

REACTIONS CHIMIQUES

Avancement d'une réaction chimique

1- Quantité de matière

Mesurer la quantité de matière n (en mol) d'une espèce chimique, c'est compter le nombre d'entité (atome, molécule, ion) de cette espèce chimique en les regroupant en paquet contenant $N_A = 6,02 \cdot 10^{23}$ entités de matière.

N_A est le nombre d'Avogadro:

$$N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

Le nombre d'entités chimiques élémentaires N contenues dans un échantillon de matière est proportionnel à la quantité de matière n . Le coefficient de proportionnalité est la constante d'Avogadro N_A .

$$N = n \times N_A \quad \text{ou} \quad n = \frac{N}{N_A}$$

N : Nombre d'entité (sans unité)
n : Quantité de matière (mol)
N_A : Nombre d'Avogadro (mol^{-1})

Si la masse m et la masse molaire M d'un échantillon d'une espèce chimique pure sont connues alors la quantité de matière n peut être calculée grâce la relation:

$$n = \frac{m}{M}$$

n : Quantité de matière de l'espèce chimique (mol)
m : Masse de l'espèce chimique (g)
M : Masse molaire de l'espèce chimique ($\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$)

La quantité de matière n d'un volume V d'une solution de masse volumique ρ est donnée par la relation:

$$n = \frac{\rho \times V}{M}$$

n : Quantité de matière de l'espèce chimique (mol)
ρ : Masse volumique du liquide (g/mL ou g/cm^3)
V : Volume occupée par le liquide (mL ou cm^3)
M : Masse molaire de l'espèce chimique ($\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$)

La relation qui donne la quantité de matière n d'un volume V d'un gaz est:

$$n = \frac{V}{V_m}$$

n : Quantité de matière de l'espèce chimique (mol)
V : Volume du gaz (L)
V_m : Volume molaire du gaz (L/mol)

La concentration molaire C d'une espèce chimique est le rapport de la quantité n de cette espèce chimique par le volume V de la solution.

$$C = \frac{n}{V} \quad \left| \begin{array}{l} C: \text{Concentration molaire (mol/L ou mol.L}^{-1}\text{)} \\ n: \text{Quantité de matière de l'espèce chimique (mol)} \\ V: \text{Volume de la solution (L)} \end{array} \right.$$

2- Réaction chimique et bilan de matière

2.1- Définition

On appelle transformation chimique, le passage d'un système chimique d'un état initial à un état final avec transformation des espèces chimiques.

Par exemple, la corrosion du fer dans le dioxygène de l'air transforme le fer en rouille (oxyde de fer):

- Etat initial: fer Fe et dioxygène O_2 .
- Etat final: oxyde de fer Fe_2O_3

Les transformations peuvent être totales ou non.

Dans l'exemple précédent, comme les transformations sont réalisées dans le dioxygène de l'air, il restera du dioxygène.

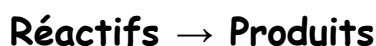
2.2- Modélisation d'une transformation chimique

Les espèces qui sont présentes dans l'état initial sont appelées réactifs et leur quantité de matière diminue au cours de la transformation chimique.

Les espèces qui apparaissent dans l'état final sont appelées produits et leur quantité de matière augmente au cours de la transformation chimique.

Lorsque la quantité de matière d'une espèce n'évolue pas (ne change pas) au cours d'une transformation chimique, alors c'est une espèce spectatrice. On ne note pas dans les équations chimiques les espèces spectatrices.

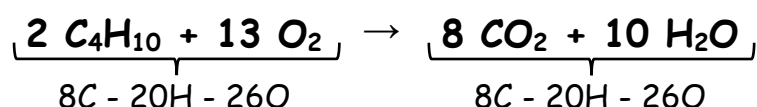
On modélise la transformation chimique par une réaction chimique qui sera associée à une équation chimique (ou équation-bilan). Pour écrire une équation chimique, on place une flèche horizontale vers la droite, les réactifs sont placés à gauche de la flèche et les produits à droite de la flèche:



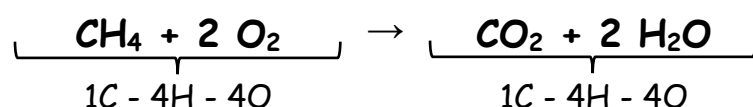
Au cours d'une transformation chimique, les éléments chimiques (le nombre d'atomes) et la charge électrique se conservent.

