Suivi d'une transformation chimique-Tableau d'avancement

Mots clés :
transformation chimique ; réaction chimique ; quantité de matière ; avancement de la réaction ; état initial ; état final ; avancement final ; avancement maximal ; mélange stœchiométrique ; ...

I- La transformation chimique.

1)- Description d'un système chimique.

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

Pour décrire un système chimique, il faut préciser :

- La nature, la quantité de matière et l'état physique (solide, liquide ou gazeux) des différentes espèces chimiques qui constituent le système.
- Les conditions de température **T** et de pression **p**.
- Définition : un système subit une transformation chimique si la nature et (ou) la quantité de matière des espèces chimiques sont différentes à l'état initial et à l'état final.
- Exemple : Une solution d'acide chlorhydrique ($H^+_{(aq)} + Cl^-_{(aq)}$) réagit avec le magnésium métal.
- On observe un dégagement gazeux de dihydrogène (H_2) et il se forme des ions $Mg^{2+}_{(aq)}$.

	État initial (E.I)	Transformation chimique	État final (E.F)
Espèces chimiques	**p** = 1013 hPa **θ** = 20 °C		**p** = 1013 hPa **θ** = 20 °C
$H^+_{(aq)}$	$n_i(H^+)$ =		$n_f(H^+)$ = ?
$Mg_{(s)}$	$n_i(Mg)$ =		$n_f(Mg)$ = ?
$n_f(H_2)$	$n_i(H_2)$ = 0 mol	→	$n_f(H_2)$ = ?
$Mg^{2+}_{(aq)}$	$n_i(Mg^{2+})$ = 0 mol		$n_f(Mg^{2+})$ = ?
$Cl^-_{(aq)}$	$n_i(Cl^-)$		$n_f(Cl^-) = n_i(Cl^-)$
$H_2O_{(\ell)}$	Large excès : Solvant		Solvant

- Lors de la réaction, les ions chlorure sont des ions spectateurs, il ne participe pas à la réaction. D'autre part, l'eau est le solvant, il est en large excès. On ne fera pas de calcul sur l'eau.

2)- La réaction chimique et son équation.

- La réaction chimique rend compte, à l'échelle macroscopique de l'évolution d'un système subissant une transformation.
- On représente la réaction chimique par une équation.
- On note à gauche la formule des réactifs et à droite la formule des produits.
- Entre les réactifs et les produits, une flèche indique le sens d'évolution du système.

Réactifs → Produits

- Exemple : réaction antre l'acide chlorhydrique et le magnésium :

$$Mg_{(s)} + 2\,H^+_{(aq)} \rightarrow Mg^{2+}_{(aq)} + H_{2\,(g)}$$

- Le coefficient place devant chaque espèce chimique est appelé ; nombre stœchiométrique.
- Il faut ajuster les nombres stœchiométriques afin de respecter la conservation des éléments chimiques et la conservation de la charge électrique.
- Par convention, on n'écrit pas le nombre stœchiométrique 1.
- Les nombres stœchiométriques nous renseignent sur les proportions en quantités de matière.

- Traduction de la réaction précédente :
- 1 mole de magnésium réagit avec 2 moles d'ions hydrogène pour donner 1 mole d'ions magnésium et 1 mole de dihydrogène gazeux.

II- Évolution des quantités de matière au cours d'une transformation chimique.

1)- Étude d'un exemple.

a- Exemple : la combustion du propane dans le dioxygène donne du dioxyde de carbone et de l'eau. On fait brûler $\mathbf{n_1}$ = 1,0 mole de propane dans $\mathbf{n_2}$= 3,0 moles de dioxygène. Les conditions de températures et de pression sont les suivantes:**p**=1013 hPa et **θ**=20 °C.

Formule du propane $\mathbf{C_3H_8}$

- Donner l'état initial du système chimique.
- Donner l'état final du système chimique obtenu lorsque la réaction est finie.

b- État initial du système.

