



Cours

« Suivi et modélisation de l'évolution d'un système chimique »

Les compétences à acquérir...





- 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.
- Mettre en œuvre des transformations modélisées par des réactions d'oxydo-réduction. une réaction d'oxydo-réduction : oxydant, réducteur, couple oxydant-réducteur, demi-équation électronique.
- 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.
- Évolution des quantités de matière lors d'une transformation : État initial, notion d'avancement tableau d'avancement, état final.



I- Etude d'une famille de transformation chimique : les réactions d'oxydoréduction



1-Etude expérimentale entre l'élément Cuivre et l'élément Fer :

Document 1

L'élément cuivre peut se trouver ...		L'élément fer peut se trouver ...	
sous forme ionique en une solution de sulfate de cuivre $\text{Cu}^{2+} + \text{SO}_4^{2-}$	sous forme atomique dans le cas du métal cuivre Cu	sous forme atomique dans le cas du métal fer Fe	sous forme ionique en une solution de sulfate de fer $\text{Fe}^{2+} + \text{SO}_4^{2-}$
			

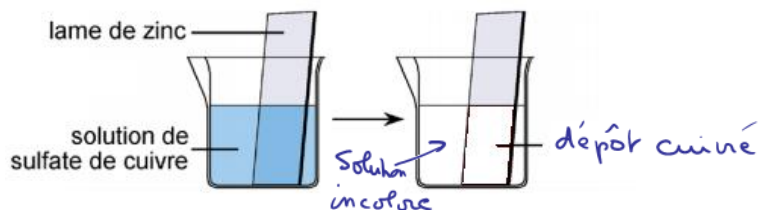
Document 2 : 2 tests d'identifications des ions Cu^{2+} et Fe^{2+}

L'ajout d'hydroxyde de sodium $\text{Na}^+ + \text{HO}^-$ entraîne, dans une solution

de sulfate de cuivre $\text{Cu}^{2+} + \text{SO}_4^{2-}$, un précipité bleu	de sulfate de fer $\text{Fe}^{2+} + \text{SO}_4^{2-}$, un précipité vert
	

Expériences :

- Introduire une lame de fer dans un bécher contenant environ 50 mL de solution de sulfate cuivre. Compléter le schéma après quelques minutes



Notez vos observations :

- La perte de coloration bleue nous montre qu'il y a eu une réaction : l'élément cuivre n'est plus sous forme ionique.
- Un dépôt "cuivré" s'est déposé sur la lame de fer.

Questionnement : Comment interpréter cette transformation chimique ?

- Que sont devenus les ions cuivre Cu^{2+} ? Ils se sont transformés en atome de cuivre...

Comment des ions Cu^{2+} peuvent-ils se transformer en atome de cuivre ? Ils doivent gagner des électrons e^- .

Compléter la « demi équation » suivante

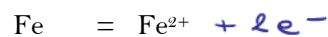


- Quels sont les ions présents, maintenant dans la solution ? Un test dans un tube à essais s'impose !

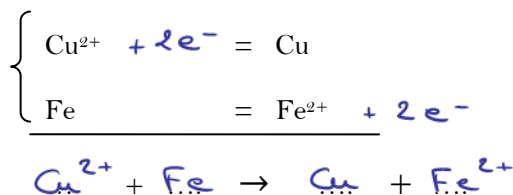
Un ajout d'hydroxyde de sodium ($\text{Na}^+ + \text{HO}^-$) permet d'obtenir un précipité noir mettant en évidence les ions Fe^{2+} .

Comment des atomes Fe peuvent-ils se transformer en ions Fe^{2+} ? Les atomes de fer perdent 2 électrons.

Compléter la « demi équation » suivante



Conclusion :



Lors de cette transformation, 2 électrons ont été échangés entre les ions Cu^{2+} et les atomes de Fe.

Cette transformation fait partie des réactions d'oxydoréduction

Remarque : Dans cette équation bilan de la réaction, on a bien un dépôt de cuivre et l'apparition d'ion fer II dans la solution.

