

Notion d'avancement d'une réaction chimique et bilan de matière.

1) La transformation chimique

Un système chimique est décrit par les différentes espèces chimiques qui le composent, leurs quantités de matière, leurs états physiques et les conditions de température et de pression.

Le passage d'un système chimique d'un état initial à un état final est appelé transformation chimique. A l'échelle macroscopique cette transformation est modélisée par une réaction chimique dont nous écrivons l'écriture symbolique : l'équation de réaction.

Par exemple, pour modéliser la transformation chimique entre l'oxyde de cuivre et le carbone, on écrit l'équation de réaction suivante : $2 \text{CuO}(s) + \text{C}(s) \rightarrow \text{CO}_2(g) + 2 \text{Cu}(s)$

Si on fait réagir une masse $m_1 = 0,6$ g de carbone et $m_2 = 1,6$ g d'oxyde de cuivre, on pourra décrire l'état initial à partir des quantités de matières suivantes :

$$n_1(\text{C}) = \frac{m_1}{M(\text{C})} = \frac{0,6}{12} = 0,05 \text{ mol} \quad \text{et} \quad n_2(\text{CuO}) = \frac{m_2}{M(\text{CuO})} = \frac{1,6}{79,5} = 0,020 \text{ mol}$$

2) Tableau d'évolution d'une transformation chimique

Faire un bilan de matière consiste à décrire l'état du système au cours de la transformation chimique, en donnant les quantités de matière de chacune des espèces chimiques concernées. Pour cela nous allons construire un tableau et introduire une grandeur décrivant l'évolution du système chimique

a) Avancement d'une réaction

L'avancement d'une réaction chimique est une variable, notée x , qui permet de déterminer les quantités de matière de réactifs transformés et de produits formés. L'avancement x est une quantité de matière qui s'exprime donc en mol.

A l'état initial, l'avancement est nul et à l'état final l'avancement est maximal (noté x_{max}). Au cours de la transformation $0 < x < x_{\text{max}}$.

Remarque : la présentation Power Point Avancement_sandwichs est une manière simple et ludique de comprendre rapidement ce que représente concrètement l'avancement en chimie.

b) Tableau d'avancement

Le tableau descriptif de l'évolution de la transformation est donné pour une réaction entre des espèces A et B donnant C et D (a, b, c et d représentent les coefficients stœchiométriques). Toutes les valeurs sont données en mol, puisqu'il s'agit de quantités de matière.

Equation de réaction		$a A$	$+ b B$	$\rightarrow c C$	$+ d D$
	Avancement (en mol)	n_A (en mol)	n_B (en mol)	n_C (en mol)	n_D (en mol)
Etat initial	0	n_A^i	n_B^i	n_C^i	n_D^i
En cours de transformation	x	$n_A^i - a.x$ (ce qui reste)	$n_B^i - b.x$ (ce qui reste)	$n_C^i + c.x$	$n_D^i + d.x$

Pour continuer l'exemple de la réaction entre l'oxyde de cuivre et le carbone, voici le tableau d'avancement obtenu avec l'état initial évoqué dans le paragraphe 3 :

Equation de réaction		2 CuO	$+ C$	$\rightarrow \text{CO}_2$	$+ 2 \text{ Cu}$
	Avancement (en mol)	n_{CuO} (en mol)	n_C (en mol)	n_{CO_2} (en mol)	n_{Cu} (en mol)
Etat initial	0	0,02	0,05	0	0
En cours de transformation	x	$0,02 - 2.x$ (ce qui reste)	$0,05 - x$ (ce qui reste)	x (se forme)	$2.x$ (se forme)

Vous noterez bien de quelle manière les coefficients stœchiométriques interviennent en facteur de l'avancement pour indiquer qu'une espèce est consommée deux fois plus vite (pour CuO par exemple)

c) Avancement maximal

L'état final d'un système chimique en évolution est atteint lorsque les quantités de matières des réactifs n'évoluent plus. L'avancement vaut alors x_{\max} .

L'avancement maximal est la plus petite valeur de l'avancement pour laquelle la quantité de matière d'un des réactifs est nulle. Ce réactif qui a été entièrement consommé lors de la transformation chimique est appelé **réactif limitant**.

Pour notre exemple, nous avons deux hypothèses à faire :

- Soit CuO est réactif limitant. Dans ce cas, à l'état final, nous avons : $0,02 - 2.x_{\max} = 0$, donc $x_{\max} = 0,01 \text{ mol}$
- Soit C est réactif limitant. Dans ce cas, nous avons : $0,05 - x_{\max} = 0$, donc $x_{\max} = 0,05 \text{ mol}$

On choisit la plus petite valeur de l'avancement $x_{\max} = 0,01 \text{ mol}$ et le réactif limitant est donc l'oxyde de cuivre.

Remarques :

- Si nous avons pris la plus grande valeur, cela nous aurait amené à une quantité négative d'oxyde de cuivre à l'état final. Ce qui n'a pas de sens.
- Le réactif qui n'est pas limitant est dit en excès.
- Il peut arriver que les deux réactifs soient limitants. On est alors dans les proportions stœchiométriques et il ne reste aucun réactif à l'état final.