Pour écrire une équation chimique en écriture symbolique, il est donc nécessaire d'ajuster les nombres devant les formules chimiques. Ces nombres sont appelés **nombres stœchiométriques**. On dit que l'on équilibre l'équation chimique.

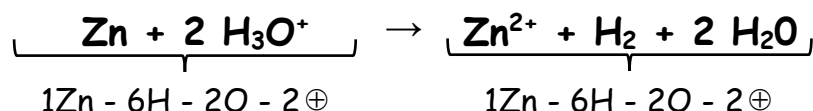
Exemple 1 - Le butane de formule C_4H_{10} , brûle dans le dioxygène de formule O_2 et se transforme en dioxyde de carbone de formule CO_2 et en eau H_2O :



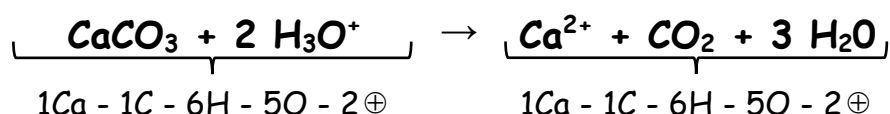
Exemple 2 - La combustion du méthane CH_4 dans le dioxygène O_2 produit du dioxyde de carbone CO_2 et de l'eau H_2O :



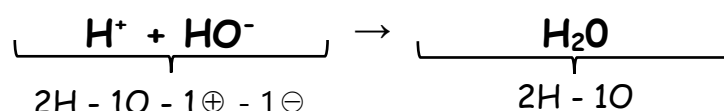
Exemple 3 - La corrosion du zinc de formule Zn par un acide contenant des ion oxonium de formule H_3O^+ produit des ions zinc Zn^{2+} , du dihydrogène H_2 et de l'eau H_2O :



Exemple 4 - L'action d'un acide contenant des ion oxonium de formule H_3O^+ sur le calcaire de formule $CaCO_3$ produit des ions calcium Ca^{2+} , du dioxyde de carbone CO_2 et de l'eau H_2O :



Exemple 5 - L'action de l'acide chlorhydrique de formule $H^+ + Cl^-$ sur l'hydroxyde de sodium de formule $Na^+ + HO^-$ produit de l'eau H_2O :



On notera que les espèces Cl^- et Na^+ sont des espèces spectatrices et n'apparaissent donc pas dans l'écriture de la réaction.

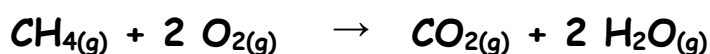
2.3- Bilan de matière et réactif limitant

Le bilan de matière consiste à faire l'inventaire de toutes les espèces présentes à l'état final (après la transformation chimique) et à donner les quantités de matière de chacune.

Lorsque, au cours d'une transformation chimique, un des réactifs est entièrement consommé, on l'appelle le réactif limitant.

Si tous les réactifs sont entièrement consommés, on dit alors que le mélange est en proportion stœchiométrique.

Considérons l'équation-bilan de la combustion du méthane.

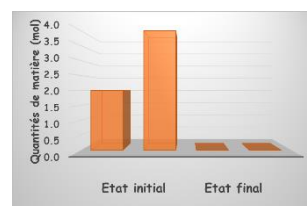


Plusieurs cas peuvent se produire suivant les quantités respectives de butane $n(\text{C}_4\text{H}_{10})$ et de dioxygène $n(\text{O}_2)$.