Etat initial (E.I)
p = 1013 hPa **θ** = 20 °C
$\mathbf{n_i(C_3H_8) = n_1}$ = 1,0 mol
$\mathbf{n_i(O_2) = n_2}$ = 3,0 mol
$\mathbf{n_i(CO_2)}$ = 0,0 mol
$\mathbf{n_i(H_2O)}$ = 0,0 mol

- Pour donner l'état final du système chimique, il faut utiliser l'équation de la transformation chimique et réaliser un tableau d'avancement de la réaction.
- Équation de la réaction :

$$\mathbf{C_3H_{8\,(g)} + 5\,O_{2\,(g)} \rightarrow 3\,CO_{2\,(g)} + 4\,H_2O_{(l)}}$$

- Traduction : 1 mole de propane réagit avec 5 moles de dioxygène pour donner 3 moles de dioxyde de carbone et 4 moles d'eau.

c- Avancement d'une réaction chimique : **x** (mol).

- L'avancement **x** d'une transformation chimique est une grandeur exprimée en mole qui permet de décrire l'état du système au cours de la transformation.
- Il permet d'exprimer les quantités de matière de réactifs et de produits présents dans le système chimique à chaque instant.
- L'avancement **x** est une quantité de matière. Elle s'exprime en mol.
- Dans l'état initial, **x** = 0,
- Au cours de la transformation, $0 \leq x \leq x_{max}$
- À l'état final : $\mathbf{x = x_{max}}$ (ceci au niveau de la classe de seconde).

d- Tableau d'avancement de la réaction :

Équation		$C_3H_{8\,(g)}$	+ $5\,O_{2\,(g)}$	→	$3\,CO_{2\,(g)}$	+ $4\,H_2O_{(l)}$
État u système	**Avancement**					
État initial (mol)	**x** = 0	n_1 = 1,0 mol	n_2 = 3,0 mol		0,0	0,0
Au cours de la transformation	**x**	1,0 - **x**	3,0 – 5 **x**		3 **x**	4 **x**
État final (mol)	$x = x_{max}$	$1,0 - x_{max}$	$3,0 - 5\,x_{max}$		$3\,x_{max}$	$4\,x_{max}$

e- Réactif limitant et avancement maximal.

- L'avancement maximal $\mathbf{x_{max}}$ s'obtient en écrivant que les quantités de matière des réactifs restent positives ou nulles.
- Il permet de déterminer l'état final de la transformation.

- En général, la réaction s'arrête lorsque l'un des réactifs a été totalement consommé.
- À l'état final, la quantité de matière du réactif limitant est nulle.
- Il se peut que lorsque la réaction s'arrête, tous les réactifs soient entièrement consommés.
- On dit qu'initialement, les réactifs étaient dans les proportions stœchiométriques.
- Comment peut-on déterminer la valeur maximale de **x** : $\mathbf{x}_{max}$?
- En fin de réaction, la quantité de matière de chaque réactif est soit positive, soit nulle.
- En conséquence, on peut écrire deux inéquations :

$1 - x \geq 0$		$1 \geq x \geq 0$		
$x \geq 0$	$\Rightarrow$	et	$\Rightarrow$	$0,6 \geq x \geq 0$
$3 - 5x \geq 0$		$3 \geq 5x \geq 0$		

- En conséquence, l'avancement **x** peut varier entre 0 et 0,6 mol.
- L'avancement maximal : $\mathbf{x}_{max} = 0,6$ mol.
- Le réactif limitant est celui qui disparaît totalement c'est-à-dire celui dont la quantité de matière s'annule pour la plus faible valeur de **x**.
- L'avancement est maximal lorsque le réactif limitant a totalement disparu : $\mathbf{x}_{max}$ est la plus petite valeur de **x** pour laquelle la quantité de matière de l'un des réactifs devient nulle.
- Lorsque la valeur de $\mathbf{x}_{max}$ est connue, on peut déterminer les quantités de matière des différentes espèces chimiques dans l'état final du système.
- Il suffit pour cela de rajouter une ligne au tableau.

