} (aq)$
Equilibrer si nécessaire l'élément Oxygène en ajoutant des molécules d'eau H_2O .	$MnO_4^- (aq) = Mn^{2+} (aq) + 4 H_2O$
Equilibrer si nécessaire l'élément Hydrogène en ajoutant des ions $H^+ (aq)$.	$MnO_4^- (aq) + 8 H^+ (aq) = Mn^{2+} (aq) + 4 H_2O (l)$
Equilibrer les charges en ajoutant des électrons e^- .	$MnO_4^- (aq) + 8 H^+ (aq) + 5 e^- = Mn^{2+} (aq) + 4 H_2O (l)$

c/ Réaction d'oxydoréduction et son équation

Une réaction d'oxydoréduction consiste en un transfert d'électrons entre un oxydant d'un couple oxydant réducteur et un réducteur d'un autre couple oxydant réducteur.

Soit deux couples redox : Ox_1 / Red_1 et Ox_2 / Red_2 ; les deux demies équations de ces couples sont :

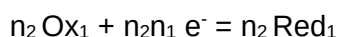
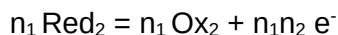
.....

Mettons l'oxydant Ox_1 du premier couple en contact avec le réducteur Red_2 du second couple, il peut alors se produire une réaction d'oxydoréduction :

demi-réaction avec l'oxydant : (les électrons sont captés)

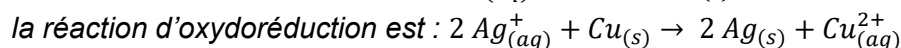
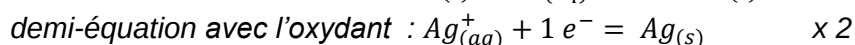
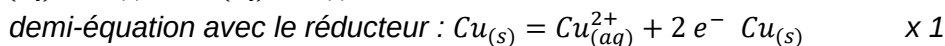
demi-réaction avec le réducteur : (les électrons sont libérés)

Pour avoir le même nombre d'électrons libérés et captés, on multiplie la première demie équation par n_2 et la seconde par n_1 , puis on les additionne :



La réaction d'oxydoréduction est :

Exemple : Réaction d'oxydoréduction entre les ions $Ag^+ (aq)$ et le cuivre $Cu_{(s)}$. Les couples oxydant réducteurs sont $Ag^+ (aq) / Ag_{(s)}$ et $Cu^{2+} (aq) / Cu_{(s)}$ (arbre de Diane)

d/ Exemple de suivi d'une réaction d'oxydoréduction

On fait réagir un volume $V_1 = 10,0 \text{ mL}$ d'une solution jaune contenant l'espèce $I_2 (aq)$ de concentration en quantité de matière $C_1 = 5,00 \cdot 10^{-2} \text{ mol.L}^{-1}$ avec un volume $V_2 = 5,00 \text{ mL}$ d'une solution incolore contenant des ions $S_2O_3^{2-} (aq)$ de concentration molaire $C_2 = 1,00 \cdot 10^{-1} \text{ mol.L}^{-1}$.

1/ Déterminer l'équation-bilan de la réaction ayant lieu (Couples rédox : $I_2 (aq) / I^- (aq)$ et $S_4O_6^{2-} (aq) / S_2O_3^{2-} (aq)$)

.....

2/ Compléter de manière littérale le tableau d'avancement ci-dessous.

Équation – bilan					
État du système	Avancement x (en mol)	Quantités de matière (en mol)			
État initial (E.I.)					
Etat en cours de transformation (E.C.T.)					
État final (E.F.)					

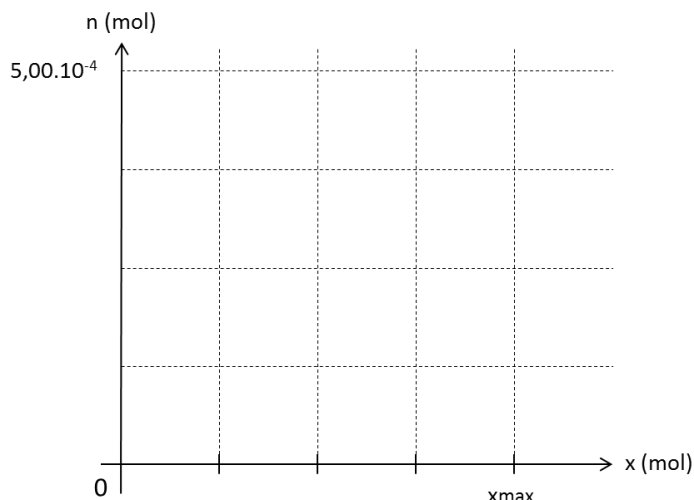
3/ Déterminer le réactif limitant de la réaction

Si $I_{2(aq)}$ est le réactif limitant alors

Si $S_2O_3^{2-}(aq)$ est le réactif limitant alors

Le réactif limitant est donc et la valeur de l'avancement maximal vaut : $x_{\max} = \dots\dots\dots$

4/ Tracer l'évolution des quantités de matière des réactifs et des produits en fonction de l'avancement x.



JE DOIS SAVOIR :

- À partir de données expérimentales, identifier le transfert d'électrons entre deux réactifs et le modéliser par des demi-équations électroniques et par une réaction d'oxydo-réduction.
- Établir une équation de la réaction entre un oxydant et un réducteur, les couples oxydant-réducteur étant donnés.
- Décrire qualitativement l'évolution des quantités de matière des espèces chimiques lors d'une transformation.
- Établir le tableau d'avancement d'une transformation chimique à partir de l'équation de la réaction et des quantités de matière initiales des espèces chimiques.
- Déterminer la composition du système dans l'état final en fonction de sa composition initiale pour une transformation considérée comme totale.
- Déterminer l'avancement final d'une réaction à partir de la description de l'état final et comparer à l'avancement maximal.
- Déterminer la composition de l'état final d'un système et l'avancement final d'une réaction.
- Capacité numérique : Déterminer la composition de l'état final d'un système siège d'une transformation chimique totale à l'aide d'un langage de programmation.
- Capacité mathématique : Utiliser une équation linéaire du premier degré.

