

NOTION D'AVANCEMENT

La modélisation des transformations chimiques par des équations de réaction permet non seulement de rendre compte des phénomènes observés, mais également de prévoir les quantités de produits formés ou celles de réactifs nécessaires.

I / QUELQUES NOTIONS INDISPENSABLES

→ Évolution d'un système chimique

Le système chimique est constitué par l'ensemble des espèces chimiques aux quelles on s'intéresse.

L'état initial correspond à l'état du système à l'instant où les espèces chimiques du système sont mises en contact.

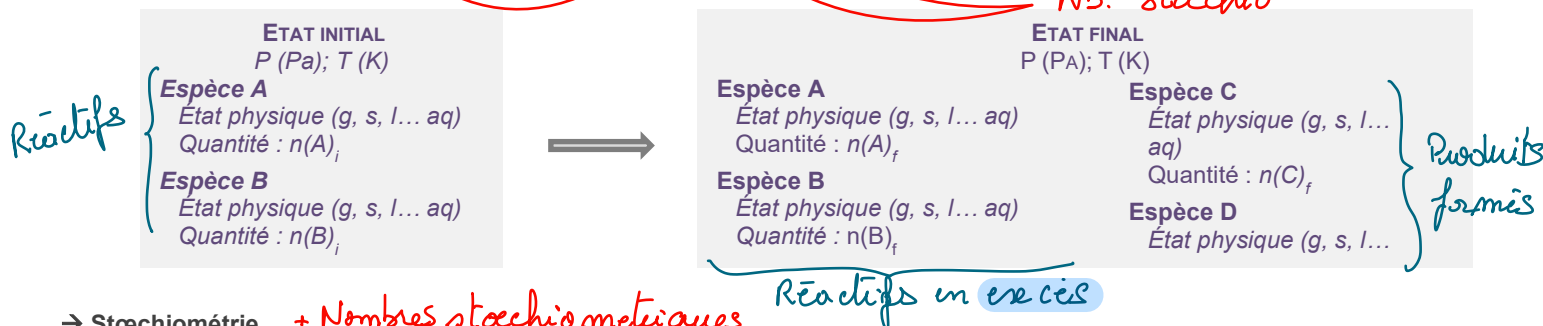
Le système atteint **l'état final** lorsque sa composition n'évolue plus.

Soit la réaction : $\text{Espèces X} \quad aA + bB \rightarrow cC + dD$

Nb. Stoechio (handwritten in red)

Espèces chimiques (handwritten in blue)

Nb. Stoechio (handwritten in red)



→ Stœchiométrie + Nombres stœchiométriques

On appelle **stœchiométrie** les relations de proportionnalité qui existent entre les quantités de matière consommées des réactifs et entre les quantités de matière formées des produits.

Si, dans l'état final, tous les réactifs ont été consommés, le mélange de réactifs est dit stœchiométrique. $\Rightarrow$ *pas de réactif en excès* (handwritten in blue)

→ Avancement

L'avancement x est une grandeur qui permet de suivre l'évolution des quantités de matière de réactifs et de produits au cours de la réaction. Il s'exprime en mole.

L'avancement varie : de la valeur $x = 0$ (système dans l'état initial)
 $\hookrightarrow$ la valeur $x = x_f$ (système dans l'état final).

cette année (handwritten in blue) $x_f = x_{mse}$ (handwritten in red) $\Rightarrow$ *Réaction totale* (handwritten in blue)

On peut représenter l'évolution des quantités de matière du système à l'aide d'un tableau d'avancement (et d'un graphique).

II / UNE ANALOGIE POUR COMPRENDRE

Objectif : On veut préparer des sandwiches au jambon.

Protocole :

Avec deux tranches de pain de mie (P) et une tranche de fromage (Fr) (ou de Jambon (Jb) selon votre choix), on prépare un sandwich (Sw).

Tant que l'on possède assez d'ingrédients, on fabrique des sandwiches.



Utiliser l'animation :

<https://phet.colorado.edu/fr/simulation/reactants-products-and-leftovers>

1. Analogie avec la transformation chimique

Que peut-on considérer comme analogues aux réactifs ? aux produits ?

*le pain et le fromage représentent les réactifs consommés.
le sandwich représente le produit formé.* (handwritten in blue)

Qu'est-ce qui correspond à la réaction chimique ? L'écrire sous forme d'équation puis la reporter dans le tableau.

la fabrication du pain peut être modélisée par une réaction :
 $2P + Fr \rightarrow Sw$ (handwritten in blue)

État initial

On possède 20 tranches de pain de mie et 6 tranches de fromage (ou de jambon). Au début, on prépare les ingrédients mais on n'a pas commencé la préparation des sandwiches ! ✍ Compléter la ligne 1 du tableau ci-dessous

États intermédiaires

- On a préparé un seul sandwich. ✍ On complète la ligne 2 du tableau.
- On a préparé deux sandwiches. ✍ On complète alors la ligne 3 du tableau.
- On a préparé x sandwiches. ✍ Complétez la ligne 4 du tableau.