Équation		$C_3H_{8\,(g)}$	$+\ 5\,O_{2\,(g)}$	$\rightarrow$	$3\ CO_{2\,(g)}$	$+\ 4\,H_2O_{(l)}$
État u système	**Avancement**					
État initial (mol)	$x = 0$	$n_1 = 1$ mol	$n_2 = 3$ mol		0	0
Au cours de la transformation	x	$1,0 - x$	$3,0 - 5x$		$3x$	$4x$
État final (mol)	$x = x_{max}$	$1,0 - x_{max}$	$3,0 - 5x_{max}$		$3x_{max}$	$4x_{max}$
	$x_{max} = 0,6$ mol	0,40 mol	0,0 mol		1,8 mol	2,4 mol

f- État final du système :

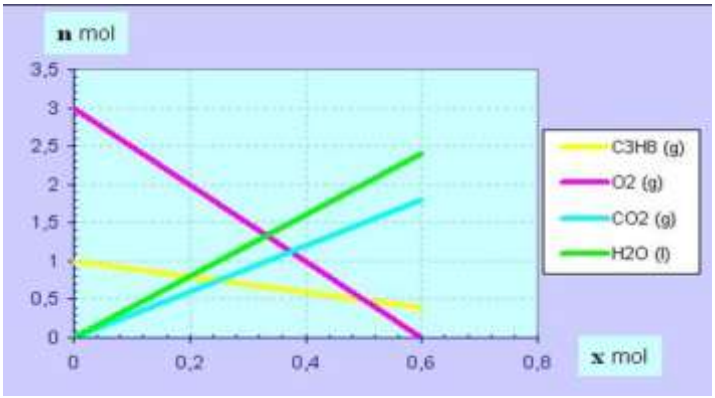
Etat Final (E.F)
$p = 1013$ hPa $\theta = 20$ °C
$n_f(C_3H_8) = 0,40$ mol
$n_f(O_2) = 0,0$ mol
$n_f(CO_2) = 1,8$ mol
$n_f(H_2O) = 2,4$ mol

2- Autre méthode pour la détermination de la valeur de x_{max}.

- On peut déterminer $\mathbf{x}_{max}$ en traçant les droites représentant les variations des quantités de matière des réactifs en fonction de l'avancement **x** de la réaction.
- Dans le cas précédent :

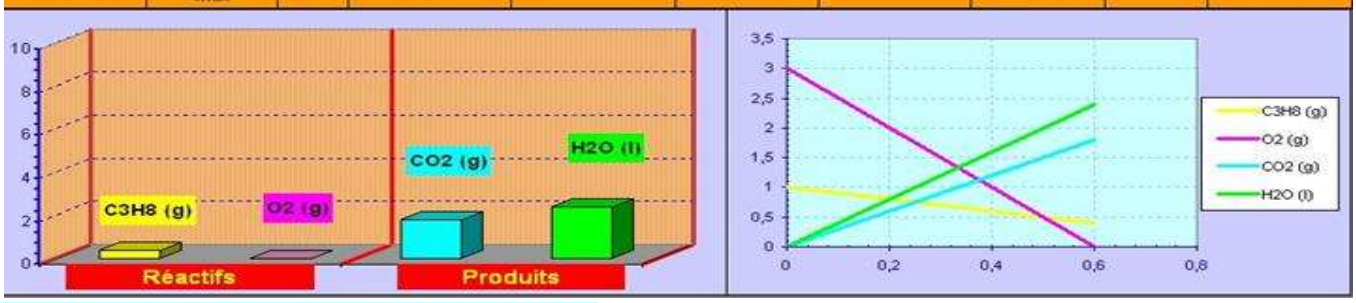
$n(C_3H_8) = 1 - x$
$n_f(O_2) = 3 - 5x$

- Les deux droites coupent l'axe horizontal et $\mathbf{x}_{max}$ est égal à la plus petite abscisse des deux points d'intersection.
- Graphe : on peut montrer l'évolution du système grâce à un tableur : ici Excel.



Retour	Démarrer la réaction	1 Réactif 1	5 Réactif 2	3 Produit 1	4 Produit 2
		C_3H_8 (g)	+ 5 O_2 (g)	→ 3 CO_2 (g)	+ 4 H_2O (ℓ)
Etat du Système	Avancement	Quantité de matière du réactif 1 (mol)	Quantité de matière du réactif 2 (mol)	Quantité de matière du produit 1 (mol)	Quantité de matière du produit 2 (mol)
ETAT INITIAL	X = 0,000	1,000	3,000	0,000	0,000
Au cours de la transformation	X = 0,600	0,400	0,000	1,800	2,400
		1-1X=0,4	3-5X=0	3X=1,8	4X=2,4
ETAT FINAL	X_{max} = 0,600	0,400	0,000	1,800	2,400

