

Modélisation des transformations chimiques - Bilan de la matière

I-Modélisation des transformations chimiques d'un système:

1) L'état initial et l'état finale d'un système chimique:

Au cours d'une transformation chimique certaines espèces chimiques disparaissent alors que d'autres apparaissent. Les espèces chimiques qui disparaissent totalement ou partiellement sont appelées : **les réactifs**.

Les espèces chimiques qui apparaissent sont: **les produits** de la transformation.

Toute transformation chimique évolue d'un état initial à un état final tout en se déroulant sous une pression et une température données.

On appelle état initial l'état sous lequel se trouve le système au début de la transformation et état final l'état sous lequel il se trouve à la fin de la transformation.

Pour définir l'état d'un système on doit déterminer:

- Les paramètres physiques qui précisent les conditions d'état comme la pression et la température.
- La quantité de matière ainsi que l'état physique de chaque espèce chimique : liquide, solide, gaz ou bien aqueux.

2) Modélisation des transformations chimiques:

On modélise toute transformation chimique par un modèle simple qu'on appelle réaction chimique qui peut décrire cette transformation et qu'on représente par une équation chimique dans laquelle les réactifs et les produits sont représentés par leurs formules :

Dans une équation chimique les réactifs sont placés à gauche d'une flèche qui désigne le sens de la réaction et les produits à sa droite.



Au cours d'une transformation chimique, il y a conservation des éléments chimiques et de la charge électrique, l'équation doit donc être équilibrée par des nombres appelés **coefficients stœchiométriques**.

Généralisation : l'équation de la réaction peut être modélisée d'une manière générale de la façon suivante:



A et B : les réactifs.

C et D: les produits de la réaction.

α, β, γ et δ : les coefficients stœchiométriques

La flèche $\rightarrow$ indique le sens de la réaction.

Exemples : ■ L'équation de combustion du carbone : $\overset{(s)}{C} + \overset{(g)}{O_2} \rightarrow \overset{(g)}{CO_2}$ les coefficients stœchiométriques de cette réaction sont 1,1,1.

■ L'équation de combustion du butane : $2\overset{(g)}{C_4H_{10}} + 13\overset{(g)}{O_2} \rightarrow 8\overset{(g)}{CO_2} + 10\overset{(g)}{H_2O}$
les coefficients stœchiométriques de cette réaction sont 2, 13, 8, 10.

■ L'équation de la réaction d'oxydation du zinc par une solution acide : $\overset{(s)}{Zn} + 2\overset{(aq)}{H^+} \rightarrow \overset{(aq)}{Zn^{2+}} + \overset{(g)}{H_2}$
les coefficients stœchiométriques de cette réaction sont 1, 2, 1, 1.

3) Relation entre quantité de la matière et coefficients stœchiométriques :

Les quantités de matière des réactifs entrant dans la réaction et celles des produits qui en résultent sont proportionnelles aux coefficients stœchiométriques

$$\frac{n(A)}{\alpha} = \frac{n(B)}{\beta} = \frac{n(C)}{\gamma} = \frac{n(D)}{\delta}$$

II-Bilan de la matière:

1)Avancement de la réaction:

Pour suivre l'évolution de la quantité de matière des espèces chimiques qui participent dans une réaction chimique on utilise l'avancement de la réaction noté x exprimé en moles et qui prend une valeur maximale $x_{\max}$ à la fin de la réaction.

2)Tableau d'avancement de la réaction:

Le suivi de l'évolution d'une réaction chimique nécessite l'intérêt à trois états :

- **L'état initial** : la réaction n'a pas encore commencé, l'avancement x est nul .
- **L'état intermédiaire** : il correspond à un état quelconque au cours de la réaction, l'avancement vaut alors une certaine valeur, notée x .
- **L'état final** : correspond à la fin de la réaction. L'avancement x_f correspond alors à une valeur finale .

Le tableau d'avancement :

Equation de la réaction		$\alpha A + \beta B \rightarrow \gamma C + \delta D$			
états	avancement	Quantité de matière (en mol)			
Etat initial	0	$n_o(A)$	$n_o(B)$	0	0
Etat de transformation	x	$n_o(A) - \alpha x$	$n_o(B) - \beta x$	γx	δx
Etat final	x_f	$n_o(A) - \alpha x_f$	$n_o(B) - \beta x_f$	γx_f	δx_f

L'avancement de la réaction permet de déterminer la composition du système à un instant donné ou à l'état final connaissant sa composition initiale, c'est ce qu'on appelle bilan de la matière.

3) Le réactif limitant:

On appelle réactif limitant le réactif dont la disparition totale empêche la poursuite de la réaction chimique . (Donc le réactif limitant est entièrement consommé à la fin de la réaction).

Pour déterminer le réactif limitant dans le cas d'une réaction générale de type :



on pose deux hypothèses

- Si $x_{1\max} < x_{2\max}$ alors : $x_{\max} = x_1$ dans ce cas c'est le réactif A qui est limitant.
- Si $x_{2\max} < x_{1\max}$ alors : $x_{\max} = x_2$ dans ce cas c'est le réactif B qui est limitant.

C'est à dire que des deux valeurs possibles l'avancement maximal correspond à la plus petite.



4) Exemples: On réalise la combustion du méthane CH_4 dans le dioxygène O_2 en introduisant initialement 1mol de méthane à l'état gazeux et 4moles de O_2 .

- 1) Sachant que les produits de la réaction sont le dioxyde de carbone et l'eau .Ecrire l'équation de la réaction en déterminant les coefficients stœchiométriques .
- 2) Dresser le tableau d'avancement de la réaction .
- 3) Déterminer l'avancement maximale de la réaction et en déduire le réactif limitant.
- 4) Donner le bilan de la réaction (c'est-à-dire déterminer la composition finale du mélange).

1) L'équation de la réaction : $CH_4 + 2 O_2 \rightarrow CO_2 + 2 H_2O$ les coefficients stœchiométriques sont 1,2,1,2.

2) Le tableau d'avancement de la réaction:

Equation de la réaction		$CH_4 + O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$			
états	avancement	Quantité de matière (en mol)			
Etat initial	0	1	4	0	0
Etat de transformation	x	$1 - x$	$4 - x$	x	$2x$
Etat final	$x_{\max}$	$1 - x_{\max}$	$4 - x_{\max}$	$x_{\max}$	$2 x_{\max}$

3) On suppose que CH_4 est limitant : donc $n_f(CH_4)=0$ c'est à dire: $1 - x_{\max} = 0 \Rightarrow x_{1\max} = 1\text{mol}$

On suppose que O_2 est limitant : donc $n_f(O_2)=0$ c'est à dire: $4 - x_{\max} = 0 \Rightarrow x_{2\max} = 4\text{mol}$

on a: $x_{1\max} < x_{2\max}$ donc l'avancement maximale de la réaction est: $x_{\max} = 1\text{mol}$ et CH_4 est le réactif limitant

4) le bilan de la réaction :
 $n_f(CH_4) = 1 - x_{\max} = 1 - 1 = 0$
 $n_f(O_2) = 4 - x_{\max} = 4 - 1 = 3\text{mol}$
 $n_f(CO_2) = x_{\max} = 1\text{mol}$
 $n_f(H_2O) = 2x_{\max} = 2\text{mol}$

Equation de la réaction		$CH_4 + O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$			
bilan		0	3mol	1mol	2mol