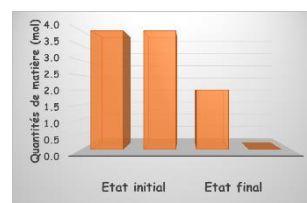
Le mélange est dans des proportions stœchiométriques, c'est à dire c'est à dire les quantités de butane C_4H_{10} et de dioxygène O_2 sont identiques.

$$\frac{n(\text{CH}_4)}{1} = \frac{n(\text{O}_2)}{2}$$



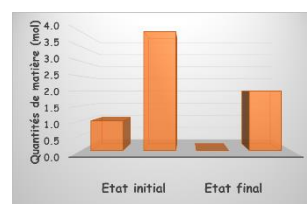
Le dioxygène O_2 est le réactif limitant et le butane C_4H_{10} le réactif en excès.

$$\frac{n(\text{CH}_4)}{1} > \frac{n(\text{O}_2)}{2}$$



Le butane C_4H_{10} est le réactif limitant et le dioxygène O_2 le réactif en excès.

$$\frac{n(\text{CH}_4)}{1} < \frac{n(\text{O}_2)}{2}$$

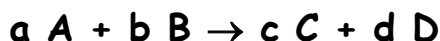


Pour rechercher le réactif limitant d'une réaction dont on connaît l'équation de réaction équilibrée, il faut donc:

- Calculer le nombre de moles de chaque réactif présent au début de la réaction.
- Diviser ce nombre de mole par le coefficient stœchiométrique correspondant au réactif.
- Le réactif ayant le plus petit rapport sera le réactif limitant la réaction, les autres seront en excès.

Une fois le réactif limitant déterminé, c'est à dire le plus petit rapport trouvé, on peut en déduire les quantités de matière des produits.

Considérons l'équation de la réaction chimique suivante:



où **A** et **B** sont les réactifs, **C** et **D** les produits et **a**, **b**, **c** et **d** les coefficients stœchiométriques.

On notera $n(A)_0$, $n(B)_0$, $n(C)_0$ et $n(D)_0$ les quantités de matière initiales et $n(A)_f$, $n(B)_f$, $n(C)_f$ et $n(D)_f$ les quantités de matière finales.

Le réactif limitant correspondra au plus petit rapport entre $\frac{n(A)_0}{a}$ et $\frac{n(B)_0}{b}$.

Appelons **x** la plus petite valeur de ces deux rapports.

Nous aurons alors à la fin de la réaction

$$n(A)_f = n(A)_0 - a \cdot x \quad n(B)_f = n(B)_0 - b \cdot x \quad n(C)_f = n(C)_0 + c \cdot x \quad n(D)_f = n(D)_0 + d \cdot x$$

*Remarque: La valeur de **x** s'appelle valeur d'avancement de la réaction.*

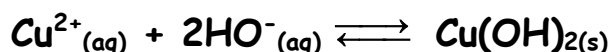
3- Avancement d'une réaction chimique

L'avancement de la réaction, noté **x**, est une quantité de matière proportionnel au nombre de fois que la réaction se produit au niveau microscopique.

L'avancement de la réaction noté **x** s'exprime en moles (mol).

Cet avancement augmente de **0** mol dans l'état initial à sa valeur finale x_f dans l'état final.

Exemple: Considérons la réaction de précipitation de l'hydroxyde de cuivre:



Lorsque l'avancement est **x**, alors:

- La quantité de matière de $\text{Cu}^{2+}_{(aq)}$ consommé est **x**.
- La quantité de matière de $\text{HO}^{-}_{(aq)}$ consommé est **2.x**.
- La quantité de matière de $\text{Cu(OH)}_{2(s)}$ formé est **x**.

4- Avancements final et maximal

Il est important de différencier avancement final et avancement maximal.

L'avancement final x_f correspond à l'avancement effectivement observé quand la réaction s'arrête et qu'elle n'évolue plus.

L'avancement maximal x_{\max} est l'avancement qui théoriquement pourrait être atteint quand un des réactifs disparaît.

