

Avancement et bilan de matière d'une réaction chimique

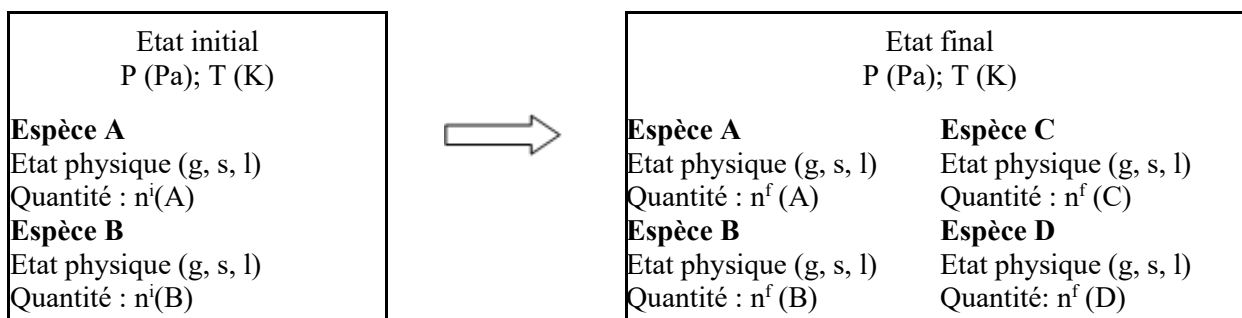
1. Système chimique

Le système chimique est constitué par l'ensemble des espèces chimiques auxquelles on s'intéresse.

Définitions:

- L'état initial correspond à l'état du système à l'instant où les espèces chimiques du système sont mises en contact.
- Le système atteint l'état final lorsque sa composition n'évolue plus.

Exemple: Soit la réaction $a A + b B \rightarrow c C + d D$



2. Stœchiométrie d'une réaction chimique

On appelle stœchiométrie les relations de proportionnalité qui existent entre les quantités de matière consommées des réactifs et entre les quantités de matières formées des produits lors d'une transformation chimique.

3. Fin d'une transformation chimique

- Un cas particulier ; Si tous les réactifs ont été consommés dans l'état final, le mélange de réactifs est dit stœchiométrique.
- Si le mélange n'est pas stœchiométrique, nous supposons, cette année que la réaction s'arrête lorsqu'un des réactifs a été totalement consommé. Ce réactif est appelé réactif limitant. Les autres réactifs sont alors dits en excès.

4. Avancement de la réaction

Définition: L'avancement x est une grandeur qui permet de suivre l'évolution des quantités de matière de réactifs et de produits au cours de la réaction. Il s'exprime en moles.

L'avancement varie de la valeur $x=0$ (système dans l'état initial) à la valeur $x_f = x_{\max}$ (système dans l'état final, attention le fait que $x_f = x_{\max}$ n'est vrai que lorsque la transformation est totale, c'est-à-dire lorsque au moins l'un des réactifs a été entièrement consommé). On peut représenter l'évolution des quantités de matière du système à l'aide d'un tableau d'avancement :

Equation	a A+	b B→	c C+	d D
Etat	Quantité de matière (mol)			
Initial	$n^i(A)$	$n^i(B)$	0	0
ECT	$n^i(A) - a.x$	$n^i(B) - b.x$	$c.x$	$d.x$
Final	$n^i(A) - a. x_{\max}$	$n^i(B) - b. x_{\max}$	$c. x_{\max}$	$d. x_{\max}$

5. Détermination du réactif limitant

Lorsque l'avancement est maximal, au moins l'un des réactifs (le réactif limitant) est entièrement consommé.

On peut alors faire 2 hypothèses et donc écrire:

$$\begin{array}{l} \text{Soit :} \quad n^f(A) = 0 \\ \text{C'est-à-dire que :} \quad n^i(A) - a \cdot x'_{\max} = 0 \\ \text{On en déduit que :} \quad x'_{\max} = n^i(A)/a \end{array} \quad \text{ou} \quad \begin{array}{l} n^f(B) = 0 \\ n^i(B) - b \cdot x''_{\max} = 0 \\ x''_{\max} = n^i(B)/b \end{array}$$

Et finalement le réactif limitant étant celui qui disparaît pour la valeur de l'avancement la plus petite, soit :

$$x_{\max} = \inf(x'_{\max}, x''_{\max})$$

6. Bilan de matière dans l'état final

La valeur de x_{\max} permet d'effectuer le bilan de matière, c'est-à-dire de déterminer la composition du système dans l'état final (on calcule les quantités de matières de chacun des réactifs et produits constituant le système chimique).

