

RÉVISIONS DE 1^{re}S : AVANCEMENT DE RÉACTION ET BILAN DE MATIÈRE

Pierre-André LABOLLE

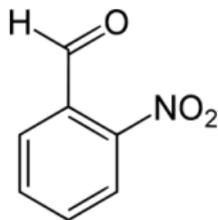
Lycée International des Pontonniers

Avril 2018

I. Un exemple concret : la synthèse de l'indigo

1. Réactifs

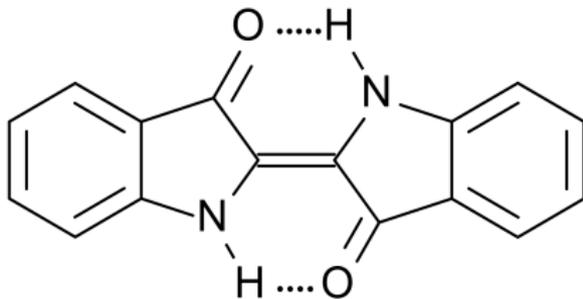
- 1,00 g de 2-nitrobenzaldéhyde de formule $C_6H_4NO_2CHO$ ou $C_7H_5O_3N$ et de masse molaire $M_{nitro} = 151,10 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$
- 10,0 mL d'acétone de formule C_3H_6O de masse molaire $M_{acet} = 58,08 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ et de masse volumique $\rho_{acet} = 0,783 \text{ g} \cdot \text{mL}^{-1}$
- 10,0 mL d'une solution aqueuse d'hydroxyde de sodium (ou soude) de concentration $c = 1,0 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ sachant que la masse molaire de la soude est $M_{NaOH} = 40,00 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$
- Molécule de 2-nitrobenzaldéhyde :



I. Un exemple concret : la synthèse de l'indigo

2. Produits

- de l'eau H_2O
- des ions éthanoate CH_3COO^-
- de l'indigotine de formule $C_{16}H_{10}O_2N_2$ et de masse molaire $M_{indigo} = 262,26 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$
- Molécule d'indigotine :



II. Équilibrer l'équation-bilan

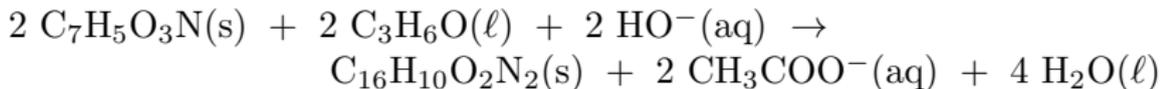
1. Lois de conservation

- Au cours d'une transformation chimique, la masse totale du système est conservée.
- Au cours d'une transformation chimique, les éléments chimiques sont conservés.
- Au cours d'une transformation chimique, la charge électrique totale est conservée.

II. Équilibrer l'équation-bilan

2. Équation-bilan et coefficients stœchiométriques

- Les coefficients stœchiométriques indiquent dans quelles proportions les réactifs réagissent entre eux et dans quelles proportions les produits se forment.
- Les coefficients stœchiométriques n'ont rien à voir avec les quantités de matière réellement mises en œuvre par l'expérimentateur réalisant la réaction, sauf si ce dernier souhaite respecter les proportions stœchiométriques, ce qui ne sera pas toujours le cas.



III. Calculer des quantités de matière

1. Cas des solides

- On utilise la relation $n = \frac{m}{M}$
- Par exemple, pour le 2-nitrobenzaldéhyde :

$$n_{nitro} = \frac{m_{nitro}}{M_{nitro}} = \frac{1,00}{151,10} = 6,62 \cdot 10^{-3} \text{ mol}$$

III. Calculer des quantités de matière

2. Cas des liquides purs

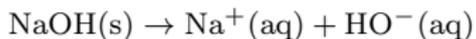
- La densité d d'un liquide est donnée par la relation : $d = \frac{\rho}{\rho_{eau}}$
- La masse volumique ρ d'un liquide est donnée par la relation $\rho = \frac{m}{V}$
- D'après la relation $n = \frac{m}{M}$, il vient $n = \frac{\rho \cdot V}{M}$
- Par exemple, pour l'acétone (ATTENTION AUX UNITÉS!) :

$$n_{acet} = \frac{\rho_{acet} \cdot V_{acet}}{M_{acet}} = \frac{0,783 \times 10,0}{58,08} = 1,35 \cdot 10^{-1} \text{ mol}$$

III. Calculer des quantités de matière

3. Cas des espèces en solution

- On utilise la relation : $c = \frac{n}{V}$ d'où $n = c \cdot V$
- Dans le cas de la soude, on traduit sa mise en solution par :



- On en déduit que :

$$n(\text{HO}^-) = n(\text{NaOH}) = c \cdot V = 1,0 \times 10 \cdot 10^{-3} = 1,0 \cdot 10^{-2} \text{ mol}$$

III. Calculer des quantités de matière

4. Cas des espèces gazeuses

- On utilise parfois la masse volumique comme pour les liquides
- On utilise la relation suivante faisant intervenir le volume molaire :
$$n = \frac{V}{V_m}$$
- On peut utiliser la loi des gaz parfaits, plus générale, qui permet de tenir compte de la température et de la pression : $p \cdot V = n \cdot R \cdot T$

IV. Bilan de matière au cours de la transformation

1. État initial

- $n^o(\textit{nitro}) = 6,62 \cdot 10^{-3} \text{ mol}$
- $n^o(\textit{acet}) = 1,35 \cdot 10^{-1} \text{ mol}$
- $n^o(\text{HO}^-) = 1,0 \cdot 10^{-2} \text{ mol}$
- $n^o(\textit{indigo}) = 0 \text{ mol}$
- $n^o(\text{CH}_3\text{COO}^-) = 0 \text{ mol}$
- $n^o(\text{H}_2\text{O})$: excès

