

Réaction chimique et bilan de matière

La modélisation des transformations chimiques par des équations de réaction permet non seulement de rendre compte des phénomènes observés, mais également de prévoir les quantités de produits formés ou celles de réactifs nécessaires : ceci revêt une importance capitale en chimie, notamment dans l'industrie...

1 – Modélisation d'une transformation chimique par une réaction

1.1 – Evolution d'un système chimique

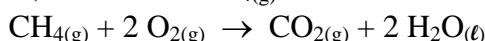
Lors d'une transformation chimique, des espèces chimiques (atomes, ions, molécules) sont modifiées : le système passe d'un état initial à un état final dont les propriétés physiques (pression, température, état) et chimiques (quantités) sont différentes.

Si l'origine est à chercher au niveau microscopique, les chimistes décrivent les transformations chimiques à l'échelle macroscopique au moyen de processus appelés **réactions chimiques** mettant en jeu des réactifs (état initial) et des produits (état final) identifiés ; la réaction est alors symbolisée par une **équation de réaction**.

L'écriture d'une équation chimique respecte

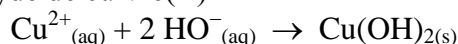
- la **loi de conservation des éléments chimiques**
- la **loi de conservation de la charge électrique globale** de part et d'autre de la flèche qui symbolise le processus d'évolution du système.

Exemple : combustion du gaz de ville, le méthane $\text{CH}_4(\text{g})$.



On commence par ajuster le carbone, puis l'hydrogène, et enfin l'oxygène.

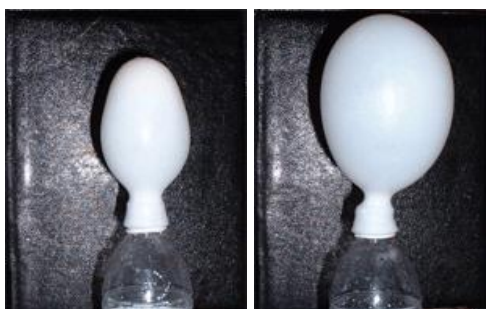
Exemple : précipitation de l'hydroxyde de cuivre(II)



Le coefficient 2 est justifié par l'électronéutralité du solide formé.

1.2 – Stœchiométrie d'une réaction chimique

Lors d'une transformation chimique, les quantités de matière de réactifs consommés et les quantités de matière de produits formés dépendent les unes des autres.



En mélangeant du bicarbonate de soude et du vinaigre dans une bouteille coiffée d'un ballon de baudruche, ce dernier gonfle : c'est le dioxyde de carbone produit par la réaction qui en est responsable.

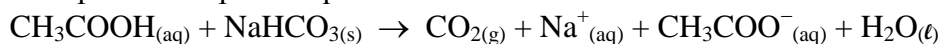
Plus on met de bicarbonate et de vinaigre, et plus le ballon gonfle : plus il y a de réactifs engagés, plus il y a de produits formés...

On appelle **stœchiométrie** les relations de proportionnalité qui existent entre les quantités de matières consommées en réactifs et entre les quantités de matières formées en produits.

La stœchiométrie d'une réaction est déterminée par les coefficients d'ajustement de l'équation chimique.

Exemple

Lors de l'action du vinaigre (acide éthanóique $\text{CH}_3\text{COOH}(\text{aq})$) sur le bicarbonate de soude ($\text{NaHCO}_3(\text{s})$), du dioxyde de carbone est produit d'après l'équation



L'équation ainsi ajustée indique que l'utilisation d'une mole d'acide éthanóique (60 g soit 600 mL de vinaigre à 10°) et d'une mole de bicarbonate de soude (84 g) conduit à la production d'une mole (24 L dans les conditions standard) de dioxyde de carbone. Si l'on utilise des quantités doubles de réactifs, on obtiendra des quantités doubles de produit.

Pour bien comprendre ce qui se passe, on peut utiliser une « équation culinaire » :

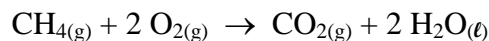


2 – Bilan de matière d'un système chimique

2.1 – Notion d'avancement x

Pour suivre l'évolution des quantités de matière en réactifs et en produits au cours d'une transformation, le chimiste utilise l'avancement : c'est une grandeur, notée x et exprimée en moles, qui est initialement nulle et qui croît au cours de la réaction jusqu'à atteindre une valeur finale x_f .

