

Semaine 4

Evolution d'un système chimique

*Il s'agit d'un chapitre de chimie **central au lycée**. Sa **maitrise parfaite** est indispensable pour traiter une grande partie des sujets de bac en chimie.*

Etude qualitative de l'évolution des quantités de matière

Etat du système chimique

Un **système chimique** est l'ensemble des espèces chimiques susceptibles de réagir entre elles.

Un **état du système** peut être caractérisé :

- par les grandeurs physiques que sont la température et la pression ;
- par sa nature (états solide, liquide ou gazeux) ;
- par les **quantités de matière des espèces chimiques** qui constituent ce système. C'est ce qui nous intéresse dans la suite de ce cours.

Avant la transformation chimique, le système se trouve à l'**état initial**.

Après la transformation chimique, le système se trouve à l'**état final**. L'état final est atteint lorsque l'évolution du système chimique cesse, c'est-à-dire **lorsque les quantités de matières des espèces chimiques deviennent constantes dans le temps**.

Evolutions des quantités de matière des réactifs et des produits

Entre l'état initial et l'état final, **la quantité de matière des réactifs diminue et la quantité de matière des produits augmente**.

3 cas peuvent se présenter :

- **La réaction est totale et tous les réactifs disparaissent** car ils sont introduits dans les proportions stœchiométriques. A l'**état final** la quantité de matière de tous les réactifs est nulle, **le système chimique est uniquement constitué par les produits formés**.
- **La réaction est totale mais il y a un réactif limitant**. Celui-ci disparaît totalement et sa quantité de matière est nulle. Il reste les réactifs en excès. **A l'état final, le système chimique est constitué des réactifs en excès et des produits formés**.
- **La réaction n'est pas totale, il y a un équilibre**. **A l'état final, le système chimique est composé des réactifs**, dont les quantités de matière ont diminué, et **des produits formés**.

Rappel des notions de proportions stœchiométriques, réactif limitant, réactif en excès

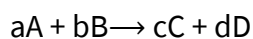
Si lors d'une transformation chimique totale, tous les réactifs ont été consommés et qu'il ne reste à l'état final que les produits en quantité prévue par l'équation – bilan, alors on dit que les réactifs ont été introduits dans des **proportions stœchiométriques**.

Lorsque le mélange des réactifs n'est pas stœchiométrique, un réactif au moins demeure présent à la fin de la réaction, alors que l'autre a été totalement consommé. C'est lorsque ce dernier a disparu que la réaction s'arrête.

Il constitue le **réactif limitant** ; les autres réactifs encore présents sont dits **en excès**.

Exemple :

Soit une équation – bilan générale du type :



Les réactifs A et B ont été introduits dans **des proportions stœchiométriques** si :

$$\frac{n(A)}{a} = \frac{n(B)}{b} \text{ où } n(A) \text{ et } n(B) \text{ représentent les quantités de matière de A et B.}$$

Dans un cas où le **réactif limitant** est A par exemple alors on a : $\frac{n(A)}{a} < \frac{n(B)}{b}$.

Etude qualitative de l'évolution des quantités de matière

L'avancement d'une réaction

Afin de suivre l'avancement d'une réaction, on définit la grandeur x , **avancement de la réaction**, comme la quantité de matière consommée à tout instant t pour un réactif dont le coefficient stœchiométrique est 1.

x s'exprime en **mol**.

A l'état initial, $x = 0$

Pour une équation du type : $a A + b B \rightarrow c C + d D$, à tout instant on peut écrire la quantité de matière des réactifs et des produits sous la forme :

$$\text{Pour les réactifs : } n_A = n_{A_{\text{initial}}} - ax \text{ et } n_B = n_{B_{\text{initial}}} - bx$$

$$\text{Pour les produits : } n_C = cx \text{ et } n_D = dx$$

Le tableau d'avancement

Le tableau d'avancement est un outil utilisé pour connaître **la composition d'un système chimique à chaque instant** et pour prévoir la **composition finale de ce système**.

Tableau d'avancement de la réaction : $aA + bB \rightarrow cC + dD$

Etat du système	Avancement (mol)	$aA + bB \rightarrow cC + dD$			
Etat initial	0	n_{0A}	n_{0B}	0	0
Etat intermédiaire	x	$n_{0A} - ax$	$n_{0B} - bx$	cx	dx
Etat final	x_{max}	$n_{0A} - ax_{max}$	$n_{0B} - bx_{max}$	cx_{max}	dx_{max}

x_{max} représente la valeur maximale de l'avancement correspondant à la fin de la réaction.

Réaction totale / réaction non totale

Pour une réaction totale, x_{max} correspond à une consommation totale de l'un des réactifs, c'est le réactif limitant.

