

## FICHE METHODE

### Construire le tableau d'avancement d'une réaction chimique

#### Problème à résoudre

##### 1 Enoncé

Un chimiste réalise la réaction d'équation  $aA + bB \rightarrow cC + dD$  dans un réacteur. Pour cela, il y introduit  $\alpha$  moles de réactif A et  $\beta$  moles de réactif B. Construire le tableau d'avancement de la réaction et déterminer les quantités de produits C et D obtenues, ainsi que celle de réactif éventuellement en excès.

##### 2 Commentaire

1) L'équation considérée ici met en jeu quatre espèces. Le raisonnement pour un nombre différent serait le même, à ceci près que le tableau d'avancement comporte autant de colonnes que d'espèces.

2) Dans l'équation chimique, les nombres a, b, c, d découlent de la nature de l'échange d'atomes qui se produit entre molécules. On ne peut pas changer leurs proportions, qui résultent des propriétés des corps. On peut seulement les multiplier tous par un même nombre. L'équation est la "recette" qui donne quelles proportions il faut utiliser pour employer complètement tous les "ingrédients" (proportions stœchiométriques).

3) Pour la réaction chimique dans le réacteur, c'est le chimiste qui choisit les quantités de réactifs qu'il introduit dans le récipient. S'il respecte les proportions, c'est-à-dire si  $\frac{\beta}{\alpha} = \frac{b}{a}$ , alors tous les réactifs sont consommés. Dans le cas contraire, s'il introduit trop d'un réactif, le réactif en excès se retrouve dans le réacteur en fin de réaction.

4) Le tableau d'avancement de la réaction peut être vu comme le tableau de bord de la réaction ; il donne les quantités d'espèces présentes dans le réacteur au début, au cours et à la fin de la réaction.

#### Méthode

##### 1 Idée de la méthode

Le tableau d'avancement traduit que les quantités de réactifs consommées dans le réacteur, à un certain degré d'avancement, sont nécessairement proportionnelles aux coefficients de l'équation. Il en est de même des quantités de produits formés.

##### 2 Description de la méthode

1) On choisit la quantité x de A consommée comme indicateur du degré d'avancement de la réaction dans le réacteur.

2) On trace un tableau avec autant de colonnes que d'espèces mises en jeu dans la réaction (ici 4) et avec 3 lignes correspondant à trois moments de la réaction : état initial (pas encore de A consommé donc  $x=0$ ), état intermédiaire ( $x$  moles de A consommées), état final (le

réactif limitant [celui qui n'est pas en excès] est totalement consommé; il faudra déterminer ce réactif pour trouver x dans l'état final).

3) Sur la première ligne, on porte les quantités de réactifs introduites et 0 pour les produits puisque la réaction n'a pas débuté.

4) Sur la **deuxième ligne**, on porte les **quantités d'espèces présentes**, en cours de réaction, lorsque x moles de A son **consommées** : par définition de x, il reste  $\alpha - x$  moles de A ; l'équation de la réaction chimique indique que, quand a moles de A sont consommées, b moles de B sont aussi consommées ; c moles de C et d moles de D sont alors produites. Dans la réaction, lorsque x moles de A sont consommées, les quantités de B consommée ainsi que de C et D produites sont en proportion, selon les tableaux de proportionnalité :

|                   | Equation | Réaction     |                  | Equation | Réaction     |
|-------------------|----------|--------------|------------------|----------|--------------|
| A consommé        | a        | x            | A consommé       | a        | x            |
| <b>B consommé</b> | b        | <b>x b/a</b> | <b>C produit</b> | c        | <b>x c/a</b> |

|                  | Equation | Réaction     |
|------------------|----------|--------------|
| A consommé       | a        | x            |
| <b>D produit</b> | d        | <b>x d/a</b> |

Les quatre colonnes de la ligne "intermédiaire" contiennent donc  $\alpha - x$ ,  $\beta - x$ ,  $b/a$ ,  $x c/a$  et  $x d/a$ .

5) Sur la troisième ligne, l'**état final** est atteint lorsque le réactif **limitant est épuisé**. Il faut donc déterminer **quel est le premier reste qui devient nul** : le reste de A ( $\alpha - x = 0$  ?) ou celui de B ( $\beta - x$   $b/a = 0$  ?).