Reprenons l'exemple de la combustion du méthane,



Au cours de la transformation, s'il se forme x mol de dioxyde de carbone, c'est nécessairement que x moles de méthane ont été consommées, de même que $2x$ moles de dioxygène ; il s'est alors formé $2x$ moles d'eau.

Dans notre « exemple culinaire » ci-dessus, pour réaliser x sandwiches, il faut $2x$ tranches de pain et x tranches de jambon...

2.2 – Notion d'avancement maximal x_{max} et de réactif limitant

Au cours d'une transformation, les quantités de matière des réactifs diminuent alors que l'avancement croît. Si la réaction est bien totale, ce dernier ne peut pas dépasser la valeur maximale x_{max} qui correspond à la consommation entière de l'un des réactifs appelé réactif limitant. Si cette valeur est atteinte, la réaction s'arrête à l'échelle macroscopique.



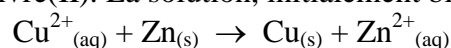
Lors de la formation de la rouille sur une coque de bateau, le fer réagit avec le dioxygène de l'air. Le réactif limitant est alors le fer.

2.3 – Tableau d'évolution du système chimique (tableau d'avancement)

Pour noter l'évolution des quantités de matière des réactifs et des produits au cours de la transformation, on utilise un tableau qui réalise, sur chaque ligne, le **bilan de matière** (composition en mol du système) : à l'état initial, en cours de transformation, et à l'état final.

Exemple n°1

Prenons l'exemple de la réaction entre les ions cuivre(II) et le zinc se produisant lorsqu'on place de la poudre de zinc dans du sulfate de cuivre(II). La solution, initialement bleue turquoise, se décolore.



On place $m = 500$ mg de poudre de zinc dans $V = 50,0$ mL de sulfate de cuivre à $c = 0,100$ mol.L⁻¹.

On donne $M(\text{Zn}) = 65,4$ g.mol⁻¹.

équation de réaction		$\text{Cu}^{2+}_{(\text{aq})}$	+	$\text{Zn}_{(\text{s})}$	\rightarrow	$\text{Cu}_{(\text{s})}$	+	$\text{Zn}^{2+}_{(\text{aq})}$
état	avancement (en mmol)	$n(\text{Cu}^{2+})$ (en mmol)		$n(\text{Zn})$ (en mmol)		$n(\text{Cu})$ (en mmol)		$n(\text{Zn}^{2+})$ (en mmol)
état initial	0	7,65		5,00		0		0
en cours de transformation	x	$7,65 - x$ (ce qui reste)		$5,00 - x$ (ce qui reste)		x (se forme)		x (se forme)
état final (réaction totale)	x_{max}	$7,65 - x_{\text{max}}$ (ce qui reste)		$5,00 - x_{\text{max}}$ (ce qui reste)		x_{max} (se forme)		x_{max} (se forme)

Pour compléter le tableau, il faut commencer par déterminer le bilan de matière à l'état initial à l'aide des quantités de réactifs mis en présence.

$$n(\text{Zn})_i = \frac{m(\text{Zn})_i}{M(\text{Zn})} = \frac{0,500}{65,4} = 7,65 \cdot 10^{-3} \text{ mol} = 7,65 \text{ mmol}$$

$$n(\text{Cu}^{2+})_i = c \times V = 0,100 \times 50,0 \cdot 10^{-3} = 5,00 \cdot 10^{-3} \text{ mol} = 5,00 \text{ mmol}$$

Pour remplir la dernière ligne du tableau, il faut faire deux hypothèses.

- **Hypothèse 1** : les ions $\text{Cu}^{2+}_{(\text{aq})}$ constituent le réactif limitant. Si ce réactif est entièrement consommé, l'hypothèse conduit à un avancement maximal $x_{\text{max}1}$ tel que $n(\text{Cu}^{2+})_f = 5,00 - x_{\text{max}1} = 0$ soit $x_{\text{max}1} = 5,00$ mmol.
- **Hypothèse 2** : le zinc $\text{Zn}_{(\text{s})}$ constituent le réactif limitant. Si ce réactif est entièrement consommé, l'hypothèse conduit à un avancement maximal $x_{\text{max}2}$ tel que $n(\text{Zn})_f = 7,65 - x_{\text{max}2} = 0$ soit $x_{\text{max}2} = 7,65$ mmol.

De ces deux hypothèses, une seule est correcte. Laquelle ?