Il existe des cas où l'avancement final x_f est plus faible que l'avancement maximal x_{\max} , la réaction semble s'arrêter avant l'épuisement de l'un des réactifs.

5- Transformations totale et limitée

On dit qu'une transformation est totale lorsqu'elle s'arrête quand un réactif vient à manquer (comme par exemple les combustions). On appelle réactif limitant le réactif qui est entièrement consommé. L'avancement final x_f est alors égal à une valeur maximale. C'est l'avancement maximal x_{\max} .

Transformation totale: $x_f = x_{\max}$

On dit qu'une transformation est limitée ou non totale quand elle s'arrête alors qu'aucun réactif n'a été entièrement consommé. L'avancement final x_f est alors inférieur à l'avancement maximal x_{\max} .

Transformation limitée: $x_f < x_{\max}$

6- Tableau d'avancement d'une réaction chimique

6.1- Travail préliminaire

Déterminer la composition d'un système chimique correspond à donner les quantités de matière de toutes les espèces chimiques présentes.

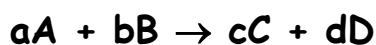
Pour cela, on peut s'aider d'un tableau d'avancement, qui décrit l'évolution des quantités de matières d'un système chimique, depuis l'état initial, le moment où la réaction démarre, jusqu'à l'état final, quand la réaction se termine et que le système n'évolue plus.

Le tableau donne également l'état intermédiaire du système lors de son évolution.

Dans ce tableau les réactifs sont consommés, ils disparaissent. Les produits sont fabriqués, ils apparaissent.

6.2- Construction du tableau d'avancement

Considérons la réaction suivante:



Les espèces chimiques **A**, **B**, **C** et **D** sont respectivement des réactifs et des produits.

Les coefficients **a**, **b**, **c** et **d** sont les coefficients stœchiométriques permettant d'équilibrer cette équation bilan.

Avant la réaction les quantités de matière présentes sont $n(A)_0$, $n(B)_0$, $n(C)_0$ et $n(D)_0$.

Construisons le tableau d'avancement par étapes.

Etape 1: Au départ le tableau d'avancement est vide.

Equation de la réaction				
Etat initial (t=0)				
Etat intermédiaire (t)				
Etat final ou expérimental (t _f)				
Etat maximum ou théorique (t _{max})				

Etape 2: On écrit l'équation chimique équilibrée.

Equation de la réaction	aA	+	bB	\rightleftharpoons	cC	+	dD
Etat initial (t=0)							
Etat intermédiaire (t)							
Etat final ou expérimental (t _f)							
Etat maximum ou théorique (t _{max})							

Etape 3: On écrit les quantités de matières initialement présentes

Equation de la réaction	$aA + bB \rightleftharpoons cC + dD$			
Etat initial (t=0)	$n(A)_0$	$n(B)_0$	$n(C)_0$	$n(D)_0$
Etat intermédiaire (t)				
Etat final ou expérimental (t _f)				
Etat maximum ou théorique (t _{max})				

Etape 4: On écrit ensuite que les réactifs sont consommés, leur quantité décroît à chaque fois que la réaction se produit. Puis on écrit que les produits apparaissent quand la réaction se produit

Equation de la réaction	$aA + bB \rightleftharpoons cC + dD$			
Etat initial (t=0)	$n(A)_0$	$n(B)_0$	$n(C)_0$	$n(D)_0$
Etat intermédiaire (t)	$n(A)_0 - a \cdot x$	$n(B)_0 - b \cdot x$	$n(C)_0 + c \cdot x$	$n(D)_0 + d \cdot x$
Etat final ou expérimental (t _f)				
Etat maximum ou théorique (t _{max})				

Etape 5: On écrit ensuite les quantités des réactifs et des produits à l'état d'avancement final x_f qui est aussi l'état d'équilibre expérimental. On obtient cet état d'équilibre lorsque la réaction est limitée.