7) Exemple : Etude d'une transformation chimique

Un récipient contient initialement 35 moles d'air (7 moles de dioxygène et 28 moles de diazote) et 5 moles de dihydrogène à la température T et la pression P. A l'approche d'une flamme, il y a explosion et apparition de gouttelettes que l'on peut identifier comme de l'eau liquide. Analyser l'évolution de ce système.

a) Le système chimique dans son état initial

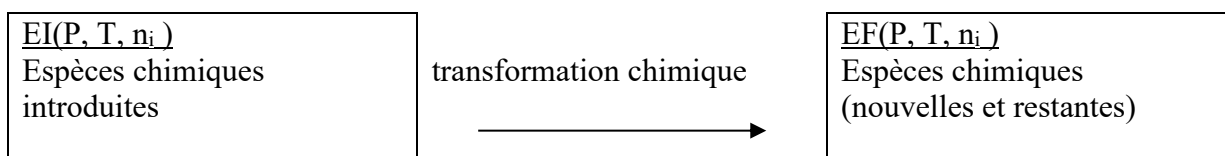
C'est le système avant transformation. L'état du système est défini par l'ensemble des espèces chimiques ici, $O_2(g)$, $N_2(g)$, $H_2(g)$, par leur quantité de matière ainsi que par T et P.

EI (P, T)
7 moles de $O_2(g)$
5 moles de $H_2(g)$
28 moles de $N_2(g)$

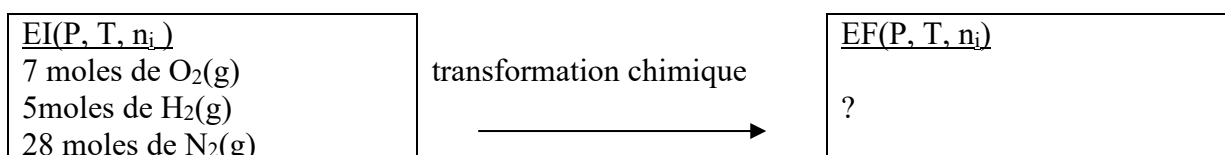
Ce système pris dans un état initial (EI) est susceptible d'évoluer vers un état final (EF) dépendant des conditions expérimentales imposées.

b) La transformation chimique

Le passage du système de l'état initial à l'état final est appelé transformation chimique.



Cette transformation chimique peut être mise en évidence par la modification d'un paramètre physique comme, par exemple, la couleur, le pH, la pression. C'est à ce niveau que l'on peut formuler des hypothèses sur les nouvelles espèces formées, hypothèses que l'on cherchera à valider, si possible, par des tests analytiques. Dans notre exemple, à l'approche d'une flamme, il y a eu explosion et apparition de gouttelettes. Il y a donc eu transformation du système. Mais quelles espèces chimiques nouvelles ont été formées ?



La production d'eau est mise en évidence expérimentalement par le test au sulfate de cuivre anhydre. Comment H_2O s'est-elle formée ?

c) Le modèle de la réaction chimique

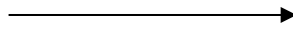
La formation de H₂O a nécessité de transformer des espèces chimiques présentes dans l'état initial et contenant les éléments H et O. Dans notre exemple, il s'agit de O₂(g) et N₂(g). Il faut modéliser le passage des réactifs, O₂(g) et H₂(g), au produit H₂O .

Le modèle est la **réaction chimique**. Les espèces affectées par la transformation, ici H₂ et O₂, sont appelées les **réactifs**. La (ou les) nouvelle(s) espèce(s) formée(s), ici H₂O, est (sont) appelée(s) **produits**.

Réactifs

7 moles de O₂(g)
5 moles de H₂(g)
28 moles de N₂(g)

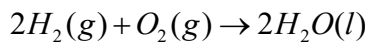
transformation chimique



Produits

n moles de H₂O
28 moles de N₂(g)
+ réactif qui n'a pas été
entièrement consommé

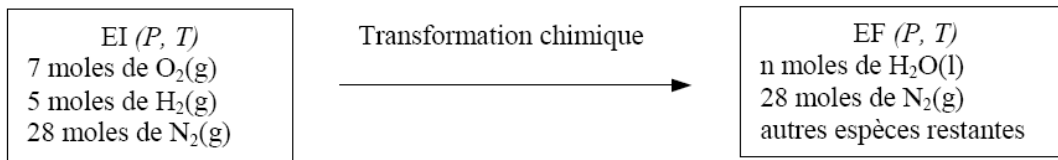
La réaction chimique rend compte de la stœchiométrie avec laquelle disparaissent les réactifs et se forment les produits au cours de l'évolution du système. Son écriture symbolique est appelée *équation chimique* :



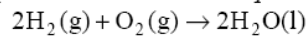
Cette équation respecte les **lois de conservations (éléments et charges)** et nécessite l'ajustement des nombres précédant les symboles chimiques appelés **nombres stœchiométriques**.

Récapitulation

Schématisation de la transformation chimique



Écriture symbolique de la réaction chimique : l'équation chimique



b) L'état du système chimique au cours de la transformation

Nous allons introduire une nouvelle grandeur appelée avancement (noté x et exprimé en mol) pour décrire l'état du système au cours de la transformation chimique. La production de deux moles d'eau s'accompagne de la consommation d'une mole de dioxygène et de deux moles de dihydrogène. Ainsi, si on suppose qu'une quantité de matière x mols de dioxygène est consommée au cours de la transformation jusqu'à l'instant considéré, on déduira que dans le même intervalle de temps une quantité 2x moles de dihydrogène a été consommée et que 2x moles d'eau a été formée.

