

AVANCEMENT D'UNE REACTION CHIMIQUE

Prof-TC

www.prof-tc.fr



1 - Quantité de matière

Nombre d'Avogadro: $N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

$$n = \frac{N}{N_A}$$

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

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

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

$$n = C \times V$$

n : Quantité de matière (mol)

N : Nombre d'entité (sans unité)

N_A : Nombre d'Avogadro (mol^{-1})

m : Masse de l'espèce chimique (g)

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

ρ : Masse volumique de la solution (g/L ou g/cm^3)

V : Volume occupée par la solution (L)

V : Volume du gaz (L)

V_m : Volume molaire du gaz (L/mol)

C : Concentration molaire (mol/L ou $\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$)

2 - Réaction chimique et bilan de matière

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

Les transformations peuvent être totales ou non.

Réactifs → Produits

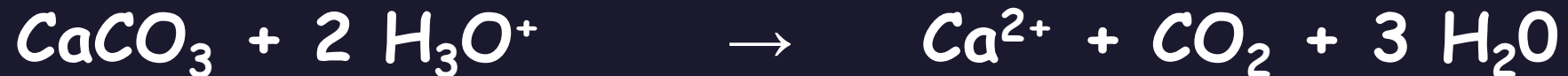
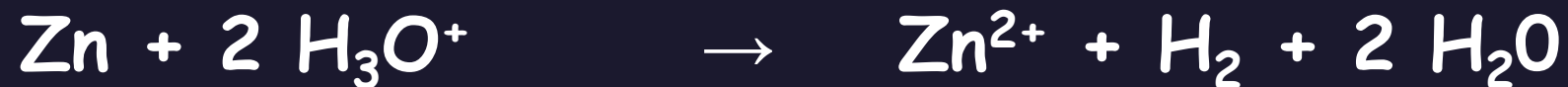
Les espèces qui sont présentes dans l'état initial sont appelées réactifs et leur quantité de matière diminue au cours de la transformation chimique.

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.

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

3 - Quelques exemple de réactions chimiques



4 - 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 $n(\text{O}_2)$.





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

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



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.

5 - Avancement d'une réaction chimique

Considérons l'équation de la réaction chimique suivante:



On notera:

$n(A)_0$, $n(B)_0$, $n(C)_0$ et $n(D)_0$ les quantités de matière initiales

$n(A)_t$, $n(B)_t$, $n(C)_t$ et $n(D)_t$ les quantités de matière à un instant t .

Nous aurons au cours de la la réaction:

$$n(A)_t = n(A)_0 - a.x$$

$$n(B)_t = n(B)_0 - b.x$$

$$n(C)_t = n(B)_0 + c.x$$

$$n(D)_t = n(B)_0 + d.x$$

La valeur de x (mol) s'appelle l'avancement de la réaction. Cette valeur varie de 0 à x_f à l'état final.

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



Lorsque l'avancement est x , alors:

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

Nous aurons au cours de la la réaction:

$$n(\text{Cu}^{2+}_{(\text{aq})})_{\text{t}} = n(\text{Cu}^{2+}_{(\text{aq})})_0 - x$$

$$n(\text{HO}^{-}_{(\text{aq})})_{\text{t}} = n(\text{HO}^{-}_{(\text{aq})})_0 - 2.x$$

$$n(\text{Cu}(\text{OH})_{2(\text{s})})_{\text{t}} = n(\text{Cu}(\text{OH})_{2(\text{s})})_0 + x$$

6 - Avancements final et 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.

7 - 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: $x_f < x_{\max}$

8 - Tableau d'avancement d'une réaction chimique

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

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

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 $x=0$ à $t=0$	1,0	3,0	0	0
Etat intermédiaire $x(t)$ à t	$1,0-2.x$	$3,0-6.x$	$3.x$	$2.x$
Etat final ou expérimental x_f à $t=t_f$	$1,0-2.x_f$	$3,0-6.x_f$	$3.x_f$	$2.x_f$

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:

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

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

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

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

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

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 $x=0$ à $t=0$	2,0	3,0	0	0
Etat intermédiaire $x(t)$ à t	$2,0-2.x$	$3,0-6.x$	$3.x$	$2.x$
Etat final ou expérimental x_f à $t=t_f$	$2,0-2.x_f$	$3,0-6.x_f$	$3.x_f$	$2.x_f$

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:

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

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:

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

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

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

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

11 - Cas d'une transformation limitée

Considérons la réaction suivante:



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:

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

Equation de la réaction	$2A + 4B \rightleftharpoons C + 2D$			
Etat initial $x=0$ à $t=0$	0,300	0,500	0,000	0,000
Etat intermédiaire $x(t)$ à t	$0,300 - 2 \cdot x$	$0,500 - 4 \cdot x$	x	$2 \cdot x$
Etat final ou expérimental x_f à $t=t_f$	$0,300 - 2 \cdot x_f$	$0,500 - 4 \cdot x_f$	x_f	$2 \cdot x_f$
Etat maximum ou théorique x_{\max} à $t=t_{\max}$	$0,300 - 2 \cdot x_{\max}$	$0,500 - 4 \cdot x_{\max}$	x_{\max}	$2 \cdot x_{\max}$

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

$$x_f = 0,100 \text{ mol}$$

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:

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

Les solutions de ces deux équations sont:

$$x_{\text{max}} = 0,150 \text{ mol} \quad \text{et} \quad x_{\text{max}} = 0,125 \text{ mol}$$

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

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

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.

AVANCEMENT D'UNE REACTION CHIMIQUE

Prof-TC

www.prof-tc.fr