Or ces restes deviennent nuls pour  $x = \alpha$  ou  $x = \beta a/b$ . Parmi ces deux valeurs, c'est la première atteinte par x, c'est-à-dire **la plus petite qui convient. On choisit donc selon la règle suivante :**

$$\text{si } \alpha < \beta \frac{a}{b} \Rightarrow x = \alpha, \text{ B est en excès, son reste est } \beta - \alpha \frac{b}{a},$$

$$\text{si } \beta \frac{a}{b} < \alpha \Rightarrow x = \beta \frac{a}{b}, \text{ A est en excès, son reste est : } \alpha - \beta \frac{a}{b}.$$

Bien sûr, le reste en fin de réaction du réactif limitant est nul et **le reste calculé pour le réactif en excès doit être positif** : comme une seule des deux quantités  $\beta - \alpha \frac{b}{a}$  et  $\alpha - \beta \frac{a}{b}$  est positive, cela donne un autre moyen de choisir la bonne version de la dernière ligne.

6) On peut maintenant remplir le tableau d'avancement :

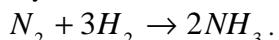
|                                   | A                        | B                          | C            | D            |
|-----------------------------------|--------------------------|----------------------------|--------------|--------------|
| Etat initial (x=0)                | $\alpha$                 | $\beta$                    | 0            | 0            |
| Etat intermédiaire (x de A cons.) | $\alpha - x$             | $\beta - x$ $b/a$          | $x c/a$      | $x d/a$      |
| A limitant (x= $\alpha$ )         | 0                        | $\beta - \alpha$ $b/a > 0$ | $\alpha c/a$ | $\alpha d/a$ |
| Etat final <b>OU</b>              | -----                    | -----                      | -----        | -----        |
| B limitant (x= $\beta a/b$ )      | $\alpha - \beta a/b > 0$ | 0                          | $\beta c/b$  | $\beta d/b$  |

Si les deux restes sont nuls : réaction stœchiométrique !

## Exemple d'application

### Données

Un chimiste fait réagir 2 moles d'azote avec 7 moles d'hydrogène pour synthétiser de l'ammoniac selon la réaction d'équation :



Construire le tableau d'avancement de la réaction. Déterminer l'excès de réactif et la quantité d'ammoniac produite.

### Résolution

On choisit la quantité  $x$  d'azote consommée comme indicateur du degré d'avancement de la réaction. L'équation indique que, pour **chaque** mole de  $N_2$  consommée, la réaction consomme **3** moles de  $H_2$  et produit **2** moles de  $NH_3$ .

|   | $N_2$           | $H_2$      | $NH_3$          |
|---|-----------------|------------|-----------------|
| Etat initial ( $x=0$ )  | 2               | 7          | 0               |
| Etat intermédiaire ( $x$ de $N_2$ consom.)                    | $2-x$           | $7-3x$     | $2x$            |
| Etat final<br>$x=2$ ?<br><b>OU</b><br>$7-3x=0$ soit $x=7/3$ ? | 0 ?<br>$-1/3$ ? | 1 ?<br>0 ? | 4 ?<br>$14/3$ ? |

La valeur 2, inférieure à  $7/3 \approx 2,33$ , est atteinte en premier ; on voit aussi que la deuxième "version" de la troisième ligne contient un reste négatif de  $N_2$ , ce qui n'est pas possible.

C'est donc la première version de la ligne qui est correcte est, en définitive, le tableau exact est le suivant :

|  | $N_2$ | $H_2$  | $NH_3$ |
|--|-------|--------|--------|
| Etat initial ( $x=0$ )                     | 2     | 7      | 0      |
| Etat intermédiaire ( $x$ de $N_2$ consom.) | $2-x$ | $7-3x$ | $2x$   |
| Etat final ( $x=2$ )                       | 0     | 1      | 4      |

Il reste donc, à la fin de la réaction, 1 mole d'hydrogène en excès et la réaction a produit 4 moles d'ammoniac.

### Vérification

En multipliant les deux côtés de l'équation de la réaction par 2, on obtient  $2N_2 + 6H_2 \rightarrow 4NH_3$  ; ceci montre *directement* que la réaction de 2 moles de  $N_2$  avec 6 moles de  $H_2$  fournit 4 moles de  $NH_3$ . Il doit donc rester 1 mole de  $H_2$  inutilisée à la fin de la réaction.