État final

Lorsqu'il est atteint, un ingrédient manque et la fabrication est stoppée.
On se demande quel ingrédient viendra à manquer en premier.

✍ A partir de la ligne 4 préciser dans quelle condition la préparation s'arrête par rapport à la quantité initial de pain de mie. Combien de fois peut-on réaliser la recette ?

la préparation s'arrête si tout le pain a été consommé soit lorsque:
 $20 - 2x = 0 \Rightarrow x = 10$

✍ A partir de la ligne 4 préciser dans quelle condition la préparation s'arrête par rapport à la quantité initial fromage. Combien de fois peut-on réaliser la recette ?

la préparation s'arrête si tout le fromage a été consommé soit lorsque:
 $6 - x = 0 \Rightarrow x = 6$

✍ Quel ingrédient va manquer en premier ?

le premier ingrédient à manquer lors cette préparation est le fromage.

2. Conclusion

L'avancement maximal x_{max} est le nombre de fois où la préparation est réalisable.

✍ Que vaut alors x_{max} ?

la préparation s'arrête lorsque tout le fromage a disparu $\Rightarrow x_{max} = 6$

✍ Compléter la ligne 5 du tableau.

✍ Faites la description quantitative de l'état final par une phrase de conclusion indiquant la quantité de sandwiches produite ainsi que les ingrédients restants.

le fromage étant l'ingrédient limitant le nombre de préparations s'arrête pour un avancement maximal x_{max} . A l'état final on a :
Produit forme : $n_f(Sw) = x_{max} = 6$ | Réactif en excès : $n_f(P) = 20 - 2x_{max} = 8$

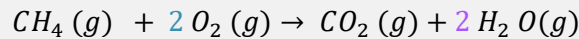
Équation traduisant l'évolution du système		$2P + F \rightarrow Sw$		
État du système	Avancement	Quantités		
✍ 1 → Etat Initial	$x = 0$	20	6	0
✍ 2 → Etat Intermédiaire 1	$x = 1$	$20 - 2$	$6 - 1$	1
✍ 3 → Etat Intermédiaire 2	$x = 2$	$20 - 4$	$6 - 2$	2
✍ 4 → Etat Intermédiaire n	x	$20 - 2x$	$6 - x$	x
✍ 5 → Etat Final	$x = x_f = x_{max}$	$20 - 2x_{max}$ 8	$6 - x_{max}$ 0	$x_{max} = 6$

Appeler le professeur pour valider

III / AVANCEMENT D'UNE REACTION CHIMIQUE

Le gaz de ville est principalement constitué de méthane. Lors d'une fuite de gaz, le méthane est mélangé à l'air et peut exploser s'il se produit une étincelle. Cette transformation chimique peut être suivie à l'aide d'un tableau d'avancement.

Le méthane $CH_4(g)$ réagit avec le dioxygène de l'air $O_2(g)$ selon une réaction de combustion totale d'équation :



- › Pour certaines proportions du mélange méthane-air, une explosion peut se produire.
- › Pour une quantité de méthane donnée, l'explosion la plus violente a lieu lorsque le mélange est **stœchiométrique** ; c'est le régime de **détonation**.

L'évolution des quantités de matière au cours de la transformation peut être suivie grâce à un tableau d'avancement.

→ **Objectif** : Déterminer la composition du système au cours de la transformation puis dans l'état final **en fonction de sa composition initiale** pour une transformation considérée comme totale.



Copier le fichier "Act 2 sim Avancement (élève)" puis le coller dans son espace (attention s'il est en lecture seule...)

État initial 1 : $n_0(CH_4) = 4 \text{ mol}$ et $n_0(O_2) = 10 \text{ mol}$

1. Compléter le tableau d'avancement sur le tableur

- › Compléter l'état initial... ligne 4 du tableau
- › Dans la cellule C5, écrire : `=C$4-B5` et dans la cellule D5, écrire : `=D$4-2*B5`;
- › Dans les cellules E5, écrire : `=B5` et dans les cellules F5, écrire : `=2*B5`;
- › Sélectionner les cellules de C5 à F5, puis en maintenant le clic gauche sur le carré noir étirer vers le bas pour remplir automatiquement toutes les cellules du tableau.