2- Couple oxydant/réducteur :

Un **oxydant** est une espèce chimique susceptible de capter un ou plusieurs électrons.



Si un oxydant capte des électrons, il se transforme en réducteur : on dit qu'il subit une réduction

Dans la réaction précédente, Cu^{2+} est l'oxydant

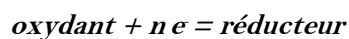
Un **réducteur** est une espèce chimique susceptible de céder un ou plusieurs électrons.



Si un réducteur cède des électrons, il se transforme en oxydant : on dit qu'il subit une oxydation

Dans la réaction précédente, Fe est le réducteur.

Un **couple oxydant / réducteur** noté (Ox / Red) est constitué par un oxydant et un réducteur conjugués qui peuvent échanger des électrons suivant la demi-équation d'oxydoréduction :



Cette demi-équation est une écriture formelle car elle ne représente pas une transformation chimique réelle.

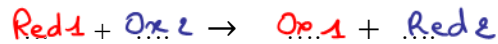
Dans la réaction précédente, les couples mis en jeu sont $\text{Cu}^{2+} / \text{Cu}$ et $\text{Fe}^{2+} / \text{Fe}$.

On écrit toujours l'oxydant en premier.

3- Réaction d'oxydoréduction

Une réaction d'oxydoréduction met en jeu un **transfert d'électrons** entre deux couples oxydant / réducteur.

Le **réducteur du couple 1** oxydant / réducteur (Ox1 / Red 1) **cède** des électrons à l'oxydant du couple 2 (Ox2 / Red 2).



Dans la réaction précédente,

le réducteur Fe du couple $\text{Fe}^{2+} / \text{Fe}$ cède 2 électrons à l'oxydant Cu^{2+} au couple $\text{Cu}^{2+} / \text{Cu}$

4- Pour écrire le bilan de la réaction d'oxydoréduction, vous devez :

Pour équilibrer les 2 demi-équations d'oxydoréduction :

- Ecrire les 2 demi-équations d'oxydoréduction en écrivant à gauche les 2 réactifs (un oxydant et un réducteur)
- Vérifier la conservation des éléments autres que O et H en ajoutant des coefficients stoechiométriques
 - Vérifier la conservation de l'élément O grâce à l'ajout éventuel de molécules d'eau H_2O .
 - Vérifier la conservation de l'élément H grâce à l'ajout éventuel de protons $\text{H}^+_{(\text{aq})}$.
- Assurer la conservation de la charge électrique grâce à l'ajout d'électrons e^- .

Pour écrire l'équation bilan de la réaction d'oxydoréduction :

- Multiplier les demi-équations d'oxydoréduction pour qu'elles aient le même nombre d'électrons.
- Ajouter membre à membre et simplifier, éventuellement, ce bilan, en supprimant les molécules d'eau et les protons excédentaires.

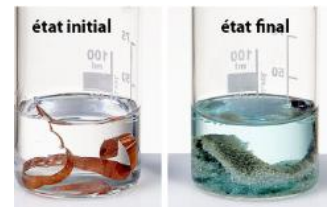
En aucun cas, des électrons ne doivent apparaître dans le bilan.

Vérifier que tous les éléments sont équilibrés ainsi que toutes les charges.

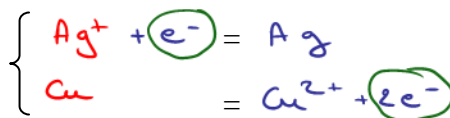
Un exemple simple :

La réaction entre les ions argent Ag^+ en solution et le cuivre à l'état solide Cu met en jeu les couples Ag^+ / Ag et $\text{Cu}^{2+} / \text{Cu}$

