

## Fiche

Nous sommes entourés de transformations chimiques : une huile qui devient rance, une statue en cuivre qui se couvre de vert-de-gris, l'utilisation de vinaigre pour détartre la cafetière. L'étude de la composition initiale et finale du système est donc primordiale pour comprendre toutes ces transformations.

### I. Quelles sont les transformations modélisées par une réaction d'oxydoréduction ?

#### Qu'est-ce qu'un oxydant ? Un réducteur ? Un couple d'oxydoréduction ?

##### • Définition :

- Un **oxydant** est une espèce chimique capable de **capter** un ou plusieurs électrons.
- Un **réducteur** est une espèce chimique capable de **céder** un ou plusieurs électrons.
- Un **couple oxydant/réducteur** est un ensemble constitué d'un oxydant et d'un réducteur susceptible de céder un ou plusieurs électrons. Le couple s'écrit : Ox/Red.

• **Exemple** : Dans le couple  $\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}$ , les ions  $\text{Fe}^{3+}$  représentent l'oxydant et les ions  $\text{Fe}^{2+}$  représentent le réducteur du couple.

 Exercice n°1

#### Qu'est-ce qu'une oxydation ? Une réduction ?


##### • Définition :

Une **oxydation** est une réaction au cours de laquelle il y a **perte** d'un ou plusieurs électrons. La demi-équation d'oxydation s'écrit :

- $\text{Red} \rightleftharpoons \text{Ox} + ne^-$ ,
- avec Red : le réducteur, Ox : l'oxydant,  $n$  : nombre entier et  $e^-$  : l'électron.
- Une **réduction** est une réaction au cours de laquelle il y a **gain** d'un ou plusieurs électrons. La demi-équation de réduction s'écrit :
- $\text{Ox} + ne^- \rightleftharpoons \text{Red}$ ,
- avec Red : le réducteur, Ox : l'oxydant,  $n$  : nombre entier et  $e^-$  : l'électron.

##### • Exemple :

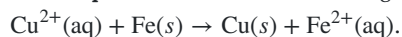
- La demi-équation :  $\text{Fe}(s) \rightleftharpoons \text{Fe}^{2+}(aq) + 2e^-$  est une oxydation, car il y a perte de deux électrons.
- La demi-équation :  $\text{Cu}^{2+}(aq) + 2e^- \rightleftharpoons \text{Cu}(s)$  est une réduction, car il y a gain de deux électrons.

 Exercice n°2

#### Qu'est-ce qu'une réaction d'oxydoréduction ?

• **Définition** : Une réaction d'oxydoréduction **résulte d'un transfert d'électrons entre le réducteur d'un couple et l'oxydant d'un autre couple**.

• **Exemple** : les ions cuivre (II) réagissent sur le fer. L'équation de la réaction est :

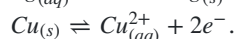
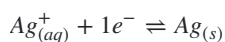


• Les ions cuivre (II) sont réduits, tandis que le métal fer est oxydé. Il y a transfert de deux électrons du fer vers les ions cuivre (II). Il s'agit donc d'une réaction d'oxydoréduction.

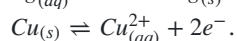
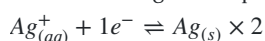
#### Comment établir une équation de la réaction d'oxydoréduction ?

• On effectue la réaction entre les ions  $\text{Ag}^+$  et les atomes de Cu. Les couples mis en présence sont  $\text{Ag}^+/\text{Ag}$  et  $\text{Cu}^{2+}/\text{Cu}$ .

- Écrire les deux demi-équations d'oxydoréduction et les équilibrer :



- L'équation bilan finale ne doit contenir aucun électron : multiplier les coefficients des demi-équations pour qu'il y ait autant d'électrons à gauche qu'à droite :



- Écrire la(ou les) demi-équation(s) modifiée(s) :



Toutes les quantités en mol.	Avancement	2 H <sub>2</sub> (g)	+	O <sub>2</sub> (g)	→	2 H <sub>2</sub> O (l)
État initial	0,0	4,0		3,0		0,0
En cours de transformation	$x$	$4,0 - 2.x$		$3,0 - x$		$0,0 + 2.x$
État maximal	$\chi_{\max} = 2,0$	0,0		$3,0 - \chi_{\max} = 1,0$		$2.\chi_{\max} = 4,0$