Equation de la réaction	$aA + bB \rightleftharpoons cC + dD$			
Etat initial (t=0)	$n(A)_0$	$n(B)_0$	$n(C)_0$	$n(D)_0$
Etat intermédiaire (t)	$n(A)_0 - a \cdot x$	$n(B)_0 - b \cdot x$	$n(C)_0 + c \cdot x$	$n(D)_0 + d \cdot x$
Etat final ou expérimental (t _f)	$n(A)_0 - a \cdot x_f$	$n(B)_0 - b \cdot x_f$	$n(C)_0 + c \cdot x_f$	$n(D)_0 + d \cdot x_f$
Etat maximum ou théorique (t _{max})				

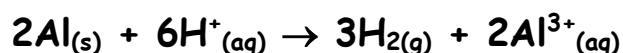
Etape 6: On écrit ensuite les quantités des réactifs et des produits à l'état d'avancement maximale x_{\max} qui est aussi parfois un état théorique. On obtient cet état d'équilibre lorsque la réaction est totale ou lorsque l'un des réactifs est entièrement consommé.

Equation de la réaction	$aA + bB \rightleftharpoons cC + dD$			
Etat initial ($t=0$)	$n(A)_0$	$n(B)_0$	$n(C)_0$	$n(D)_0$
Etat intermédiaire (t)	$n(A)_0 - a \cdot x$	$n(B)_0 - b \cdot x$	$n(C)_0 + c \cdot x$	$n(D)_0 + d \cdot x$
Etat final ou expérimental (t_f)	$n(A)_0 - a \cdot x_f$	$n(B)_0 - b \cdot x_f$	$n(C)_0 + c \cdot x_f$	$n(D)_0 + d \cdot x_f$
Etat maximum ou théorique (t_{\max})	$n(A)_0 - a \cdot x_{\max}$	$n(B)_0 - b \cdot x_{\max}$	$n(C)_0 + c \cdot x_{\max}$	$n(D)_0 + d \cdot x_{\max}$

Remarque: Parfois on pourra ne pas tenir compte de cet état d'avancement maximum qui correspond à un cas théorique permettant d'évaluer le taux d'avancement de la réaction.

6.3- Cas d'une transformation totale avec disparition des 2 réactifs

Considérons la réaction entre de l'aluminium $Al_{(s)}$ et de l'acide chlorhydrique ($H^+_{(aq)}$, $Cl^-_{(aq)}$) qui produit du dihydrogène $H_{2(g)}$ et des ions $Al^{3+}_{(aq)}$. Dans cette réaction, les ions $Cl^-_{(aq)}$ sont des espèces chimiques spectatrices. La réaction chimique s'écrit donc:



On considère le cas où avant la réaction les quantités de matière présentes sont:

$$n(Al)_0 = 1,0 \text{ mol} \quad n(H^+)_0 = 3,0 \text{ mol} \quad n(H_2)_0 = 0,0 \text{ mol} \quad n(Al^{3+})_0 = 0,0 \text{ mol}$$

Dans cet exemple, on ne tiendra pas compte de l'état d'avancement maximal de la réaction

Le tableau d'avancement sera donc le suivant:

Equation de la réaction	$2Al_{(s)} + 6H^+_{(aq)} \rightleftharpoons 3H_{2(g)} + 2Al^{3+}_{(aq)}$			
Etat initial ($t=0$)	1,0	3,0	0	0
Etat intermédiaire (t)	$1,0 - 2 \cdot x$	$3,0 - 6 \cdot x$	$3 \cdot x$	$2 \cdot x$
Etat final ou expérimental (t_f)	$1,0 - 2 \cdot x_f$	$3,0 - 6 \cdot x_f$	$3 \cdot x_f$	$2 \cdot x_f$

On recherche la valeur de l'avancement final x_f pour laquelle les réactifs disparaissent.