L'oxydant qui réagit est ici Ag^+
Le réducteur qui réagit est ici Cu



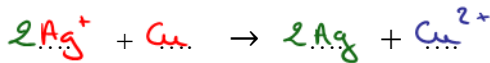
les 2 demi-équations d'oxydoréduction



$\times 2$
 $\times \dots$

En faisant la somme les e^- "disparaissent"

l'équation bilan de la réaction d'oxydoréduction

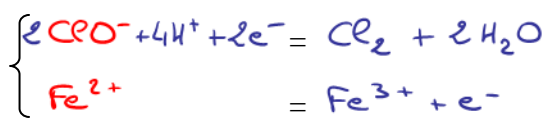


Un exemple plus complexe :

La réaction entre les ions fer II Fe^{2+} en solution et les ions hypochlorite ClO^- met en jeu les couples $\text{Fe}^{3+} / \text{Fe}^{2+}$ et $\text{ClO}^- / \text{Cl}_2$

L'oxydant qui réagit est ici ClO^-
Le réducteur qui réagit est ici Fe^{2+}

les 2 demi-équations d'oxydoréduction



$\times \dots$
 $\times 2$

l'équation bilan de la réaction d'oxydoréduction



II- Comment suivre l'évolution d'un système chimique ?

1- Le principe :

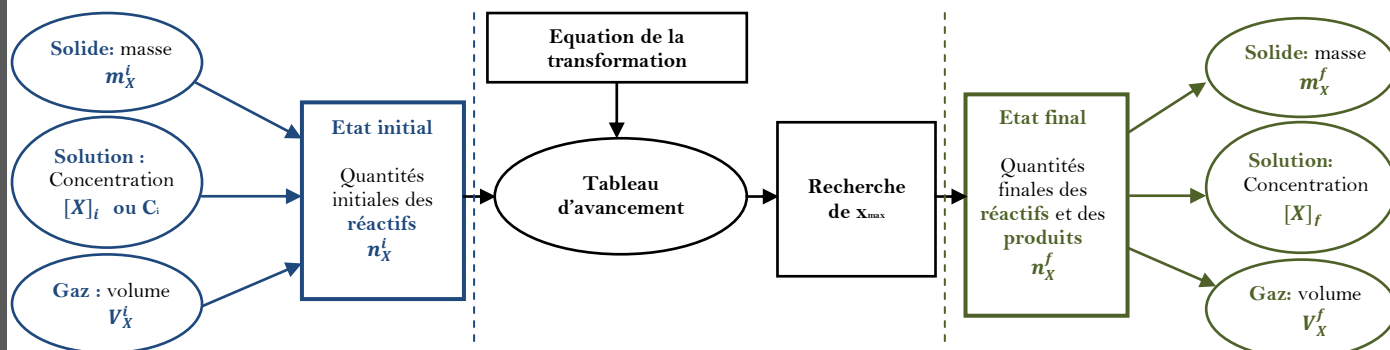
Lors d'une transformation chimique, un système chimique évolue entre son état initial et son état final.

L'évolution d'une telle transformation chimique est suivie à l'aide d'un **tableau d'avancement**, où figure la quantité de matière des réactifs et des produits au fur et à mesure de la transformation.

L'évolution du système est caractérisée par l'**avancement x** de la réaction, qui s'exprime en **mole**.

A l'état final, l'avancement final est noté x_f .

Système chimique :
ensemble d'espèces chimiques susceptibles de réagir entre elles.



2- La méthode :

- A partir des données du texte, les quantités initiales des réactifs sont calculées (les quantités des produits étant nulles)

réactif solide	réactif en solution	réactif gazeux
$n_{\text{réactif}}^i = \frac{m_{\text{réactif}}^i}{M_{\text{réactif}}}$	$C = [X]_i = \frac{n_X^i}{V_{\text{sol}}}$	$n_X^i = \frac{V_X}{V_m}$

- A partir des données du texte, écrire et équilibrer l'équation de la transformation
- Ecrire le tableau d'avancement de la transformation en introduisant

l'avancement de la transformation x

$x = 0$ à l'état initial

x au cours de la transformation

$x = x_f$ à l'état final

$x_f = x_{\text{max}}$ si la réaction est **totale**.