Le chimiste résume l'ensemble des données formulées sous la forme d'un tableau, que l'on nommera tableau d'avancement :

Equation de la réaction	$O_2(g) + 2H_2(g) \rightarrow 2H_2O(l)$		
Quantité de matière dans l'état initial (mol)	$n^i(O_2)$	$n^i(H_2)$	0
Quantité de matière en cours de transformation (mol)	$n^i(O_2) - x$	$n^i(H_2) - 2x$	2x

c) L'état final du système chimique

L'état final du système, correspondant à un avancement x_{final} , est atteint lorsque la transformation chimique arrive à son terme, c'est-à-dire lorsque l'on a consommation totale d'un des réactifs. Ce réactif est appelé réactif limitant. Dans ces conditions, l'avancement final x_{final} est toujours égal à l'avancement maximal x_{max} . Comment déterminer l'état final du système ?

Au cours de la transformation chimique, x augmente de sorte que les quantités de matière des réactifs diminuent jusqu'à ce que l'une d'elles s'annule. On détermine alors la valeur maximale que peut atteindre x , qui caractérise l'état final, x_{\max} .

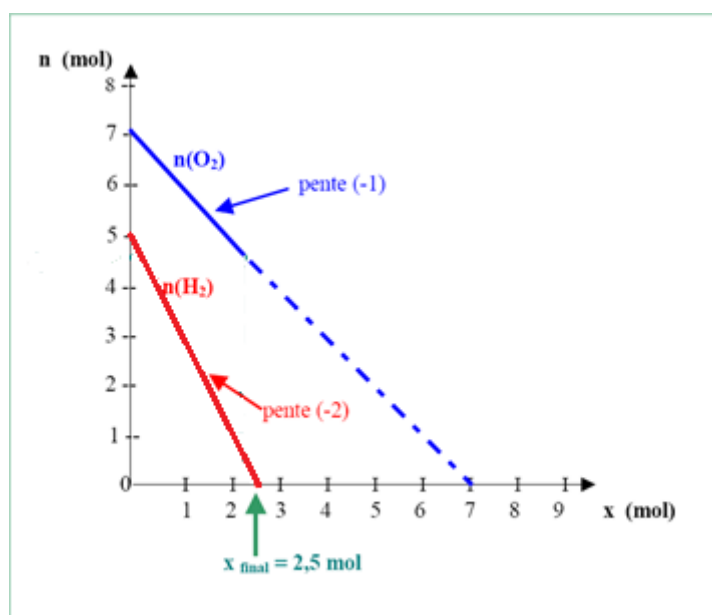
Dans notre exemple :

- si O_2 disparaît le premier alors $n^i(O_2) - x = 0$, ce qui imposerait $x_{\max}' = 7$ mol,
- si H_2 disparaît le premier alors $n^i(H_2) - 2x = 0$, ce qui imposerait $x_{\max}'' = 2,5$ mol.

Ainsi H_2 disparaît le premier et la valeur maximale que peut atteindre l'avancement x_{\max} est : $x_{\text{final}} = 2,5$ mol. On peut alors en déduire très simplement l'état final du système chimique après transformation et compléter le tableau comme suit :

Equation de la réaction							
		$O_2(g)$	+	$2H_2(g)$	\rightarrow	$2H_2O(l)$	
Etat	Avancement (mol)	Quantité de matière (mol)					
EI	$x=0$	$n^i(O_2)$	$n^i(H_2)$	0			
ECT	x	$n^i(O_2) - x$	$n^i(H_2) - 2x$	$2x$			
EF	$x_{\text{final}} = x_{\max} = 2,5$	$n^i(O_2) - x_{\max} = 4,5$	$n^i(H_2) - 2x_{\max} = 0$	$2x_{\max} = 5$			

On peut visualiser graphiquement l'évolution des quantités de matière du système en fonction de l'avancement :



3) Remarque : cas d'un mélange particulier

Supposons que dans l'état initial, on ait à présent 6 moles de H_2 et 15 moles d'air, soient 3 moles de O_2 . Le tableau d'avancement devient :

Equation de la réaction				
$O_2(g) + 2H_2(g) \rightarrow 2H_2O(l)$				
Etat	Avancement (mol)	Quantité de matière (mol)		
EI	$x=0$	$n^i(O_2)$	$n^i(H_2)$	0
ECT	x	$n^i(O_2)-x$	$n^i(H_2)-2x$	$2x$
EF	$x_{final} = x_{max}$	$n^i(O_2)-x_{max} = 0$	$n^i(H_2)-2x_{max} = 0$	$2x_{max} = 3$

Ce cas particulier est appelé mélange stœchiométrique.

La représentation graphique correspondante est alors :