En reprenant l'exemple ci-dessus :

On atteint x_{max} lorsque :

- soit : $n_{0A} - ax_{max}(A) = 0$

- soit : $n_{0B} - bx_{max}(B) = 0$

$$x_{max} = \min(x_{max}(X))$$

Si $x_{max}(A) < x_{max}(B)$, alors A est le réactif limitant de la réaction.

Pour une réaction non totale, on ne peut pas déterminer l'état final de la réaction avec les connaissances exigées au lycée. Pour le déterminer par le calcul il faut faire appel à la notion de constante d'équilibre (hors programme).

Cependant par un dosage des espèces présentes en fin de réaction, il est possible d'en déduire x_{max} .

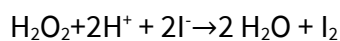
Exemple

On fait réagir des ions iodure (I^-) avec du peroxyde d'hydrogène (H_2O_2).

On connaît les quantités de matière initiales : $n_0(I^-) = 4 \cdot 10^{-4}$ mol et $n_0(H_2O_2) = 3 \cdot 10^{-4}$ mol.

La réaction est totale. Donner les quantités de matière des espèces présentes dans le système chimique à l'état final.

Equation bilan de la réaction :



On fait un tableau d'avancement de la réaction :

Etat du système	Avancement (mol)	$\text{H}_2\text{O}_2 + 2\text{H}^+ + 2\text{I}^- \rightarrow 2\text{H}_2\text{O} + \text{I}_2$				
Etat initial	0	$n_0(\text{H}_2\text{O}_2)$	excès	$n_0(\text{I}^-)$	excès	0
Etat intermédiaire	x	$n_0(\text{H}_2\text{O}_2) - x$	excès	$n_0(\text{I}^-) - 2x$	excès	x
Etat final	x_{max}	$n_0(\text{H}_2\text{O}_2) - x_{max}$	excès	$n_0(\text{I}^-) - 2x_{max}$	excès	x_{max}

La réaction étant dans une solution aqueuse, les ions H^+ et l'eau H_2O sont en excès.

Détermination de x_{max} :

Si H_2O_2 est limitant alors : $n_0(\text{H}_2\text{O}_2) - x_{max} = 0 \Leftrightarrow x_{max} = 3 \cdot 10^{-4} \text{ mol}$

Si I^- est limitant alors : $n_0(\text{I}^-) - 2x_{max} = 0 \Leftrightarrow x_{max} = 2 \cdot 10^{-4} \text{ mol}$

La plus petite valeur de x_{max} est obtenue pour I^- , c'est le réactif limitant.

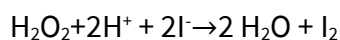
On retient donc $x_{max} = 2 \cdot 10^{-4} \text{ mol}$

Etat final : le système chimique est composé de :

- $n_f(\text{H}_2\text{O}_2) = 3 \cdot 10^{-4} - 2 \cdot 10^{-4} = 10^{-4} \text{ mol}$
- $n_f(\text{I}_2) = 2 \cdot 10^{-4} \text{ mol}$
- des ions H^+ et de l'eau en excès.

Modélisation de l'évolution des quantités de matière avec le langage de programmation Python

On reprend l'exemple précédent de la réaction entre les ions iodure (I^-) et le peroxyde d'hydrogène (H_2O_2).



Le programme suivant permet de :

- visualiser l'évolution des quantités de matière dans le système chimique sur un graphique ;
- déterminer l'état final du système chimique.

Le « cœur » du programme se situe entre les lignes 29 et 35 : on calcule les quantités de matière à chaque augmentation de l'avancement de 0,01 mmol, tant que l'avancement reste inférieur ou égale à x_{max} . Les quantités de matière sont ensuite insérées dans les listes correspondantes pour tracer le graphique.

Plus on augmente le pas de l'avancement (ici 0,01 mmol), et moins il y aura de valeurs calculées pour les quantités de matière des espèces présentes.

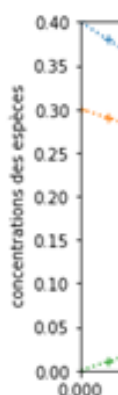
Exécution du programme dans l'outil Spyder :

