

Chapitre 3

Évolution d'un système chimique

1. Établissement d'un tableau d'avancement

1.1 - Description qualitative d'un système en réaction

Une transformation chimique est modélisée par une réaction dont l'équation est ajustée par les nombres stœchiométriques.

Au cours de l'évolution d'un système chimique, les quantités des réactifs diminuent et les quantités des produits augmentent.

Exemple

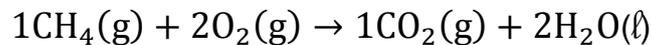
Au cours de la réaction entre l'ion cuivre (II) Cu^{2+} et l'ion hydroxyde HO^- , d'équation : $\text{Cu}^{2+}(\text{aq}) + 2\text{HO}^-(\text{aq}) \rightarrow \text{Cu}(\text{OH})_2(\text{s})$, les quantités d'ion cuivre (II) et d'ion hydroxyde diminuent, celle en hydroxyde de cuivre $\text{Cu}(\text{OH})_2(\text{s})$ augmente.

1.2 - Notion d'avancement

La stœchiométrie d'une réaction chimique impose des relations dans les variations des quantités de matière des réactifs et des produits.

Exemple

L'équation de réaction de combustion du méthane s'écrit :



Lorsqu'une quantité $1x$ de dioxyde de carbone se forme, alors il se forme simultanément une quantité $2x$ d'eau et des quantités $1x$ de méthane et $2x$ de dioxygène sont simultanément consommées.

Si le système est initialement constitué d'une quantité $n_{1,i}$ de méthane et $n_{2,i}$ de dioxygène, les quantités de chacune des espèces s'expriment, pour un état d'avancement donné, par les relations littérales suivantes :

• Pour les réactifs :

$$n(\text{CH}_4) = n_{1,i} - 1x \quad \text{et} \quad n(\text{O}_2) = n_{2,i} - 2x$$

• Pour les produits :

$$n(\text{CO}_2) = 0 + 1x \quad \text{et} \quad n(\text{H}_2\text{O}) = 0 + 2x$$

La grandeur x est l'avancement de la transformation modélisée par l'équation de la réaction, plus souvent appelée avancement de la réaction ; l'avancement s'exprime en mole dans le Système international d'unités.

1.3 - Tableau d'avancement

Les informations précédentes sont rassemblées dans un tableau, appelé tableau d'avancement.

Chaque ligne décrit la composition du système dans un état d'avancement donné, lui-même caractérisé par une valeur d'avancement x (nulle à l'état initial et notée x_f à l'état final).

2. Exploitation d'un tableau d'avancement

2.1 - Composition finale d'un système pour une transformation considérée comme totale

Pour une transformation considérée comme totale, l'avancement final x_f atteint une valeur maximale, notée x_{\max} , correspondant à l'épuisement du (ou des) réactif(s) limitant(s).

Méthode de détermination de x_{\max} sur l'exemple de la combustion du méthane

• Si le méthane est le réactif limitant, alors sa quantité de matière est nulle à l'état final, donc :

$$n_{1,i} - 1x_{\max,1} = 0 \text{ soit } x_{\max,1} = \frac{n_{1,i}}{1}$$

• Si le dioxygène est le réactif limitant, alors sa quantité de matière est nulle à l'état final, donc :

$$n_{2,i} - 2x_{\max,2} = 0 \text{ soit } x_{\max,2} = \frac{n_{2,i}}{2}$$

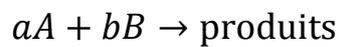
L'avancement maximal x_{\max} est la plus petite des deux valeurs calculées entre

$\left\{ \frac{n_{1,i}}{1}; \frac{n_{2,i}}{2} \right\}$ afin que toutes les quantités de matière dans l'état final soient positives

ou nulles.

Remarque

Cette méthode de détermination du réactif limitant généralise celle vue en Seconde pour une réaction d'équation :



En notant les quantités de matière initiales des réactifs A et B respectivement $n_{A,i}$ et $n_{B,i}$, alors :

• si $\frac{n_{A,i}}{n_{B,i}} > \frac{a}{b}$, le réactif B est limitant ;

• si $\frac{n_{A,i}}{n_{B,i}} < \frac{a}{b}$, le réactif A est limitant.

Généralisation

Lorsque N réactifs sont mis en présence, chaque réactif R_k ayant pour nombre stœchiométrique a_k et pour quantité initiale $n_{k,i}$, alors x_{\max} est la plus petite valeur

parmi $\left\{ \frac{n_{1,i}}{a_1}; \frac{n_{2,i}}{a_2}; \dots; \frac{n_{N,i}}{a_N} \right\}$.

Une fois la valeur de x_{\max} déterminée, la dernière ligne du tableau d'avancement fournit, pour $x_f = x_{\max}$, la composition du système à l'état final dans le cas d'une transformation considérée comme totale.

2.2 - Mélange stœchiométrique

Lorsque tous les réactifs sont limitants et qu'il n'en reste donc plus aucun à l'état final d'une transformation considérée comme totale, le mélange est dit stœchiométrique. Dans ce cas, les réactifs ont été introduits à l'état initial dans les proportions du rapport de leurs nombres stœchiométriques, c'est-à-dire :

$$\frac{n_{1,i}}{a_1} = \frac{n_{2,i}}{a_2} = \dots = \frac{n_{N,i}}{a_N}$$

2.3 - Transformation non totale

Pour certaines transformations, l'avancement final x_f expérimentalement déterminé est inférieur à l'avancement maximal x_{\max} qui aurait été atteint si la transformation avait été totale : $x_f < x_{\max}$.

La transformation est alors dite non totale.

Exemple

L'équation de dissolution du chlorure de sodium dans l'eau s'écrit

$\text{NaCl(s)} \rightarrow \text{Na}^+(\text{aq}) + \text{Cl}^-(\text{aq})$. La concentration maximale en quantité de sel dissous est $c_{\max} = 6 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$. Ainsi, lorsqu'à l'état initial, la quantité de sel est de 7 moles et qu'il y a une quantité suffisante d'eau pour fabriquer 1 L de solution, alors

à l'état final, le milieu contient 6 moles d'ion sodium, 6 moles d'ion chlorure et il reste 1 mole de chlorure de sodium solide. Ainsi $x_f < x_{\max}$ car $6 \text{ mol} < 7 \text{ mol}$.