REACTIF EN EXCES : 1 — REACTIF LIMITANT : 2

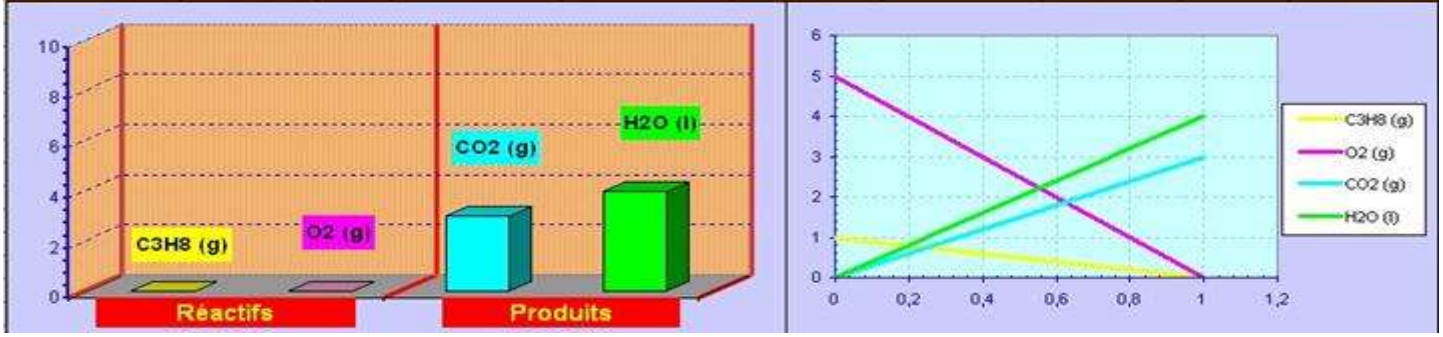


3)- Cas particulier : Le mélange stœchiométrique.

- Dans certains cas, à la fin de la réaction, tous les réactifs ont été entièrement consommés. On dit que dans l'état initial, les réactifs ont été introduits dans les proportions stœchiométriques : le mélange est stœchiométrique.
- Mélange stœchiométrique de propane et de dioxygène : on parle de mélange détonant.
- Graphe :

Retour	Démarrer la réaction	1 Réactif 1	5 Réactif 2	3 Produit 1	4 Produit 2
		C_3H_8 (g)	+ 5 O_2 (g)	→ 3 CO_2 (g)	+ 4 H_2O (ℓ)
Etat du Système	Avancement	Quantité de matière du réactif 1 (mol)	Quantité de matière du réactif 2 (mol)	Quantité de matière du produit 1 (mol)	Quantité de matière du produit 2 (mol)
ETAT INITIAL	X = 0,000	1,000	5,000	0,000	0,000
Au cours de la transformation	X = 1,000	0,000	0,000	3,000	4,000
		1-1X=0	5-5X=0	3X=3	4X=4
ETAT FINAL	X_{max} = 1,000	0,000	0,000	3,000	4,000

Mélange stoechiométrique — Mélange stoechiométrique



4)- Le bilan de matière.

- Le bilan de matière d'une transformation chimique donne les quantités de matière des réactifs restants et des produits obtenus à l'état final.
- À partir de ces quantités de matière, on peut calculer des masses, des concentrations des volumes, des pressions.

III- Applications.

1)- Bilan de matière et volume de gaz formé.

- Énoncé : Le zinc réagit avec l'acide chlorhydrique pour donner un dégagement gazeux de dihydrogène et des ions $Zn^{2+}_{(aq)}$ en solution aqueuse.
- On fait réagir un volume V_1 = 20,0 mL d'acide chlorhydrique de concentration C_1 = 5,00 mol / L avec une masse **m** = 0,11 g de zinc solide
- On précise que les ions chlorure sont des ions spectateurs et que dans les conditions de l'expérience, le volume molaire V_m = 24 ,3 L / mol.
- Données : masse molaire du zinc : **M (Zn)** = 65,4 g / mol.
- Faire un bilan de matière et calculer le volume **V** de dihydrogène obtenu dans les conditions de l'expérience.
- Comment aborder cet exercice ?
- Les différentes étapes :

1. Écrire l'équation de la réaction.
2. Donner l'état initial du système et calculer les quantités de matière des différents réactifs.
3. Dresser un tableau d'avancement de la réaction.
4. Déterminer la valeur de x_{max}.
5. Faire le bilan de matière et calculer le volume de dihydrogène obtenu