2. Construire l'histogrammes de l'états du système correspondant à l'avancements $x = 0 \text{ mol}$

- › Sélectionner les lignes de C3 à F3 et C4 à F4 puis cliquer sur l'icône Diagramme
- › Dans le menu choisir **1. Type du diagramme** puis sélectionner **Colonne**
- › Finaliser la présentation :

Étapes

1. Type du diagramme
2. Plage de données
3. Séries de données
4. Éléments du diagramme

Choisissez les paramètres des titres, de la légende et de la grille

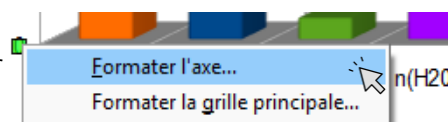
Titre	Combustion du méthane	☐ Afficher la légende
Sous-titre	Etat initial X=0	☒ Gauche
Axe X	Espèces chimique	☐ Droite
Axe Y	Quantités de matière	☐ Haut
Axe Z		☐ Bas

Afficher les grilles

☒ Axe X ☒ Axe Y ☐ Axe Z

3. Construire l'histogrammes de l'états du système correspondant à l'avancements $x = 1 \text{ mol}$

- › Sélectionner les lignes de C3 à F3 maintenir la touche **Ctrl** enfoncée pour sélectionner les cellules de ~~C4~~ à ~~F4~~ C5 à F5
- › Faire le diagramme comme précédemment.
- › Double cliquer sur le diagramme et sélectionner l'axe Y
- › Faire un clic droit pour faire apparaître le menu et choisir



- › Modifier l'échelle : maximum à 10

Minimum	0	☒ Automatique
Maximum	10	☐ Automatique
Intervalle principal	2	☒ Automatique

4. Construire les histogrammes de l'état du système correspondant aux avancements $x = 2 \text{ mol}$; $x = 3 \text{ mol}$ et $x = 4 \text{ mol}$

Appeler le professeur pour valider

5. Construire le graphique montrant l'évolution des quantités de matières

- Sélectionner les cellules de B3 à F8 puis cliquer sur l'icône  Diagramme
- Dans le menu choisir **1. Type du diagramme** puis sélectionner **XY (dispersion)** et Lignes seules 
- Finaliser la présentation en ajoutant la légende ☒ **Afficher la légende**

Appeler le professeur pour valider

✍ Compléter le graphique distribué en mettant des couleurs et ajoutant la légende... le plus précisément possible

✍ Quel est le réactif limitant ? Expliquer à partir du graphique. *voir annexe*

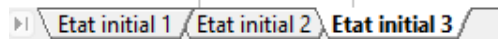
À l'état final, le méthane a été **totalelement consommé**, il est le **réactif limitant** sur le graphique, la droite représentant l'évolution de la quantité de méthane croise l'axe des abscisses pour $x = x_{max} = 4 \text{ mol}$

État initial 2 : $n_0(\text{CH}_4) = 4 \text{ mol}$ et $n_0(\text{O}_2) = 8 \text{ mol}$

- Dupliquer deux fois la feuille de calcul en effectuant un clic gauche sur l'onglet en bas à gauche :



- Renommer en faisant un clic droit sur l'étiquette (comme précédemment) et choisir "Renommer les feuilles..." :



- Effacer le contenu des cellules pour l'état initial puis compléter avec les nouvelles données.
- Faire le même travail que pour l'état initial 1

Déplacer/copier la feuille

Vers le document

Act 2 sim Tableau avancement (élève) ▾

OK

Annuler

Aide

Insérer avant

Feuil1

Feuil1_2

Feuil1_2_2

- placer en dernière position -

☒ Copier

✍ L'état initial correspond à celui d'un mélange stœchiométrique des réactifs. Quelle est la particularité de ce mélange ?

Les quantités de matière des réactifs sont dans les proportions stœchiométriques donc : $n_0(\text{O}_2) = 2 n_0(\text{CH}_4)$
ce mélange est donc détonnant.

État initial 3 : $n_0(\text{CH}_4) = 3 \text{ mol}$

✍ Déterminer la quantité initiale de dioxygène permettant de former un mélange détonant.

Un mélange détonnant correspond à un mélange stœchiométrique ; donc :
$$n_0(\text{O}_2) = 2 n_0(\text{CH}_4) \Rightarrow n_0(\text{O}_2) = 2 \times 3 = 6 \text{ mol}$$

Généralisation

Construire **littéralement** le tableau d'avancement généralisé pour la transformation étudiée, indiquant l'état initial ($x = 0$), un état intermédiaire ($0 < x < x_f$) et l'état final ($x = x_f$) et en notant $n_0(\text{CH}_4)$ et $n_0(\text{O}_2)$ les quantités initiales des réactifs.

