

## Chapitre 04 – Modélisation d'une transformation – Avancement

DANS ce chapitre, nous reprenons la voie de la chimie. Le programme de seconde a permis d'expliquer de quoi sont constituées les molécules, en partant de l'infiniment petit. De la structure de l'atome, en passant par les ions puis les liaisons covalentes, l'échelle de la molécule a été décrite.

A présent, il est question de comprendre comment ces molécules peuvent interagir entre elles pour former d'autres molécules. C'est le principe de la **transformation (ou réaction) chimique**. Nous insisterons sur l'aspect quantitatif du suivi d'une réaction chimique grâce à la notion de **tableau d'avancement**.

### 1.1 Rappels sur la transformation chimique

#### 1.1.1 Définition

Une transformation chimique traduit la formation d'une ou plusieurs nouvelles molécules (appelée(s) **produit(s)**) à partir d'une ou plusieurs molécules de départ (appelée(s) **réactif(s)**). En d'autres termes, il y a création ou rupture d'une ou plusieurs liaisons au sein des molécules, favorisant un réarrangement des atomes. Il peut y avoir **substitution** (c'est-à-dire l'échange d'un atome ou d'un groupement d'atome entre deux molécules), **addition** (deux molécules ou plus se lient pour n'en former plus qu'une) ou **élimination** (une molécule se brise en deux morceaux ou plus).

Une réaction chimique s'écrit en plaçant les réactifs à gauche, puis une flèche (simple ou double) puis les produits à droite. La notion de simple ou double flèche indique si la réaction est totale ou non (voir plus loin).



#### 1.1.2 Equilibrer une réaction chimique

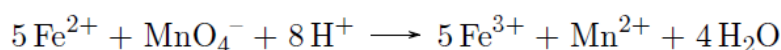
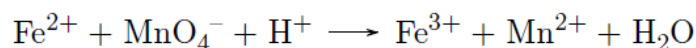
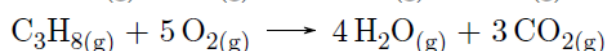
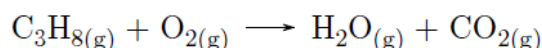
##### Conservation de la masse et de la charge

Lors d'une réaction chimique, il y a **conservation de la masse et de la charge**

Les atomes présents initialement dans les réactifs sont toujours présents dans les produits, même s'ils sont arrangés autrement. De même, la charge globale initiale des réactifs doit être la même que la charge globale des produits.

Pour équilibrer une équation bilan, on utilise des **coefficients stoechiométriques**.

Exemples :



## 1.2 Suivi d'une transformation chimique : approche théorique

### 1.2.1 Avancement d'une réaction chimique

Pour suivre l'évolution d'une transformation chimique, il faut suivre l'évolution des quantités de matière des espèces chimiques présentes. On définit en premier lieu l'**Etat initial (E.I)**, qui correspond aux quantités de matière des réactifs présents initialement, à l'instant  $t = 0$ . Ensuite, pendant la réaction, la quantité de matière des réactifs diminue au cours du temps, à mesure que celle des produits augmente. On considère que la réaction est terminée lorsque les quantités de matière des espèces présentes cessent d'évoluer. On atteint alors l'**Etat final (E.F)**.

Afin de quantifier comment les quantités de matières évoluent entre l'état initial et l'état final, on définit l'**avancement** de la réaction  $x$ , exprimé en mol.

#### Avancement d'une réaction chimique

$$x(t) = \frac{n_i(t) - n_i^{(0)}}{\nu_i} \iff n_i(t) = n_i^{(0)} - \nu_i x(t)$$

Avec :

$x(t)$  l'avancement de la réaction (en mol)

$n_i(t)$  la quantité de matière (en mol) de l'espèce  $i$  au cours du temps  $t$

$n_i^{(0)}$  la quantité de matière initiale de l'espèce  $i$  (en mol)

