

Étude de l'évolution d'un système chimique

1. L'avancement d'une réaction chimique

L'avancement d'une réaction chimique est une grandeur variable notée x , exprimée en moles, et qui permet de déterminer les quantités de matière de réactifs transformés et de produits formés.

Dans l'état initial, $x=0$ mol. Puis l'avancement x augmente au cours de la transformation chimique jusqu'à atteindre x_f dans l'état final.

En cours de transformation, l'avancement du système vaut x . La quantité de matière de chaque réactif et de chaque produit dépend des nombres stœchiométriques de l'équation chimique et des quantités de matières initiales.

Réaction totale : $A + B \rightarrow C + D$

Si une réaction est totale, au moins un des réactifs est épuisé à la fin de la réaction : l'avancement final de la réaction est maximal ; ainsi $x_f = x_{\max}$.

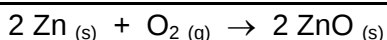
Réaction limitée : $A + B \rightarrow C + D$

Si une réaction est non totale c'est à dire limitée, à l'état final, lorsque la réaction est terminée, aucun réactif n'est épuisé : ainsi l'avancement final de la réaction est inférieur à l'avancement maximal $x_f < x_{\max}$.

2. Réactif limitant, réactif en excès

Un réactif limitant est un réactif dont la quantité de matière est nulle à l'état final. Les autres réactifs sont dits en excès.

3. Tableau d'avancement d'une réaction chimique totale : exemple de la combustion du zinc



On introduit 2,6 g de zinc dans un flacon contenant 1,2 L de dioxygène.

$$V_m = 24 \text{ L} \cdot \text{mol}^{-1} \quad M(\text{Zn}) = 65,4 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$$

	avancement	$2 \text{Zn}_{(s)} +$	$\text{O}_{2(g)} \rightarrow$	$2 \text{ZnO}_{(s)}$
Quantité de matière dans l'état initial (mol)	0	$n_0(\text{Zn})$	$n_0(\text{O}_2)$	0
Quantité de matière en cours de transformation (mol)	x	$n_f(\text{Zn}) = n_0(\text{Zn}) - 2x$	$n_f(\text{O}_2) = n_0(\text{O}_2) - x$	$n_f(\text{ZnO}) = 2x$
Quantité de matière dans l'état final (mol)	$x_f = x_{\max}$	$n_f(\text{Zn}) = n_0(\text{Zn}) - 2x_{\max}$	$n_f(\text{O}_2) = n_0(\text{O}_2) - x_{\max}$	$n_f(\text{ZnO}) = 2x_{\max}$

$$n_0(\text{Zn}) = m(\text{Zn}) / M(\text{Zn})$$

$$n_0(\text{Zn}) = 2,6 / 65,4 = 4,0 \cdot 10^{-2} \text{ mol}$$

$$n_0(\text{O}_2) = V(\text{O}_2) / V_m$$

$$n_0(\text{O}_2) = 1,2 / 24 = 5,0 \cdot 10^{-2} \text{ mol}$$

L'avancement maximal d'une réaction $x_{\max}$ est la plus petite valeur de l'avancement x pour laquelle la quantité de matière d'un des réactifs devient nulle (réactif limitant).

hypothèse 1: Zn limitant

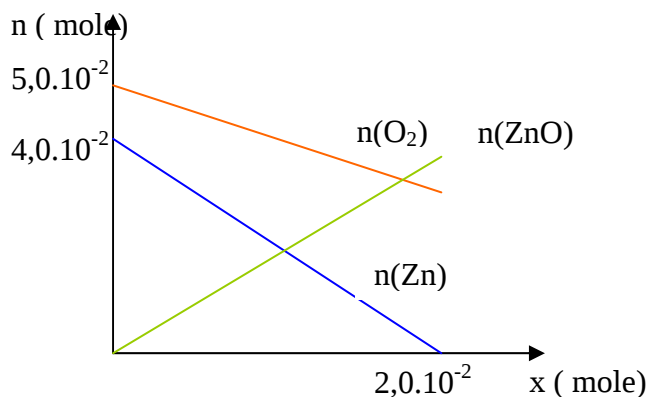
$$n_f(\text{Zn}) = n_0(\text{Zn}) - 2x_{\max} = 4,0 \cdot 10^{-2} - 2x_{\max} = 0 \quad x_{\max} = 2,0 \cdot 10^{-2} \text{ mol}$$

