

AVANCEMENT ET TABLEAU D'AVANCEMENT

Un tableau d'avancement permet de suivre l'évolution de la transformation chimique. Grâce à lui nous trouvons les quantités de matière des réactifs et des produits formés avant, pendant et après la transformation chimique.

EQUATION BILAN DE LA TRANSFORMATION

- ✓ Lors de la transformation chimique, des réactifs disparaissent et des produits se forment.

Exemple : réactif A + réactif B → produit C + produit D

- ✓ En écrivant l'équation bilan de la transformation chimique on pose les symboles et on les affecte de coefficients stoechiométriques de manière à ce qu'il n'y ait pas de perte d'éléments ni de charge électrique lorsqu'il y a des ions.
- ✓ Ces coefficients sont très importants car ils jouent un rôle essentiel lors de la réaction.
- ✓ Dans un tableau d'avancement, on note l'équation bilan, l'état initial (instant $t=0$), l'état intermédiaire (instant quelconque t) et état final (instant t_f).
- ✓ Exemple : combustion de l'éthanol s'écrit : $C_2H_6O + O_2 \rightarrow CO_2 + H_2O$ il faut équilibrer l'équation, elle devient : $1C_2H_6O + 3O_2 \rightarrow 2CO_2 + 3H_2O$

INTERPRETATION DE L'EQUATION

✓ Quand l'éthanol brûle dans le O_2 au niveau des molécules cela signifie :
 1 molécule d'éthanol réagit avec 3 molécules de O_2 pour former 2 molécules de CO_2 et 3 molécules d'eau. ($1, 3, 2, 3$) sont les coefficients stoechiométriques.

✓ Maintenant, on parle de grandes quantités de molécules. On fait des « paquets » ; on va raisonner sur les « moles » :
 1 mole de molécules d'éthanol réagit avec 3 moles de molécules de O_2 pour former 2 moles de molécules de CO_2 et 3 moles de molécules d'eau.

✓ Le mot « molécules » est souvent retiré dans les phrases, cela devient :
 1 mole d'éthanol réagit avec 3 moles de O_2 pour former 2 moles de CO_2 et 3 moles d'eau.

($1, 3, 2, 3$)

- ✓ Au début d'une transformation, on a un certain nombre de mole « n » de réactifs pouvant prendre n'importe quelle valeur dans un exercice mais on tient compte de la proportionnalité : ($1, 3, 2, 3$) d'où l'utilité du tableau d'avancement à tout instant t :

LE TABLEAU D'AVANCEMENT

	Equation	a A	+ bB	= cC	+ dD
Etat initial	x = 0				
Etat interméd.	x				
Etat final	X _{max}				

A, B sont les réactifs; C et D sont les produits.

a,b,c,d sont les coefficients stoechiométriques.

x correspond à une quantité de matière donc à un nombre de mole perdu par les réactifs et gagné par les produits au cours du temps en tenant compte de la proportionnalité (a ,b ,c ,d).

ETAPES POUR REMPLIR LE TABLEAU D'AVANCEMENT

- ✓ A l'état initial , puisque la transformation n'a pas encore démarrée x = 0 (il n'y a ni perte ni gain de mole)
- ✓ Au cours de la transformation, x va augmenter jusqu'à une valeur maximale notée x_{max} à l'état final.

Exemple avec la transformation : $\text{C}_2\text{H}_6\text{O} + 3 \text{O}_2 = 2\text{CO}_2 + 3\text{H}_2\text{O}$

Tableau d'avancement :

	Equation	$\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$	+ 3 O_2	= 2 CO_2	+ 3 H_2O
Etat initial	x = 0				
Etat interméd.	x				
Etat final	X _{max}				

A l'état initial, on a placé un certain nombre de mole d'éthanol n_1 et d'oxygène n_2 ; il n'y a pas encore de CO_2 ni d'eau donc $n = 0$:

	Equation	$\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$	+ 3O_2	= 2CO_2	+ $3\text{H}_2\text{O}$
Etat initial	$x = 0$	n_1	n_2	0	0
Etat interméd.	x				
Etat final	x_{max}				

Au cours du temps, c'est à dire dans l'état intermédiaire, x va croître. L'éthanol va perdre x mole et le O_2 va en perdre 3 fois plus (car coefficient 3) donc : va perdre $3x$ mole. Il va se former $2x$ mole (car coefficient 2) de CO_2 et $3x$ mole (car coefficient 3) de H_2O .