- Résolution :
- Équation de la réaction :

$$Zn_{(s)} + 2H^+_{(aq)} \rightarrow Zn^{2+}_{(aq)} + H_{2(g)}$$

- État initial et quantité de matière :

État initial (E.I)
Les conditions ne sont pas précisées dans l'énoncé **p** = ? **θ** = ?
$n_i(Zn) = \frac{m}{M(Zn)} \Rightarrow n_i(Zn) = \frac{0,11}{65,4}$ $n_i(Zn) \approx 1,7 \times 10^{-3}$ mol
$n_i(H^+) = C_1 . V_1$ $n_i(H^+) = 5,00 \times 20,0 \times 10^{-3}$ $n_i(H^+) = 0,10$ mol
$n_i(H_2) = 0,0$ mol
$n_i(Zn^{2+}) = 0,0$ mol

- Tableau d'avancement de la réaction.

Équation		$Zn_{(s)}$	$+ 2H^+_{(aq)}$	→	$Zn^{2+}_{(aq)}$	$+ H_{2(g)}$
État u système	**Avancement**	mol	mol		mol	mol
État initial (mol)	**x = 0**	$n_i(Zn) = 1,7 \times 10^{-3}$	$n_i(H^+) = 0,10$		0	0
Au cours de la transformation	**x**	$1,7 \times 10^{-3} - x$	$0,10 - 2x$		**x**	**x**
État final (mol)	$x = x_{max}$	$1,7 \times 10^{-3} - x_{max}$	$0,10 - 2x_{max}$		x_{max}	x_{max}
	x_{max}=					

- Pour compléter le tableau, il faut déterminer la valeur de x_{max}.
- On peut calculer les deux valeurs de x_{max} en résolvant les deux équations suivantes

HYPOTHÈSE 1 :	$1,7 \times 10^{-3} - x_{max1} = 0$
	$0,10 - 2\,x_{max2} = 0$

- La valeur retenue pour x_{max} est la plus faible des deux valeurs.

$1,7 \times 10^{-3} - x_{max} = 0$	⇒	$x_{max1} = 1,7 \times 10^{-3}$ mol	⇒	$x_{max} = x_{max1} = 1,7 \times 10^{-3}$ mol
$0,10 - 2\,x_{max} = 0$		$x_{max2} = 0,050$ mol		

- Maintenant, on peut compléter le tableau et donner l'état final du système.

Équation		$Zn_{(s)}$	$+\ 2\,H^+_{(aq)}$	→	$Zn^{2+}_{(aq)}$	$+\ H_{2\,(g)}$
État u système	**Avancement**	mol	mol		mol	mol
État initial (mol)	**x = 0**	$n_i(Zn) = 1,7 \times 10^{-3}$	$n_i(H^+) = 0,10$		0	0
Au cours de la transformation	**x**	$1,7 \times 10^{-3} - x$	$0,10 - 2\,x$		**x**	**x**
État final (mol)	$x = x_{max}$	$1,7 \times 10^{-3} - x_{max}$	$0,10 - 2\,x_{max}$		x_{max}	x_{max}
	$x_{max} =$					

- Le zinc métal est le réactif limitant. La réaction s'arrête lorsqu'il est totalement consommé.
- Volume de dihydrogène obtenu en fin de réaction :

$$V = x_{max} \cdot V_m$$
$$V = 1,7 \times 10^{-3} \times 24,3$$
$$V \approx 4,1 \times 10^{-2}\ L$$
$$V \approx 41\ mL$$

2)- Bilan de matière et pression du gaz formé.