A l'état :
xmax = 0.2

```

7 import matplotlib.pyplot as plt
8 #On saisit les quantités de matière initiales en mmol
9 ni_I=0.4
10 ni_H2O2=0.3
11 ni_I2=0
12 #on saisit les coefficients stoechiométriques de la réaction
13 cI=2
14 cH2O2=1
15 cI2=1
16
17 #On détermine xmax
18 xmax_I=ni_I/2
19 xmax_H2O2=ni_H2O2
20 x_max=min(xmax_I,xmax_H2O2)
21
22 #On crée les listes de valeurs des quantités de matière et de l'avancement
23 n_I=[ni_I]
24 n_H2O2=[ni_H2O2]
25 n_I2=[ni_I2]
26 avancement=[0]
27
28 #On remplit les listes de valeurs
29 x=0
30 while avancement[-1]<=x_max:
31     x=x+0.01
32     n_I.append(ni_I-cI*x)
33     n_H2O2.append(ni_H2O2-cH2O2*x)
34     n_I2.append(ni_I2+cI2*x)
35     avancement.append(x)
36
37 #On crée le graphique
38 plt.axis([0,x_max,0,max(ni_I,ni_H2O2,n_I2[-1])])
39 plt.xlabel(" avancement x")
40 plt.ylabel(" concentrations des espèces")
41
42 plt.plot(avancement,n_I,'+',label="nI")
43 plt.plot(avancement,n_H2O2,'+',label="n_H2O2")
44 plt.plot(avancement,n_I2,'+',label="n_I2")
45 plt.legend()
46 plt.title("Evolution des quantités de matière")
47
48 #On affiche l'état final du système chimique
49 nf_I=round(n_I[-1],2)
50 nf_H2O2=round(n_H2O2[-1],2)
51 nf_I2=round(n_I2[-1],2)
52 print("A l'état final : nf_I=",nf_I,"mmol ,nf_H2O2=",nf_H2O2,"mmol ,nf_I2=",nf_I2,"mmol")
53 print("xmax=",x_max,'mmol')
54

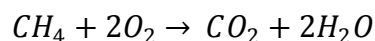
```



Exercices non à soumettre

Exercice 10

On considère la réaction de combustion complète du méthane :



La réaction a lieu en utilisant 0,48 g de méthane et 0,64 g de dioxygène. C'est une réaction totale.

1. Calculer les quantités de matière des réactifs à l'état initial.
2. Déterminer les quantités de matière des espèces en fin de réaction en dressant un tableau d'avancement.

Données

- $M(CH_4) = 16 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$
- $M(O_2) = 32 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$

Exercice 11

On étudie l'attaque du fer métal par l'acide chlorhydrique. Il s'agit d'une réaction d'oxydation du fer Fe par l'acide H⁺ mettant en jeu les couples redox : Fe²⁺/Fe et H⁺/H_{2(g)}. Dans un bécher, on introduit 1,0 g de limaille de fer, puis on verse un volume V de 50 mL d'acide chlorhydrique de concentration $C = 0,50 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$.

1. Écrire l'équation - bilan de la réaction chimique
2. Calculer les quantités de matière des réactifs introduits.
3. En déduire le réactif limitant et donner les quantités de matière des espèces en fin de réaction.
4. Calculer le volume total de gaz dégagé à la fin de la réaction.
5. Quelles sont les concentrations des espèces présentes en solution à la fin de la réaction ?

Données :

- $M(Fe) = 55,8 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$
- $V_m = 24 \text{ L} \cdot \text{mol}^{-1}$.

Exercice 12

On fait réagir 5,4 g d'aluminium en poudre sur 12,8 g de fleur de soufre (soufre en poudre) en chauffant le mélange. Le produit obtenu est du sulfure d'aluminium de formule Al_2S_3 .

1. Écrire l'équation – bilan de la réaction
2. Calculer les quantités de matière d'aluminium et de soufre à l'état initial.
3. Construire le tableau d'avancement de la réaction
4. Quel est le réactif limitant ?
5. Faites le bilan en masse des réactifs et des produits à la fin de la réaction.

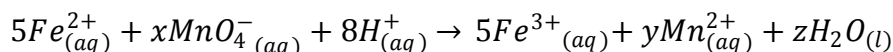
Données

$$M(Al) = 27 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$M(S) = 32 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$$

Exercice 13

Les ions permanganate MnO_4^- et les ions ferreux Fe^{2+} en milieu acide, H^+ en excès, réagissent selon la réaction d'équation – bilan :



C'est une réaction totale.

En solution, les ions $Fe^{2+(aq)}$ sont vert pâle, les ions $Fe^{3+(aq)}$ sont jaunes, les ions $MnO_4^-(aq)$ sont violets et les ions $Mn^{2+(aq)}$ sont incolores.

1. Equilibrer l'équation – bilan de la réaction en identifiant les coefficients x, y et z.
2. Construire le tableau d'avancement correspondant à la réaction étudiée.
On donne : $n_i(Fe^{2+}) = 1,50 \text{ mol}$ et $n_i(MnO_4^{2-}) = 0,30 \text{ mol}$
3. Calculer la valeur de l'avancement maximal x_{max} et en déduire le réactif limitant.
4. Calculer les quantités de matière de toutes les espèces ioniques présentes à l'état final.
5. Quelle est la couleur de la solution lorsque la réaction est achevée ?

