

Sujet 2 : Modèle de la réaction chimique – stoechiométrie – avancement d’une réaction chimique

Introduction

Qu’il s’agisse de la respiration, de la combustion ou d’un dosage en laboratoire, les réactions chimiques nous entourent et obéissent toutes à une logique déterminée par un modèle : les réactifs forment des produits selon des proportions fixes. Cette logique peut être modélisée rigoureusement grâce à la notion de **réaction chimique**, de **stoechiométrie**, et d’**avancement**.

Problématique : Comment **modéliser** une réaction chimique pour prévoir, suivre et comprendre l’évolution des quantités de matière au cours du temps ?

I. La réaction chimique : un modèle pour représenter une transformation de la matière

1. Définition d’une réaction chimique

- Une **réaction chimique** est un processus au cours duquel une ou plusieurs **espèces chimiques** sont **transformées** en d’autres.

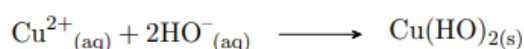
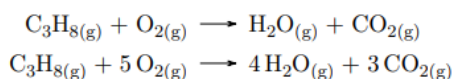
Conservation de la masse et de la charge

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**.

- Exemple simple :
 - $2 \text{H}_2 + \text{O}_2 \Rightarrow \text{H}_2\text{O}$ (*monter la conservation des atomes*)

2. Représentation de la réaction par une équation chimique

- Une équation chimique doit être :
 - **équilibrée** (même nombre d’atomes de chaque type de part et d’autre),
 - rédigée avec des **coefficients stoechiométriques** entiers devant chaque formule chimique.
- Ces coefficients donnent les **proportions de réaction** : (*monter la conservation des charges et des atomes*)



3. À l'échelle microscopique

- L'équation chimique symbolise ce qui se passe à l'échelle des molécules ou des ions, mais permet de faire des calculs à l'échelle macroscopique.

II. Le rôle fondamental de la stoechiométrie et l'avancement

1. L'avancement d'une réaction chimique

- **Suivi de l'évolution d'une transformation chimique :**
 - Suivre l'évolution des quantités de matière des espèces chimiques présentes.
- **État initial (E.I) :**
 - Correspond aux quantités de matière des réactifs présents initialement.
 - Se situe à l'instant $t=0$.
- **Etat intermédiaire :**
 - La quantité de matière des réactifs diminue au cours du temps.
 - La quantité de matière des produits augmente.
- **État final (E.F) :**
 - La réaction est terminée lorsque les quantités de matière des espèces présentes cessent d'évoluer.
 - C'est aussi le cas quand la quantité de matière d'un au moins des réactifs est nulle.
- **Avancement de la réaction x :**
 - Quantifie comment les quantités de matières évoluent entre l'état initial et l'état final.
 - Exprimé en moles (mol).

2. Réactif limitant, avancement maximal et réaction totale

- On appelle réaction totale une réaction chimique qui ne s'arrête que lorsque l'un au moins des réactifs a été entièrement consommé.
- 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 $x_f = x_{\max}$.
- 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.

- L'avancement maximal x_{\max} est obtenu par : (cf fiche du TP C08, mais tout est écrit ci-dessous)

Pour une réaction de support de titrage d'équation, où le réactif $A_{(aq)}$ est titré par le réactif $B_{(aq)}$:



La stoechiométrie de la réaction (totale) impose donc la relation suivante entre l'état final et l'état initial préparé :

$$\frac{\Delta n_A}{\alpha} = \frac{\Delta n_B}{\beta} = x_{\max}$$

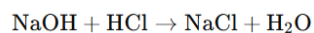
3. Le tableau d'avancement : outil de modélisation de l'avancement d'une réaction

- Il décrit l'évolution des quantités de matière en trois étapes :
 - **État initial**
 - **Etat intermédiaire** (en fonction de l'avancement x)
 - **État final**
- Ce tableau permet de **modéliser quantitativement** l'évolution de la réaction.

Equation de réaction		<u>aA</u>	+	<u>bB</u>	→	<u>cC</u>	+	<u>dD</u>
Etat du système	Avancement (mol)	n(A)		n(B)		n(C)		n(D)
Etat initial	$x = 0$	$n_0(A)$		$n_0(B)$		0		0
Etat intermédiaire	x	$n_0(A) - a.x$		$n_0(B) - b.x$		$c.x$		$d.x$
Etat final	x_{\max}	$n_0(A) - a.x_{\max}$		$n_0(B) - b.x_{\max}$		$c.x_{\max}$		$d.x_{\max}$

3. Application à des situations expérimentales

- Exemple de dosage acido-basique :



1:1, donc au point d'équivalence :

$$n(\text{NaOH}) = n(\text{HCl})$$

- Cela permet de **calculer une concentration** en connaissant un volume et une concentration initiale.
- Dans ce cas, c'est une réaction dite stoechiométrique.

III. L'avancement et la stoechiométrie dans les sciences appliquées

1. Suivi cinétique et suivi d'un système en laboratoire

- L'avancement x peut être mesuré expérimentalement grâce à :
 - Une variation de masse (ex. : dégagement de gaz),
 - Une variation de volume (réaction gazeuse),
 - Une variation de pH ou de conductivité,
 - Une absorbance (en spectrophotométrie).
- Cela permet de suivre une cinétique chimique (vitesse d'évolution du système).

2. Rendement et efficacité des réactions, dans le cas d'une synthèse par exemple

- Le **rendement** d'une réaction est donné par :

$$\eta = \frac{n_{\text{exp}}}{n_{\text{th}}}$$

- En réalité, le rendement n'est pas toujours de 100 % :
 - Réaction incomplète,
 - Pertes expérimentales,
 - Réactions secondaires.

3. Limites du modèle et prolongements (*optionnel*)

- Le modèle suppose que la réaction va jusqu'au bout, ce qui n'est pas toujours le cas.
- Certaines réactions sont réversibles (réactions d'équilibre), comme :



- Ces cas nécessitent d'introduire la notion de constante d'équilibre et de réaction partielle, **ce qui n'est pas de notre programme.** (*N'en parler que si c'est nécessaire : manque de temps...*)

Conclusion

In fine, le modèle de la réaction chimique accompagné de la stoechiométrie et de la notion d'avancement forme un cadre fondamental pour la compréhension des transformations chimiques. Il permet d'expliquer le comportement des réactifs et produits, de prévoir les quantités mises en jeu et de suivre expérimentalement le déroulement d'une réaction.

Il est fondamental aussi bien dans le cadre scolaire, que dans les laboratoires d'analyse, ou dans les procédés industriels. Ce modèle montre à quel point la chimie est une science rigoureuse, et structurée.

NB : Le lien avec le titrage peut très bien se faire dans cette présentation, si vous manquez de temps, n'hésitez pas à faire ce lien qui peut faire gagner des minutes.