L'avancement est une grandeur croissante initialement nulle ; la réaction s'arrête lorsque l'un des réactif a disparu : parmi ces deux hypothèses, la seule à valider est celle conduisant à l'avancement maximal le plus faible, soit ici $x_{\text{max}} = x_{\text{max}1} = 5,00$ mmol. Nous découvrons ainsi que le **réactif limitant** est l'ion cuivre(II) : c'est ce réactif en défaut qui provoque l'arrêt de la réaction.

Exemple n°2 : réaction de précipitation de l'hydroxyde de cuivre(II)

Chaque ligne décrit la composition du système chimique dans l'état considéré.

Équation		$\text{Cu}^{2+}_{(\text{aq})}$	+	$2 \text{HO}^{-}_{(\text{aq})}$	\rightarrow	$\text{Cu}(\text{OH})_2 (\text{s})$
État	Avancement	Quantités de matière (mol)				
initial	0	$n_{\text{Cu}^{2+},i}$		$n_{\text{HO}^{-},i}$		0
en cours	x	$n_{\text{Cu}^{2+},i} - x$		$n_{\text{HO}^{-},i} - 2x$		x
final	x_{max}	$n_{\text{Cu}^{2+},i} - x_{\text{max}}$		$n_{\text{HO}^{-},i} - 2x_{\text{max}}$		x_{max}

La quantité de réactif consommée se calcule en multipliant x par le nombre stœchiométrique situé devant la formule de ce réactif dans l'équation de la réaction chimique.

Signe $-$ car les réactifs disparaissent.

Chaque colonne présente l'évolution de la quantité de matière d'une espèce de l'état initial à l'état final.

3 – Généralisation

équation de réaction		a A	+ b B	→	c C	+ d D
état	avancement (en mol)	n(A) (en mol)	n(B) (en mol)		n(C) (en mol)	n(D) (en mol)
état initial	0	$n_{A,i}$	$n_{B,i}$		0	0
en cours de transformation	x	$n_{A,i} - a x$ (ce qui reste)	$n_{B,i} - b x$ (ce qui reste)		$c x$ (se forme)	$d x$ (se forme)
état final (réaction totale)	x_{max}	$n_{A,i} - a x_{max}$ (ce qui reste)	$n_{B,i} - b x_{max}$ (ce qui reste)		$c x_{max}$ (se forme)	$d x_{max}$ (se forme)

Quelques remarques importantes

- Il faut bien prendre le temps d'écrire et d'équilibrer (ajuster) l'équation de réaction, en ayant pris soin d'identifier les réactifs et les produits concernés ; certaines espèces, par exemple, peuvent être spectatrices (elles n'apparaissent alors pas nécessairement dans l'équation de réaction).
- Un tableau d'avancement est standard : il ne faut pas prendre la liberté de supprimer des cases, colonnes ou lignes.
- Les calculs effectués doivent être clairement présentés, par exemple en dessous du tableau.
- Ce tableau peut être généralisé aux réactions à plus ou moins de 2 réactifs et produits.
- Pour déterminer la valeur de x_{max} , et le réactif limitant, il faut autant d'hypothèses que de réactifs et toutes conduisent à leur valeur de x_{max} : on gardera celle qui donne la plus petite valeur de x_{max} .
- Certains réactifs sont parfois en excès (en grande quantité) ; l'eau est parfois produite alors qu'elle est solvant : dans ces cas, il est souvent inutile de remplir les colonnes correspondantes.
- Le tableau peut être dressé en moles ou en millimoles, mais attention de ne pas oublier le choix effectué.
- Pour remplir le tableau, il faut bien lire l'énoncé du problème afin de déterminer les conditions expérimentales, grandeurs connues et inconnues.
- Un mélange stœchiométrique correspond à des quantités initiales de réactifs qui respectent la stœchiométrie dictée par l'équation de réaction ajustée : dans ce cas, les réactifs sont tous limitants et sont complètement consommés en fin de réaction.

Application : le dosage par titrage

Doser, c'est déterminer la concentration ou la quantité de matière d'une espèce en solution : c'est un moyen de mesure courant en chimie, comme l'utilisation du multimètre en électricité.

Pour effectuer un dosage, on peut procéder par étalonnage comme nous l'avons déjà vu (TP n°4b) mais également par titrage : on utilise alors une réaction chimique support du titrage dont la stœchiométrie permet d'établir un lien entre la concentration ou quantité de matière inconnue et les grandeurs connues du titrage. C'est ce que propose, par exemple, la situation n°1 du TP n°5b.

Entraînez-vous : il est ESSENTIEL de reprendre les TP associés au chapitre ainsi que les exercices proposés.