### Qu'est-ce qu'un mélange stœchiométrique ?

#### • Définition :

- Un mélange est dit **stœchiométrique** si les quantités de matière initiales des réactifs qui le constituent sont dans les **proportions des nombres stœchiométriques** de ces réactifs dans l'équation de la réaction.
- Dans ce cas, les quantités de matière de tous les réactifs s'annulent pour la même valeur de l'avancement. À la fin de la transformation chimique, tous les réactifs sont entièrement **consommés**.

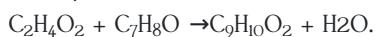
• **Exemple** : Soit la réaction suivante : C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>(g)



Le mélange initial sera stœchiométrique si  $\frac{n_{\text{initial}}(\text{C}_3\text{H}_8)}{1} = \frac{n_{\text{initial}}(\text{O}_2)}{5}$ .

### Qu'est-ce qu'une réaction non totale ?

• La synthèse de l'éthanoate de benzyle C<sub>9</sub>H<sub>10</sub>O<sub>2</sub>, est une réaction d'estérification selon :



- Si on effectue la réaction dans les proportions stœchiométriques, à la fin il reste à la fois de l'alcool C<sub>7</sub>H<sub>8</sub>O et de l'acide C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>O<sub>2</sub>.
- Le tableau d'avancement du système chimique précédent est le suivant :

Toutes les quantités en mol.	Avancement	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	+	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> O	→	C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>	+	H <sub>2</sub> O
État initial	0,0	1,0		1,0		0,0		0,0
En cours de transformation	$x$	$1,0 - x$		$1,0 - x$		$x$		$x$
État maximal	$\chi_{\max} = 1,0$	$1,0 - \chi_{\max} = 0,0$		$1,0 - \chi_{\max} = 0,0$		$\chi_{\max} = 1,0$		$\chi_{\max} = 1,0$
État final réel	$\chi_f$	$1,0 - \chi_f = 0,3$		$1,0 - \chi_f = 0,3$		$\chi_f = 0,7$		$\chi_f = 0,7$

• Or, on ne récupère qu'environ 0,7 mol d'ester et il reste 0,3 mol d'acide et d'alcool. Cette observation est en désaccord avec le fait que la réaction soit totale.

• Il est donc possible de créer une molécule d'ester et une molécule d'eau lorsqu'une molécule d'alcool et une molécule d'acide entrent en collision. Mais il est possible qu'une molécule d'eau et une molécule d'ester entrent en collision. Une nouvelle molécule d'alcool et une molécule d'acide se forment alors.

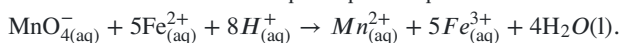
• Il y a donc un **équilibre** qui se crée entre la réaction qui se produit dans le sens direct et celle qui se produit dans le **sens indirect**.

#### • Définition :

- Un système chimique, siège d'une **réaction limitée** (non totale), atteint un **équilibre chimique** lorsque les concentrations des différentes espèces n'évoluent plus. Cet état d'équilibre est dynamique : il ne traduit pas l'existence de deux transformations inverses se produisant simultanément. À l'échelle macroscopique, le système n'évolue plus.
- La réaction sera alors notée avec une **double flèche**  $\rightleftharpoons$ .
- On introduit l'**avancement final**  $\chi_f < \chi_{\max}$  qui traduira l'état final observé du système.

### Que faut-il faire avec Python ?

• La transformation chimique a pour équation :



Les ions hydrogène sont en excès et l'eau est le solvant : les ions hydrogène et l'eau n'influencent pas la composition du système final. La réaction est totale.