$x_f < x_{\text{max}}$ si la réaction **limitée**.....
(on ne sait pas faire pour l'instant !)

Remarque : x_f est l'avancement final à la fin de la réaction
 x_{max} est l'avancement maximal à la fin de la réaction

- Recherche de la valeur x_f : Si la réaction est totale alors la réaction s'arrête lorsque, au moins, une quantité d'un réactif est **nulle**.
- Une fois la valeur de $x_f = x_{\text{max}}$ connue, il est possible de calculer toutes les quantités des réactifs et des produits à l'état final.
- Pour conclure : les masses, les concentrations ou les volumes des réactifs ou des produits peuvent être calculés

Exemple : Voir

Activité expérimentale 3 « Etude d'une transformation chimique entre le diiode I_2 et les ions thiosulfate $S_2O_3^{2-}$ »

3- Avancement final x_f et avancement maximal x_{max} :

Une transformation totale est une transformation chimique qui s'arrête du fait de la consommation totale d'au moins d'un des ses réactifs n^f (réactif) = 0

- Le réactif responsable de l'arrêt de la réaction est appelé **réactif limitant**. n^f (réactif-limitant) = 0
L'autre réactif est appelé **réactif en excès** si n^f (réactif-excès) $\neq 0$.

- L'avancement final x_f atteint sa valeur maximale donc $x_f = x_{max}$

Cas particulier où les quantités des réactifs à l'état final sont **nulles**. n^f (réactifs) = 0

Le mélange réactionnel est un mélange dit stoechiométrique.

Les réactifs ont été introduits dans les proportions stoechiométriques

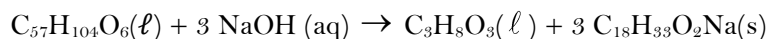
Une transformation non totale est une transformation qui s'arrête alors qu'aucun des réactifs n'a été entièrement consommé : n^f (réactifs) $\neq 0$.

- L'avancement final x_f n'atteint pas sa valeur maximale donc noté $x_f < x_{max}$

4- Exemple d'étude d'une transformation chimique : Synthèse d'un savon de formule brute $C_{18}H_{33}O_2Na$.

Dans un ballon on introduit un volume $V_{ol} = 200,0$ mL d'oléine de formule brute $C_{57}H_{104}O_6$ et de masse volumique $\rho_{ol} = 880$ g/L, un volume $V_1 = 20,0$ mL d'une solution d'hydroxyde de sodium ($NaOH(aq)$) de concentration molaire $C = 10,0$ mol.L⁻¹ et quelques grains de pierre ponce. On chauffe à reflux pendant 30 minutes.

La réaction est totale et l'équation de la réaction s'écrit :



Masses molaires $M_C = 12,0$ g/mol - $M_H = 1,00$ g/mol - $M_O = 16,0$ g/mol $M_N = 14,0$ g/mol - $M_{Na} = 23,0$ g/mol

Calcul des quantités initiales à partir des données

Calculez la masse initiale m_{ol}^i introduite d'oléine	Calcul de la quantité n_{ol}^i initiale d'oléine introduite dans le ballon
$\rho_{ol} = \frac{m_{ol}^i}{V_{ol}}$ $\Rightarrow m_{ol}^i = \rho_{ol} \times V_{ol} = 880 \times 200 \cdot 10^{-3}$ $= 176 \text{ g}$	$m_{ol}^i = \frac{m_{ol}^i}{M_{ol}}$ $= \frac{176}{884} = 0,199 \text{ mol}$
Calcul de la masse molaire M_{ol}	Calcul de la quantité initiale n_{NaOH}^i d'hydroxyde de sodium
$M_{ol} = 57M_C + 104M_H + 6M_O$ $= 57 \times 12,0 + 104 \times 1,00 + 6 \times 16,0$ $= 884 \text{ g/mol}$	$C = \frac{n_{NaOH}^i}{V_1}$ $\Rightarrow n_{NaOH}^i = C \times V_1$ $= 10 \times 20 \cdot 10^{-3} = 0,20 \text{ mol}$

Complétez le tableau d'avancement pour cette transformation chimique fourni en annexe.