- Énoncé : L'acide chlorhydrique réagit avec le carbonate de calcium (**$CaCO_3$**) pour donner du dioxyde de carbone, de l'eau et des ions calcium (**Ca^{2+}**) en solution aqueuse. Les ions chlorure sont des ions spectateur et l'eau est le solvant. La réaction se fait à température constante. On donne les caractéristiques de l'état initial du système.
- On donne : **M (C)** = 12,0 g / mol ; **M (O)** = 16,0 g / mol ; **M (Ca)** = 40,1 g / mol

	État initial (E.I)
Espèces chimiques	**p** = 1020 hPa **θ** = 20 °C
$H^+_{(aq)}$	**$[H^+]_i$ = 0,50 mol / L** **V = 40 mL**
$CaCO_{3\,(s)}$	**$m_i(CaCO_3)$ = 0,80 g**
$Cl^-_{(aq)}$	**Ions spectateur**
$H_2O_{(\ell)}$	Large excès : Solvant

- On recueille dans un récipient de volume **V'** = 1,1 L le dioxyde de carbone par déplacement de liquide sur la cuve à eau.
- Déterminer la valeur de la pression **p'** du dioxyde de carbone dans le récipient.
- Équation de la réaction :

$$CaCO_{3\,(s)} + 2\,H^+_{(aq)} \rightarrow Ca^{2+}_{(aq)} + CO_{2\,(g)} + H_2O_{(\ell)}$$

- Quantités de matière :

Quantité de matière de carbonate de calcium :

$$n_i(CaCO_3) = \frac{m}{M(CaCO_3)} \Rightarrow n_i(CaCO_3) = \frac{0,80}{100,1}$$

$$n_i(CaCO_3) \approx 8,0 \times 10^{-3}\ mol$$

Quantité de matière d'ions hydrogène

$n_i(H^+) = C_1 \cdot V_1$

$n_i(H^+) = 0{,}50 \times 40{,}0 \times 10^{-3}$

$n_i(H^+) = 2{,}0 \times 10^{-2}$ mol

- Tableau d'avancement de la réaction.

Équation		$CaCO_{3(s)}$	$+ 2H^+_{(aq)}$	→	$Ca^{2+}_{(aq)}$	$+ CO_{2(g)}$	$+ H_2O_{(\ell)}$
État du système	**Avanc.**						
État initial (mol)	**x = 0**	$8{,}0 \times 10^{-3}$	$2{,}0 \times 10^{-2}$		0	0	Excès
Au cours de la Trans.	**x**	$8{,}0 \times 10^{-3} - x$	$2{,}0 \times 10^{-2} - 2x$		**x**	**x**	Excès
État final (mol)	$x = x_{max}$	$8{,}0 \times 10^{-3} - x_{max}$	$2{,}0 \times 10^{-2} - 2x_{max}$		x_{max}	x_{max}	Excès
	$x_{max} =$						Excès

- La valeur retenue pour x_{max} est la plus faible des deux valeurs.

$8{,}0 \times 10^{-3} - x_{max} = 0$	⇒	$x_{max1} = 8{,}0 \times 10^{-3}$ mol	⇒	$x_{max} = x_{max1} = 8{,}0 \times 10^{-3}$ mol
$2{,}0 \times 10^{-2} - 2x_{max} = 0$		$x_{max2} = 1{,}0 \times 10^{-2}$ mol		

- Conclusion le carbonate de calcium est le réactif limitant. Les ions hydrogène ont été introduit en excès.
- Tableau final :

Équation		$CaCO_{3(s)}$	$+ 2H^+_{(aq)}$	→	$Ca^{2+}_{(aq)}$	$+ CO_{2(g)} + H_2O_{(\ell)}$	
État du système	**Avanc.**						
État initial (mol)	**x = 0**	$8{,}0 \times 10^{-3}$	$2{,}0 \times 10^{-2}$		0	0	Excès
Au cours de la Trans.	**x**	$8{,}0 \times 10^{-3} - x$	$2{,}0 \times 10^{-2} - 2x$		**x**	**x**	Excès
État final (mol)	$x = x_{max}$	$8{,}0 \times 10^{-3} - x_{max}$	$2{,}0 \times 10^{-2} - 2x_{max}$		x_{max}	x_{max}	Excès
	$x_{max} =$	0	$4{,}0 \times 10^{-3}$		$8{,}0 \times 10^{-3}$	$8{,}0 \times 10^{-3}$	Excès

- Pression du dioxyde de carbone.
- On peut considérer que le dioxyde de carbone se comporte comme un gaz parfait.
- On peut utiliser la relation suivante : **p V = n R T**

$$p = \frac{nRT}{V} \Rightarrow p = \frac{8{,}0 \times 10^{-3} \times 8{,}31 \times 293}{1{,}1 \times 10^{-3}}$$

- $p \approx 1{,}8 \times 10^4$ Pa