• Le tableau d'avancement est :

Toutes les quantités en mol.	Avancement	Mn <sub>4(aq)</sub> <sup>-</sup>	+	5Fe <sub>(aq)</sub> <sup>2+</sup>	+	8H <sub>(aq)</sub> <sup>+</sup>	→	Mn <sub>(aq)</sub> <sup>2+</sup>	+	5Fe <sub>(aq)</sub> <sup>3+</sup>	+	4H <sub>2</sub> O(l)
État initial	0,0	no_MnO4		no_Fe2		Excès		no_Mn2 = 0,0		no_Fe3 = 0,0		Solvant

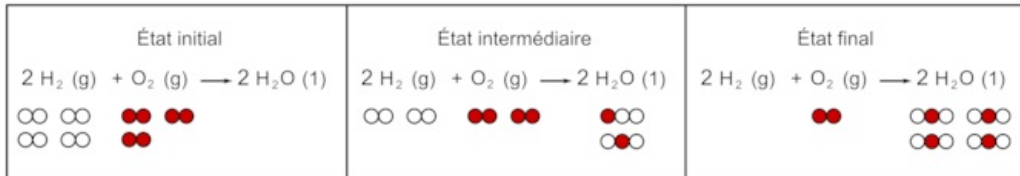
En cours de transformation	$x$	$\text{no\_MnO}_4 - x$	$\text{no\_Fe}_2 - 5x$	Excès	$x$	$5x$	Solvant
État maximal	$\chi_{\max}$	$\text{no\_MnO}_4 - \chi_{\max}$	$\text{no\_Fe}_2 - 5\chi_{\max}$	Excès	$\chi_{\max} = 0,0$	$5\chi_{\max}$	Solvant

- Recherche du réactif limitant :

Hypothèse n°1 :  $\text{MnO}_4^-$  est le réactif limitant alors  $\text{no\_MnO}_4 - \chi_{\max 1} = 0 \Rightarrow \chi_{\max 1} = \text{no\_MnO}_4$

Hypothèse n°2 :  $\text{Fe}^{2+}$  est le réactif limitant alors  $\text{no\_Fe}_2 - 5\chi_{\max 2} = 0 \Rightarrow \chi_{\max 2} = \frac{\text{no\_Fe}_2}{5}$ .

- 1/ Enregistrer les coefficients stœchiométriques dans des variables nommées :



- 2/ Demander la composition initiale de tout le système :

## # Déclaration des coefficients stœchiométriques

$\text{cs\_MnO}_4 = 1$

$\text{cs\_Fe}_2 = 5$

$\text{cs\_Mn}_2 = 1$

$\text{cs\_Fe}_3 = 5$

- 3/ Chercher le réactif limitant, pour cela on calcule les deux avancements possibles et on teste celui qui donne l'avancement le plus petit :

```
# Initialisation des quantités de matières initiales (en mol)
no_MnO4 = float(input("Que vaut la quantité de matière initiale de permanganate ? : "))
no_Fe2 = float(input("Que vaut la quantité de matière initiale d'ions fer II ? : "))
no_Mn2 = 0
no_Fe3 = 0
```

- 4/ Pour voir l'évolution du système chimique sur un graphique, il faut auparavant créer des listes pour contenir toutes les valeurs des quantités de matière du système : pour l'avancement  $x$  et pour les quantités de matière de chaque constituant :

```

# Calcul de l'avancement maximum
x_max_MnO4 = no_MnO4 / cs_MnO4
x_max_Fe2 = no_Fe2 / cs_Fe2
if x_max_MnO4 < x_max_Fe2 :
    x_max = x_max_MnO4
else :
    x_max = x_max_Fe2

```

- 5/ Importer la bibliothèque graphique et créer le graphique :

```

# Création des listes
x = [ 0, x_max ]
n_MnO4 = [ (no_MnO4 - cs_MnO4*valeur) for valeur in x]
n_Fe2 = [ (no_Fe2 - cs_Fe2*valeur) for valeur in x]
n_Mn2 = [ (no_Mn2 + cs_Mn2*valeur) for valeur in x]
n_Fe3 = [ (no_Fe3 + cs_Fe3*valeur) for valeur in x]

```

### À savoir et à savoir réaliser :

- 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.
- 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 la composition du système dans l'état final en fonction de sa composition initiale pour une transformation considérée comme totale.
- Déterminer l'avancement final d'une réaction à partir de la description de l'état final et comparer à l'avancement maximal.
- Déterminer la composition de l'état final d'un système et l'avancement final d'une réaction.
- 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.