ou

hypothèse 2: O_2 limitant

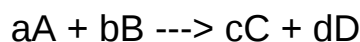
$$n_f(\text{O}_2) = n_0(\text{O}_2) - x_{\max} = 5,0 \cdot 10^{-2} - x_{\max} = 0 \quad x_{\max} = 5,0 \cdot 10^{-2} \text{ mol}$$

donc $x_{\max} = 2,0 \cdot 10^{-2} \text{ mol}$ car c'est le plus petit donc c'est bien **Zn le réactif limitant** donc $n_f(\text{Zn}) = 0$



On peut généraliser :

pour une réaction totale :



A est limitant si : $\frac{n_0(A)}{a} < \frac{n_0(B)}{b}$

B est limitant si : $\frac{n_0(A)}{a} > \frac{n_0(B)}{b}$

3. Proportions stœchiométriques

Les réactifs ont été introduits à l'état initial dans les proportions stœchiométriques lorsque tous les réactifs **sont épuisés** à la fin de la réaction, **tous les réactifs sont limitants**.

Les réactifs ont été introduits dans les proportions correspondantes aux nombres stœchiométriques des réactifs (ex ci-dessous : 2 fois plus de Zn que de O₂)

Suite de l'exemple : si maintenant on introduit 0,10 mol de zinc dans le flacon :

	avancement	2 Zn _(s) +	O _{2 (g)} →	2 ZnO _(s)
Quantité de matière dans l'état initial (mol)	0	n ₀ (Zn)	n ₀ (O ₂)	0
Quantité de matière en cours de transformation (mol)	x	n _f (Zn) = n ₀ (Zn) - 2x	n _f (O ₂) = n ₀ (O ₂) - x	n _f (ZnO) = 2x
Quantité de matière dans l'état final (mol)	x _f =x _{max}	n _f (Zn) = n ₀ (Zn) - 2 x _{max}	n _f (O ₂) = n ₀ (O ₂) - x _{max}	n _f (ZnO) = 2 x _{max}

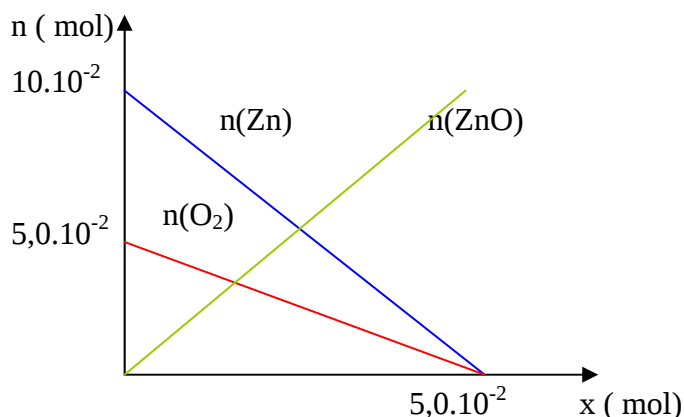
n₀(Zn)=1,0.10⁻¹ mol et n₀(O₂)=5,0.10⁻² mol

n_f(Zn) = n₀(Zn) - 2 x_{max} = 0,10 - 2 x_{max} = 0 x_{max}=5,0.10⁻² mol

ou

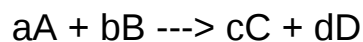
n_f(O₂) = n₀(O₂) - x_{max} = 5,0.10⁻² - x_{max} = 0 x_{max}=5,0.10⁻² mol donc x_{max}=5,0.10⁻² mol

Les 2 réactifs sont limitants on est dans les proportions stœchiométriques



On peut généraliser :

pour une réaction totale :



les réactifs sont introduits dans les proportions stœchiométriques si :

$$\frac{n_0(A)}{a} = \frac{n_0(B)}{b}$$

4. Bilan de matière :

Réaliser un bilan de matière consiste à déterminer les quantités de matière des réactifs et produits à la fin de la réaction. Pour cela on réalise un tableau d'avancement.

Pour une réaction limitée (non totale) il est nécessaire de connaître x_f pour réaliser ce bilan.

Pour une réaction totale, il faut au préalable déterminer le réactif limitant.