Équation de la transformation		$C_{57}H_{104}O_6(\ell) + 3 NaOH(aq) \rightarrow C_3H_8O_3(\ell) + 3 C_{18}H_{33}O_2Na(s)$			
Etat Initial (mol)	$x = 0$	m_{ol}^i	m_{NaOH}^i	—	—
en cours	x	$m_{ol} = m_{ol}^i - x$	$m_{NaOH} = m_{NaOH}^i - 3x$	$m_{C_3H_8O_3} = x$	$m_{sav} = 3x$
Etat Final (mol)	$x_f = x_{max}$	$m_{ol}^f = m_{ol}^i - x_{max}$	$m_{NaOH}^f = m_{NaOH}^i - 3x_{max}$	$m_{C_3H_8O_3}^f = x_{max}$	$m_{sav}^f = 3x_{max}$

La réaction étant totale, l'état final est obtenu lorsque l'un au moins des réactifs est épuisé. $n^f(\dots) = 0 \text{ mol}$
 L'état final est obtenu lorsque l'un au moins des réactifs est épuisé. $n^f(\dots) = 0 \text{ mol}$

Recherche de x_{\max}

$$\text{et/ou} \begin{cases} n^f(\text{oe} \dots) = m_{\text{oe}}^i - x_{\max} = 0 \\ n^f(\text{NaOH} \dots) = m_{\text{NaOH}}^i - 3x_{\max} = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x_{\max} = m_{\text{oe}}^i \\ x_{\max} = \frac{m_{\text{NaOH}}^i}{3} \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x_{\max} = 0,199 \text{ mol} \\ x_{\max} = \frac{0,20}{3} = 0,067 \text{ mol} \end{cases}$$

La transformation s'arrêtera (état final) lorsque l'avancement x aura atteint la valeur $x_f = x_{\max} = 0,067 \text{ mol}$

Le réactif limitant est NaOH

Le réactif en excès est oléine (oe)

D'après votre tableau d'avancement, **déterminez l'état final**, c'est-à-dire les quantités finales des réactifs et de produits.

- $m_{\text{NaOH}}^f = m_{\text{NaOH}}^i - 3x_{\max} = 0,20 - 3 \times 0,067 = 0 \text{ mol}$. On le savait car NaOH est le réactif limitant
- $m_{\text{oe}}^f = m_{\text{oe}}^i - x_{\max} = 0,199 - 0,067 = 0,132 \text{ mol}$
- $m_{\text{C}_{18}\text{H}_{33}\text{O}_2}^f = x_{\max} = 0,067 \text{ mol}$
- $m_{\text{sav}}^f = 3x_{\max} = 3 \times 0,067 = 0,20 \text{ mol}$

Calculez la masse m_{sav}^f de savon ainsi obtenue.

Calcul de la masse molaire du savon $\text{C}_{18}\text{H}_{33}\text{O}_2\text{Na}$

$$\begin{aligned} M_{\text{sav}} &= 18M_{\text{C}} + 33M_{\text{H}} + 2M_{\text{O}} + M_{\text{Na}} \\ &= 18 \times 12,0 + 33 \times 1,00 + 2 \times 16,0 + 23,0 \\ &= 304 \text{ g/mol} \end{aligned}$$

Calcul de la masse m_{sav}^f

$$\begin{aligned} m_{\text{sav}}^f &= \frac{m_{\text{sav}}^f}{M_{\text{sav}}} \\ \Rightarrow m_{\text{sav}}^f &= n_{\text{sav}}^f \times M_{\text{sav}} \\ &= 0,20 \times 304 \\ &= 60,8 \text{ g} \end{aligned}$$