On a respecté la proportionnalité (1, 3, 2, 3)

	Equation	$\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$	+ 3O_2	= 2CO_2	+ $3\text{H}_2\text{O}$
Etat initial	$x = 0$	n_1	n_2	0	0
Etat interméd.	x	$n_1 - x$	$n_2 - 3x$	$2x$	$3x$
Etat final	x_{max}				

Pour l'état final, l'éthanol va perdre x_{max} mole et le O_2 va en perdre 3 fois plus (car coefficient 3) donc : va perdre $3x_{\text{max}}$ mole. Il va se former $2x_{\text{max}}$ mole (car coefficient 2) de CO_2 et $3x_{\text{max}}$ mole (car coefficient 3) de H_2O .

On a respecté la proportionnalité (1, 3, 2, 3)

A l'état final, l'avancement x atteint une valeur maximale x_{max} . La réaction est terminée.

	Equation	$\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$	+ 3O_2	= 2CO_2	+ $3\text{H}_2\text{O}$
Etat initial	$x = 0$	n_1	n_2	0	0
Etat interméd.	x	$n_1 - x$	$n_2 - 3x$	$2x$	$3x$
Etat final	x_{max}	$n_1 - x_{\text{max}}$	$n_2 - 3x_{\text{max}}$	$2x_{\text{max}}$	$3x_{\text{max}}$

TROUVER LA VALEUR DE x_{\max} .

Tout dépendra de la quantité des réactifs. Quand on ne sait pas ce qui va rester, il faut raisonner ainsi :

On suppose que les réactifs ont été placés dans les proportions stoechiométriques : c'est à dire qu'à la fin de la transformation, ils ont tous disparus.

Donc à l'état final : le nombre de mole de C_2H_6O est nul : $n_{1f} = 0$ et le nombre de O_2 aussi : $n_{2f} = 0$.

D'après le tableau d'avancement : $n_{1f} = 0 = n_1 - x_{\max}$ il vient : $x_{\max} = n_1$

D'après le tableau d'avancement : $n_{2f} = 0 = n_2 - 3x_{\max}$ il vient : $x_{\max} = n_2 / 3$

Alors $x_{\max} = n_1 = n_2 / 3$

La réaction s'arrête lorsqu'on a atteint cette valeur x_{\max} .

MAIS

Souvent les réactifs n'ont pas été placés dans les proportions stoechiométriques, c'est à dire qu'à la fin de la transformation il reste au moins un des réactifs : donc $n_1 \neq n_2 / 3$.

Il faut donc chercher la valeur de x_{\max} la plus petite.

ASTUCE : Le réactif qui donnera la valeur de x_{\max} la plus petite arrêtera la réaction. Quand il n'y a plus de réactif A alors la transformation entre A et B ne peut plus se faire.

EXEMPLE avec notre équation bilan :

On a initialement 0,2 mol d'éthanol et 0,5 mol de dioxygène. On remplit le tableau avec ces valeurs.

	Equation	C_2H_6O	+ $3 O_2$	= $2CO_2$	+ $3H_2O$
Etat initial	$x = 0$	0,2	0,3	0	0
Etat interméd.	x	$0,2 - x$	$0,3 - 3x$	$2x$	$3x$
Etat final	x_{\max}	$0,2 - x_{\max}$	$0,3 - 3x_{\max}$	$2x_{\max}$	$3x_{\max}$

Quel est le réactif qui va arrêter la réaction = quel est le réactif limitant ?

RECHERCHE DU x_{\max}

Soit c'est C_2H_6O le réactif limitant, soit c'est le O_2 .

Donc soit $0,2 - x_{\max} = 0$ soit $0,3 - 3x_{\max} = 0$ il vient

Soit $x_{\max} = 0,2 \text{ mol}$ soit $x_{\max} = 0,3 / 3 = 0,1 \text{ mol}$.

Le x_{\max} le plus petit est $x_{\max} = 0,1 \text{ mol}$ donc le réactif limitant est celui qui a donné cette valeur : ici c'est le O_2 .

Remarque piège ! : ce n'est pas parce que le O_2 a été introduit en plus grande quantité qu'il n'est pas le réactif limitant !

RECHERCHE DES QUANTITES FINALES

On remplace la valeur de x_{\max} à l'état final dans le tableau et on obtient les quantités des réactifs et des produits formés.

	Equation	C_2H_6O	+ 3 O_2	= 2 CO_2	+ 3 H_2O
Etat initial	$x = 0$	0,2	0,3	0	0
Etat interméd.	x	$0,2 - x$	$0,3 - 3x$	$2x$	$3x$
Etat final	x_{\max}	$0,2 - 0,1 = 0,1$	$0,3 - 3 \cdot 0,1 = 0$	$2 \cdot 0,1 = 0,2$	$3 \cdot 0,1 = 0,3$

A la fin de la transformation, il n'y plus de O_2 . Il reste 0,1 mol d'éthanol. Il s'est formé 0,2 mol de CO_2 et 0,3 mol de H_2O .