Pour cela on doit résoudre les deux équations:

$$1,0 - 2 \cdot x_f = 0 \quad \text{et} \quad 3,0 - 6 \cdot x_f = 0$$

La solution de ces deux équations est:

$$x_f = \frac{1}{2} = \frac{3}{6} = 0,5 \text{ mol}$$

Connaissant la valeur de l'avancement final on peut calculer les quantités de matière présentes en fin de réaction:

$$n(\text{Al})_f = 0,0 \text{ mol} \quad n(\text{H}^+)_f = 0,0 \text{ mol} \quad n(\text{H}_2)_f = 1,5 \text{ mol} \quad n(\text{Al}^{3+})_f = 1,0 \text{ mol}$$

On peut ainsi compléter le tableau d'avancement

Equation de la réaction	$2\text{Al}_{(s)} + 6\text{H}^+_{(aq)} \rightleftharpoons 3\text{H}_{2(g)} + 2\text{Al}^{3+}_{(aq)}$			
Etat initial (t=0)	1,0	3,0	0	0
Etat intermédiaire (t)	$1,0 - 2 \cdot x$	$3,0 - 6 \cdot x$	$3 \cdot x$	$2 \cdot x$
Etat final ou expérimental (t _f)	0,0	0,0	1,5	1,0

On constate que l'aluminium $\text{Al}_{(s)}$ et les ions $\text{H}^+_{(aq)}$ ont tous été consommés.

On dira que l'acide chlorhydrique et l'aluminium sont dans des proportions stœchiométriques.

6.4- Cas d'une transformation totale avec disparition de 1 seul des 2 réactifs

Considérons toujours la même réaction entre de l'aluminium $\text{Al}_{(s)}$ et de l'acide chlorhydrique ($\text{H}^+_{(aq)}$, $\text{Cl}^-_{(aq)}$) qui produit du dihydrogène $\text{H}_{2(g)}$ et des ions $\text{Al}^{3+}_{(aq)}$.

On considère le cas où avant la réaction les quantités de matière présentes sont:

$$n(\text{Al})_0 = 2,0 \text{ mol} \quad n(\text{H}^+)_0 = 3,0 \text{ mol} \quad n(\text{H}_2)_0 = 0,0 \text{ mol} \quad n(\text{Al}^{3+})_0 = 0,0 \text{ mol}$$

Dans cet exemple, on ne tiendra pas compte de l'état d'avancement maximal de la réaction

Le tableau d'avancement sera donc le suivant:

Equation de la réaction	$2\text{Al}_{(s)} + 6\text{H}^+_{(aq)} \rightleftharpoons 3\text{H}_{2(g)} + 2\text{Al}^{3+}_{(aq)}$			
Etat initial (t=0)	2,0	3,0	0	0
Etat intermédiaire (t)	$2,0-2.x$	$3,0-6.x$	$3.x$	$2.x$
Etat final ou expérimental (t _f)	$2,0-2.x_f$	$3,0-6.x_f$	$3.x_f$	$2.x_f$

On recherche la plus petite valeur de l'avancement final x_f pour laquelle un des réactifs disparaît.

Pour cela on doit résoudre les deux équations:

$$2,0-2.x_f=0 \quad \text{et} \quad 3,0-6.x_f=0$$

Les solutions de ces deux équations sont:

$$x_f = \frac{2}{2} = 1,0 \text{ mol} \quad \text{et} \quad x_f = \frac{3}{6} = 0,5 \text{ mol}$$

On retient la plus petite de ces deux valeurs, c'est à dire:

$$x_f = 0,5 \text{ mol}$$

Connaissant la valeur de l'avancement final on peut maintenant calculer les quantités de matière présentes en fin de réaction:

$$n(\text{Al})_f = 1,0 \text{ mol} \quad n(\text{H}^+)_f = 0,0 \text{ mol} \quad n(\text{H}_2)_f = 1,5 \text{ mol} \quad n(\text{Al}^{3+})_f = 1,0 \text{ mol}$$

