

Extrait du programme

Partie : Constitution et transformations de la matière.

Sous-Partie : Suivi de l'évolution d'un système, siège d'une transformation.

Chapitre : Suivi et modélisation de l'évolution d'un système chimique.

Notions et contenus	Capacités exigibles
Transformation modélisée par une réaction d'oxydoréduction : oxydant, réducteur, couple oxydant/réducteur, demi-équation électronique. Évolution des quantités de matière lors d'une transformation. État initial, notion d'avancement (mol), tableau d'avancement, état final. Avancement final, avancement maximal. Transformations totale et non totale. Mélanges stœchiométriques.	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'oxydoréduction. Établir une équation de la réaction entre un oxydant et un réducteur, les couples oxydant-réducteur étant donnés. <i>Mettre en œuvre des transformations modélisées par des réactions d'oxydo-réduction.</i> 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 l'avancement final d'une réaction à partir de la description de l'état final et comparer à l'avancement maximal. <i>Déterminer la composition de l'état final d'un système et l'avancement final d'une réaction.</i> 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.

1 Réaction d'oxydo-réduction

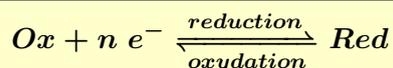
1.1 Définitions et concepts

Un **couple oxydant/réducteur** (Ox/Red) est un couple formé par deux espèces susceptibles de **se transformer l'une en l'autre par gain ou perte d'électrons**.

L'**oxydant** est l'espèce chimique capable de **gagner** un ou plusieurs électrons. Le **réducteur** est l'espèce chimique capable de **perdre** un ou plusieurs électrons.

Une **demi-équation électronique** rend compte de cet échange.

Elle s'écrit toujours sous la forme suivante :



Exemples :

couple Fe^{3+}/Fe : $Fe^{3+} + 3e^- = Fe$

couple I_2/I^- : $I_2 + 2e^- = 2I^-$

Une transformation chimique qui est modélisée par une **réaction d'oxydoréduction** met en jeu **deux couples** oxydant/réducteur.

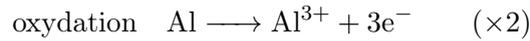
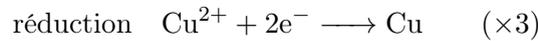
Elle fait intervenir deux demi-équations électroniques : l'une témoigne de la perte d'électrons du réducteur du 1er couple, et l'autre du gain d'électrons de l'oxydant du 2nd couple.

On obtient l'équation bilan de la transformation chimique en additionnant les deux demi-équations.



Exemple : Les ions cuivre (II) sont réduits en cuivre métallique par l'aluminium métallique qui s'oxyde alors en ions aluminium (III).

Les couples mis en jeu sont Cu^{2+}/Cu et Al^{3+}/Al .



(le sens choisi pour la demi-équation dépend de l'expérience et de la nature effective des réactifs).

Les électrons perdus par l'aluminium sont transférés aux ions cuivre, il faut donc multiplier par 3 et par 2 les demi-équations pour que le nombre d'électrons soit le même dans chaque demi-équation.

L'équation bilan de la réaction d'oxydoréduction est donc :

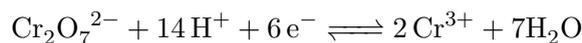
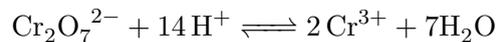
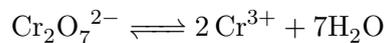
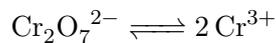


1.2 Complément : écrire une demi-équation électronique dans le cas général

La procédure est la suivante :

1. équilibrer l'élément qui subit l'oxydoréduction.
2. équilibrer l'élément oxygène avec des molécules d'eau (travail en solution aqueuse).
3. équilibrer l'élément hydrogène avec des ions H^+ (toujours présents en solution aqueuse).
4. équilibrer la charge électrique avec des électrons.

Exemple : demi-équation électronique du couple $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}/\text{Cr}^{3+}$:



2 Avancement de réaction

2.1 Principe

Suivre l'avancement d'une réaction consiste à établir un bilan de matière (connaître les quantités de chaque espèce réactif ou produit) au cours de la transformation chimique entre l'état initial du système et son état final (en passant par tous les états intermédiaires).

L'**avancement**, noté x et exprimé en **mol**, est la grandeur qui permet de suivre l'évolution des quantités de matière de chaque espèce.

Pour une transformation chimique **totale**, la réaction s'arrête lorsqu'un réactif vient à manquer : c'est le **réactif limitant**. Dans ce cas, l'avancement final x_f est égal à l'avancement maximum x_{max} .

Attention : il existe aussi des transformations **non totales** pour lesquelles l'avancement final est inférieur à l'avancement maximum : $x_f < x_{max}$.



2.2 Tableau d'avancement

Le **tableau d'avancement** est un outil permettant d'aider le suivi d'une transformation chimique. Dans ce tableau, on exprime les **quantités de matière** de chaque espèce de la réaction chimique dans l'état initial d'avancement nul $x = 0$ mol, dans un état intermédiaire d'avancement quelconque x , et dans l'état final d'avancement x_f (ou x_{max} pour une réaction totale).

Exemple : oxydation de l'aluminium métallique en milieu acide (réaction totale) :

Équation de réaction		$2\text{Al}_{(s)} + 6\text{H}^+_{(aq)} \longrightarrow 2\text{Al}^{3+}_{(aq)} + 3\text{H}_{2(g)}$			
État initial	$x = 0$	10	50	0	0
État intermédiaire	x	$10 - 2x$	$50 - 6x$	$0 + 2x$	$0 + 3x$
État final	$x = x_f = x_{max}$ $x_{max} = 5$	$10 - 2x_{max}$ $= 0$	$50 - 6x_{max}$ $= 20$	$2x_{max}$ $= 10$	$3x_{max}$ $= 15$

Problème : comment trouver la valeur de x_{max} et le réactif limitant ?

Comme les quantités de matières ne peuvent pas être négatives, il faut chercher quel est le plus petit avancement qui annule la quantité de matière d'un réactif (il faut donc résoudre des équations linéaires du 1er degré).

Dans notre exemple, on teste 2 hypothèses :

1. Si Al est le réactif limitant : $10 - 2x_{max} = 0 \Rightarrow 2x_{max} = 10 \Rightarrow x_{max} = \frac{10}{2} = 5$ mol.
2. Si H^+ est le réactif limitant : $50 - 6x_{max} = 0 \Rightarrow 6x_{max} = 50 \Rightarrow x_{max} = \frac{50}{6} = 8,3$ mol.

On retient parmi ces 2 hypothèses celle qui donne la plus petite valeur de x_{max} .

En notant n_A^i et n_B^i les quantités initiales des réactifs, et a et b leur nombre stœchiométrique, on peut écrire :

$$x_{max} = \min\left(\frac{n_A^i}{a} \text{ ou } \frac{n_B^i}{b}\right)$$

En langage Python, cela pourrait s'écrire : `x_max = min(niA/a, niB/b)`.

2.3 Cas particulier : mélange stœchiométrique

Si les réactifs sont introduits dans les proportions correspondant aux nombres stœchiométriques de la réaction, alors ils sont tous limitants et pour une réaction totale, il ne reste aucun réactif en fin de transformation : on parle dans ce **cas de mélange stœchiométrique**.

En notant n_A^i et n_B^i les quantités initiales des réactifs, et a et b leur nombre stœchiométrique, on peut écrire pour un mélange stœchiométrique :

$$x_{max} = \frac{n_A^i}{a} = \frac{n_B^i}{b}$$