IV. Bilan de matière au cours de la transformation

2. État intermédiaire (en cours de transformation)

- Soit x la quantité de matière d'indigo formée à l'instant t
- $n(\text{nitro}) = n^o(\text{nitro}) - 2x$
- $n(\text{acet}) = n^o(\text{acet}) - 2x$
- $n(\text{HO}^-) = n^o(\text{HO}^-) - 2x$
- $n(\text{indigo}) = x$
- $n(\text{CH}_3\text{COO}^-) = 2x$
- $n(\text{H}_2\text{O})$: excès

IV. Bilan de matière au cours de la transformation

3. État final

- Soit x_f la quantité de matière d'indigo formée lorsque la réaction est terminée
- $n_f(\textit{nitro}) = n^o(\textit{nitro}) - 2x_f$
- $n_f(\textit{acet}) = n^o(\textit{acet}) - 2x_f$
- $n_f(\text{HO}^-) = n^o(\text{HO}^-) - 2x_f$
- $n_f(\textit{indigo}) = x_f$
- $n_f(\text{CH}_3\text{COO}^-) = 2x_f$
- $n_f(\text{H}_2\text{O})$: excès

IV. Bilan de matière au cours de la transformation

4. Avancement de réaction et tableau d'évolution du système

- x est appelé **avancement de la réaction**
- L'ensemble des informations précédentes sont présentées dans un tableau, appelé **tableau d'avancement** ou **tableau d'évolution du système**.

		$2 \text{C}_7\text{H}_5\text{O}_3\text{N}(\text{s}) + 2 \text{HO}^-(\text{aq}) + 2 \text{C}_3\text{H}_6\text{O}(\ell) \rightarrow \text{C}_{16}\text{H}_{10}\text{O}_2\text{N}_2(\text{s}) + 2 \text{CH}_3\text{COO}^-(\text{aq}) + 4 \text{H}_2\text{O}(\ell)$					
État	Avancement (en mol)	Quantités de matière (en mol)					
		$\text{C}_7\text{H}_5\text{O}_3\text{N}(\text{s})$	$\text{HO}^-(\text{aq})$	$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}(\ell)$	$\text{C}_{16}\text{H}_{10}\text{O}_2\text{N}_2(\text{s})$	$\text{CH}_3\text{COO}^-(\text{aq})$	$\text{H}_2\text{O}(\ell)$
État initial	$x = 0$	$n^\circ(\textit{nitro})$	$n^\circ(\text{HO}^-)$	$n^\circ(\text{C}_3\text{H}_6\text{O})$	0	0	<i>excès</i>
État en cours d'évolution	x	$n^\circ(\textit{nitro}) - 2x$	$n^\circ(\text{HO}^-) - 2x$	$n^\circ(\text{C}_3\text{H}_6\text{O}) - 2x$	x	$2x$	<i>excès</i>
État final	x_f	$n^\circ(\textit{nitro}) - 2x_f$	$n^\circ(\text{HO}^-) - 2x_f$	$n^\circ(\text{C}_3\text{H}_6\text{O}) - 2x_f$	x_f	$2x_f$	<i>excès</i>

V. Bilan de matière dans l'état final

1. Recherche du réactif limitant

- Pour chaque réactif, on calcule le rapport $k = \frac{n^o}{coeff.stoech}$
- Ces rapports indiquent dans quelles proportions les réactifs ont été introduits.
- Le réactif limitant (ou réactif en défaut) est celui qui présente le plus petit rapport k .

V. Bilan de matière dans l'état final

1. Recherche du réactif limitant

- $k_{nitro} = \frac{n^o(nitro)}{2} = 3,31 \cdot 10^{-3} \text{ mol}$
- $k_{acet} = \frac{n^o(acet)}{2} = 6,75 \cdot 10^{-2} \text{ mol}$
- $k_{HO^-} = \frac{n^o(HO^-)}{2} = 5,0 \cdot 10^{-3} \text{ mol}$
- $k_{nitro} < k_{HO^-} < k_{acet}$ donc le réactif limitant est le 2-nitrobenzaldéhyde.

V. Bilan de matière dans l'état final

2. Calcul de l'avancement maximal x_{max}

- Si la réaction était totale, le réactif limitant serait complètement consommé et on aurait $n_f(nitro) = n^o(nitro) - 2x_{max} = 0$
- On en déduit qu'on aurait alors $x_f = x_{max} = \frac{n^o(nitro)}{2} = 3,31 \cdot 10^{-3} \text{ mol}$

V. Bilan de matière dans l'état final

3. Bilan de matière dans l'état final

- $n_f(\textit{nitro}) = n^o(\textit{nitro}) - 2x_f = 0 \text{ mol}$
- $n_f(\textit{acet}) = n^o(\textit{acet}) - 2x_f = 1,35 \cdot 10^{-1} - 2 \times 3,31 \cdot 10^{-3} = 1,28 \cdot 10^{-1} \text{ mol}$
- $n_f(\text{HO}^-) = n^o(\text{HO}^-) - 2x_f$
 $n_f(\text{HO}^-) = 1,0 \cdot 10^{-2} - 2 \times 3,31 \cdot 10^{-3} = 3,38 \cdot 10^{-3} \text{ mol}$
- $n_f(\textit{indigo}) = x_f = 3,31 \cdot 10^{-3} \text{ mol}$
- $n_f(\text{CH}_3\text{COO}^-) = 2x_f = 6,62 \cdot 10^{-3} \text{ mol}$
- $n_f(\text{H}_2\text{O})$: excès