On peut ainsi compléter le tableau d'avancement

Equation de la réaction	$2\text{Al}_{(s)} + 6\text{H}^+_{(aq)} \rightleftharpoons 3\text{H}_{2(g)} + 2\text{Al}^{3+}_{(aq)}$			
Etat initial (t=0)	1,0	3,0	0	0
Etat intermédiaire (t)	$1,0-2.x$	$3,0-6.x$	$3.x$	$2.x$
Etat final ou expérimental (t _f)	1,0	0,0	1,5	1,0

On constate que:

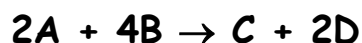
- Les ions $H^+_{(aq)}$ ont tous été consommés.
- Il reste de l'aluminium $Al_{(s)}$ à la fin de la réaction.

On dira que l'acide chlorhydrique est le réactif limitant et que l'aluminium est le réactif en excès.

6.5- Cas d'une transformation limitée

Dans l'état final d'une réaction limitée, aucun des réactifs n'est consommé en totalité.

Considérons la réaction suivante:



Les espèces chimiques **A** et **B** sont des réactifs.

Les espèces chimiques **C** et **D** sont des produits.

Avant la réaction les quantités de matière présentes sont:

$$n(A)_0 = 0,300 \text{ mol} \quad n(B)_0 = 0,500 \text{ mol} \quad n(C)_0 = 0,000 \text{ mol} \quad n(D)_0 = 0,000 \text{ mol}$$

Après la réaction la quantité de matière de l'espèce chimique **B** présente est:

$$n(B)_f = 0,100 \text{ mol}$$

Le tableau d'avancement sera donc le suivant:

Equation de la réaction	2A	+	4B	\rightleftharpoons	C	+	2D
Etat initial (t=0)	0,300		0,500		0,000		0,000
Etat intermédiaire (t)	0,300-2.x		0,500-4.x		x		2.x
Etat final ou expérimental (t _f)	0,300-2.x _f		0,500-4.x _f		x _f		2.x _f
Etat maximum ou théorique (t _{max})	0,300-2.x _{max}		0,500-4.x _{max}		x _{max}		2.x _{max}

Sachant que $n(B)_f = 0,100 \text{ mol}$, on recherche la valeur de l'avancement final x_f .

On aura à l'état final:

$$n(\text{B})_f = 0,500 - 4 \cdot x_f = 0,100 \text{ mol}$$

La valeur de x_f est donc:

$$x_f = \frac{0,500 - 0,100}{4} = 0,100 \text{ mol}$$

A l'état final on aura donc:

$$n(\text{A})_f = 0,100 \text{ mol} \quad n(\text{B})_f = 0,100 \text{ mol} \quad n(\text{C})_f = 0,100 \text{ mol} \quad n(\text{D})_f = 0,200 \text{ mol}$$

Pour trouver l'avancement maximum on doit résoudre les deux équations:

$$0,300 - 2 \cdot x_{\max} = 0 \quad \text{et} \quad 0,500 - 4 \cdot x_{\max} = 0$$

Les solutions de ces deux équations sont:

$$x_{\max} = \frac{0,300}{2} = 0,150 \text{ mol} \quad \text{et} \quad x_{\max} = \frac{0,500}{4} = 0,125 \text{ mol}$$

On retient la plus petite de ces deux valeurs, c'est à dire:

$$x_{\max} = 0,125 \text{ mol}$$

En comparant les valeurs de l'avancement final x_f et de l'avancement maximal x_{\max} , on peut en conclure que la réaction est limitée:

$$0,100 \text{ mol} = x_f < x_{\max} = 0,125 \text{ mol}$$

Connaissant les valeurs de l'avancement final x_f et de l'avancement maximal x_{\max} , on peut calculer le taux d'avancement τ de cette réaction:

$$\tau = \frac{x_f}{x_{\max}} = \frac{0,100}{0,125} = 0,8$$

Soit un taux d'avancement de $\tau = 80\%$.

Le taux d'avancement τ est une grandeur sans dimension traduisant l'avancement d'une transformation chimique.