$\nu_i$  le coefficient stoechiométrique de l'espèce  $i$  dans l'équation bilan

### 1.2.2 Réaction totale ou équilibrée

On appelle **réaction totale** une réaction chimique qui ne s'arrête que lorsque l'un au moins des réactifs a été entièrement consommé. A l'inverse, il se peut que la réaction s'arrête alors même qu'il reste des réactifs, on dit alors que la réaction est **équilibrée**, c'est-à-dire qu'elle atteint un état d'équilibre dans lequel les quantités de matière des espèces chimiques présentes n'évoluent plus. Lorsque l'état final est atteint, on a donc l'**avancement final** de la réaction  $x_f$ . Dans le cas où la réaction est totale, on dit qu'on a atteint l'**avancement maximal** et alors  $x_f = x_{max}$ .

### 1.2.3 Réactif limitant, en excès, proportions stoechiométriques

Lorsqu'une réaction est totale, c'est qu'il y a au moins un des réactifs qui est entièrement consommé, et que donc la réaction est forcée de s'arrêter. A ce moment là, on appelle **réactif(s) limitant(s)** le ou les réactifs qui sont entièrement consommés, et **réactif en excès** celui ou ceux sont encore présents en quantité non négligeable dans l'état final.

Parfois, lorsque tous les réactifs ont été introduits dans des proportions telles qu'ils se retrouvent tous entièrement consommés au même instant, on dit alors que la réaction était dans les **proportions stoechiométriques**.

### 1.2.4 Tableau d'avancement

Afin de suivre la réaction chimique, on dresse ce que l'on appelle le **tableau d'avancement**. C'est un tableau qui remplace l'équation bilan de la réaction étudiée, et dans lequel on inscrit les quantités de matières des réactifs et des produits, entre l'état initial et l'état final, en fonction de l'avancement  $x$ . Si le solvant apparaît dans la réaction chimique, il n'est pas nécessaire de préciser l'évolution de sa quantité de matière car il est nécessairement en large excès puisqu'il s'agit du solvant.

### Tableau d'avancement d'une réaction chimique

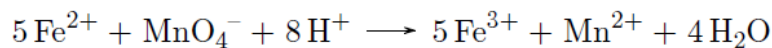
Soit la réaction totale entre deux réactifs  $A$  et  $B$ , donnant comme produits  $C$  et  $D$ , où  $A$ ,  $B$ ,  $C$ , et  $D$  sont quatre espèces chimiques quelconques. On peut alors dresser le tableau d'avancement suivant :

Equation de la réaction		$a A$	$+$	$b B$	$\longrightarrow$	$c C$	$+$	$d D$
		Quantités de matière en mol						
Etat Initial (E.I)	$x = 0$	$n_A^{(0)}$		$n_B^{(0)}$		0		0
Etat Final (E.F)	$x = x_f$	$n_A^{(f)} = n_A^{(0)} - ax_f$		$n_B^{(f)} = n_B^{(0)} - bx_f$		$cx_f$		$dx_f$

#### 1.2.5 Exemple d'application

Les ions permanganates  $\text{MnO}_4^-$  et les ions Fer (II)  $\text{Fe}^{2+}$  réagissent en milieu acide pour former des ions Fer (III)  $\text{Fe}^{3+}$ . Dans un bécher, on introduit  $V_1 = 10,0 \text{ mL}$  de solution de sulfate de Fer II de concentration  $C_1 = 0,055 \text{ mol.L}^{-1}$  et  $V = 5,0 \text{ mL}$  d'acide sulfurique de concentration en ions  $\text{H}^+$   $C = 0,50 \text{ mol.L}^{-1}$ . On ajoute  $V_2 = 4,0 \text{ mL}$  de solution de permanganate de potassium de concentration  $C_2 = 0,025 \text{ mol.L}^{-1}$ . Le mélange est incolore.