Equation traduisant l'évolution du système		$\text{CH}_4(\text{g}) + 2 \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow \text{CO}_2(\text{g}) + 2 \text{H}_2\text{O}(\text{g})$			
État du système	Avancement (mol)	Quantités de matière (mol)			
Etat Initial	$x = 0$	$n_0(\text{CH}_4)$	$n_0(\text{O}_2)$	0	0
Etat Intermédiaire	$0 < x < x_f$	$n_0(\text{CH}_4) - x$	$n_0(\text{O}_2) - 2x$	x	$2x$
Etat Final	$x_f = x_{max}$	$n_0(\text{CH}_4) - x$	$n_0(\text{O}_2) - 2x$	x	$2x$

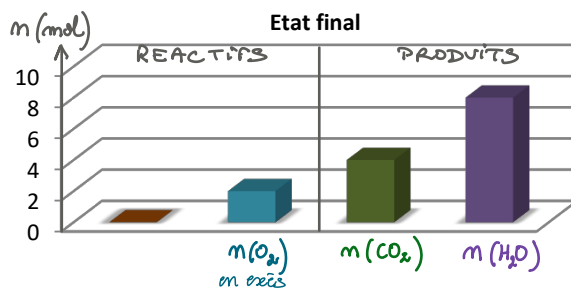
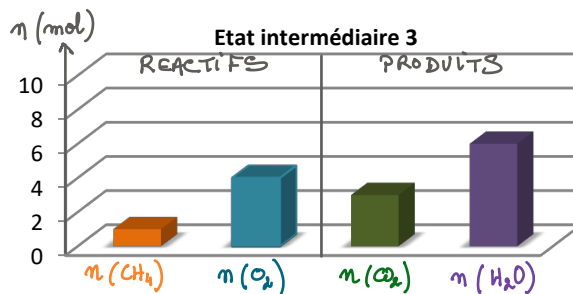
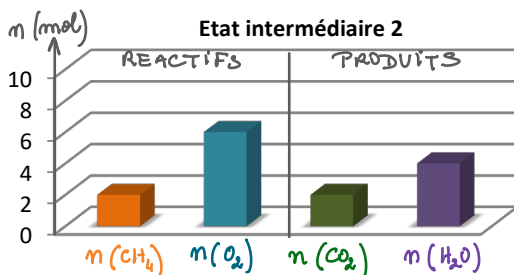
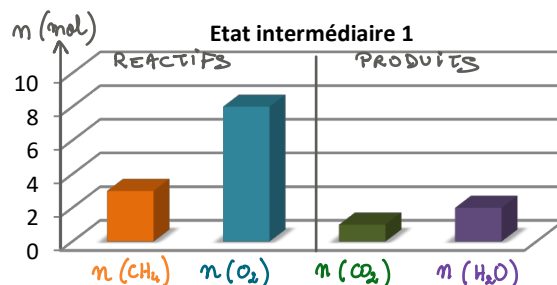
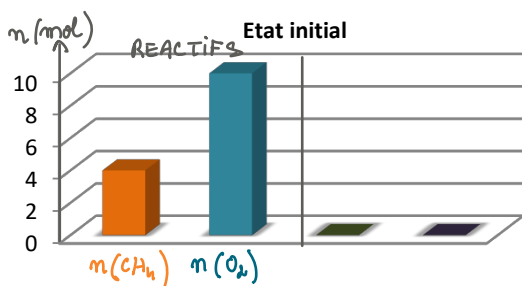
Appeler le professeur pour valider

Annexe Act 2 Exp

⚠ le nombre stoechiométrique s'écrit normalement pas indiqué

ETAT INITIAL ①

Equation chimique		$(1)CH_4(g) + 2 O_2(g) \longrightarrow (1)CO_2(g) + 2 H_2O(l)$			
Etat du système	Avancement	Quantités de matière			
	x (mol)	$n(CH_4)$	$n(O_2)$	$n(CO_2)$	$n(H_2O)$
Etat initial	$x = 0$	4	10	0	0
Etats intermédiaires	$x = 1$	3	8	1	2
	$x = 2$	2	6	2	4
	$x = 3$	1	4	3	6
Etat final	$x_{max} = 4$	0	2	4	8



QUANTITÉS INITIALES

$$n_0(O_2) = 10 \text{ mol}$$

$$n_0(CH_4) = 4 \text{ mol}$$

Evolution du système

QUANTITÉS FINALES