Equation bilan de la réaction :



Bilan de matière à l'état initial :

$$\begin{aligned} n_0(\text{Fe}^{2+}) &= n_1 = C_1 V_1 = 0,055 \times 10,0 \cdot 10^{-3} = 5,5 \cdot 10^{-4} \text{ mol} \\ n_0(\text{MnO}_4^-) &= n_2 = C_2 V_2 = 0,025 \times 4,0 \cdot 10^{-3} = 1,0 \cdot 10^{-4} \text{ mol} \\ n_0(\text{H}^+) &= n = C V = 0,50 \times 5,0 \cdot 10^{-3} = 2,5 \cdot 10^{-3} \text{ mol} \end{aligned}$$

Tableau d'avancement :

	$5 \text{Fe}^{2+}$	$+$	$\text{MnO}_4^-$	$+$	$8 \text{H}^+$	$\longrightarrow$	$5 \text{Fe}^{3+}$	$+$	$\text{Mn}^{2+}$	$+$	$4 \text{H}_2\text{O}$
(E.I)	$n_1$		$n_2$		$n$		0		0		excès
(E.F)	$n_1 - 5x_{\max}$		$n_2 - x_{\max}$		$n - 8x_{\max}$		$5x_{\max}$		$x_{\max}$		excès

Recherche du réactif limitant :

Pour chercher le ou les réactifs limitants, on suppose que l'un ou l'autre des réactifs est limitant, et on garde celui qui donne la plus petite valeur de  $x_{\max}$  :

$$\begin{array}{lll} n_1 - 5x_{\max} = 0 & n_2 - x_{\max} = 0 & n - 8x_{\max} = 0 \\ x_{\max} = \frac{n_1}{5} & x_{\max} = n_2 & x_{\max} = \frac{n}{8} \\ x_{\max} = 1,1 \cdot 10^{-4} \text{ mol} & x_{\max} = 1,0 \cdot 10^{-4} \text{ mol} & x_{\max} = 3,1 \cdot 10^{-4} \text{ mol} \end{array}$$

Donc le réactif limitant est  $\text{MnO}_4^-$  et  $x_{\max} = 1,0 \cdot 10^{-4} \text{ mol}$ .

### Bilan de matière à l'état final :

$$n_f(\text{Fe}^{2+}) = n_1 - 5 x_{\max} = 5,5 \cdot 10^{-4} - 5 \times 1 \cdot 10^{-4} = 5 \cdot 10^{-5} \text{ mol}$$

$$n_f(\text{MnO}_4^-) = n_2 - x_{\max} = 0 \text{ mol}$$

$$n_f(\text{H}^+) = n - 8 x_{\max} = 2,5 \cdot 10^{-3} - 8 \times 1 \cdot 10^{-4} = 1,7 \cdot 10^{-3} \text{ mol}$$

$$n_f(\text{Fe}^{3+}) = 5 x_{\max} = 5 \times 1,0 \cdot 10^{-4} = 5,0 \cdot 10^{-4} \text{ mol}$$

$$n_f(\text{Mn}^{2+}) = x_{\max} = 1,0 \cdot 10^{-4} \text{ mol}$$

## 1.3 Suivi d'une transformation chimique : approche expérimentale

Dans la section précédente, il est expliqué le principe du tableau d'avancement qui permet de suivre le bilan de quantité de matière des espèces présentes au cours d'une transformation chimique. On peut ainsi prévoir et suivre l'évolution des quantités de matières de ces espèces, entre l'état initial et l'état final. Mais qu'en est-il dans la pratique ? Prenons l'exemple d'une réaction se produisant dans une solution transparente initialement, et également transparente dans l'état final. Visuellement, rien ne nous permet de **suivre** la transformation puisque nous ne mesurons aucun paramètre qui rend compte de la consommation des réactifs et/ou de la formation des produits.

Pour suivre l'avancement d'une réaction chimique d'un point de vue expérimental, il faut donc pouvoir **observer, mesurer** un paramètre de réaction qui témoigne du fait que les quantités de matières des espèces en solution ont changé. Plusieurs méthodes expérimentales sont envisageables, dont les quatre propositions suivantes :

- Suivi spectrophotométrique (cf. Chapitre 5)
- Suivi pH-métrie (cf. *Programme Terminale*)
- Suivi colorimétrique (cf. Chapitre 5)
- Suivi conductimétrique (cf. *Programme Terminale*)