Vers une utilisation rationnelle de l'équation-bilan...

par M. LAMAZOU Lycée L.Barthou - 64000 PAU Christian BERGOUNHOU et M. BROST CAPES-Agrégation de Chimie - Bât. 2A Université Paul Sabatier - 31062 TOULOUSE

RÉSUMÉ

Cet article propose une nouvelle méthode d'exploitation des bilans molaires associés aux réactions chimiques, adaptée aux élèves de l'enseignement du deuxième cycle des lycées. La méthode consiste d'abord à effectuer une analyse de la réaction à étudier, puis à la mettre en équation, de façon à séparer les deux aspects, chimique et mathématique. Après l'exposé de la méthode et son application à quelques exemples, le lecteur appréciera les avantages apportés, tant sur le plan de la rigueur que sur celui de la simplicité. L'article se termine par un bref exposé des avantages apportés lors de l'introduction de la notion d'avancement dans l'enseignement Post-Baccalauréat.

1. INTRODUCTION

L'apprentissage de l'équilibration des réactions s'avère toujours délicat pour les élèves [1], surtout dans le cas de réactions successives ou de réactions complexes comme celles qui sont rencontrées dans quelques-uns des dosages introduits dans les nouveaux programmes. Dans ce dernier cas, les difficultés s'accroissent lorsqu'il faut faire le lien entre l'équation-bilan et les quantités réelles de réactifs mises en jeu [2]. En effet, la plupart des élèves trébuchent d'abord sur l'analyse des phénomènes chimiques concernés et ensuite sur leur mise en équation. On peut noter dès à présent que leurs difficultés à élaborer une méthode rationnelle et efficace de résolution du problème ont principalement trois causes :

- L'écriture et la résolution pas à pas des équations, ce qui ne permet pas toujours d'en faire une présentation logique et claire.
- La confusion entre les notions d'équation-bilan et de bilan molaire.
- L'utilisation sans discernement de la relation $c_1 v_1 = c_2 v_2$ qui conduit, la plupart du temps, à un positionnement aléatoire des cœfficients mis en jeu dans les équations successives.

La méthode que nous allons présenter dans un cas simple propose de rationaliser l'analyse des réactions chimiques mises en jeu, la mise en forme des équations les décrivant et leur traitement algébrique conduisant à une formulation claire du résultat.

Nous verrons aussi l'utilisation de cette méthode d'analyse dans quelques-unes de ses applications les plus représentatives et ses prolongements dans l'étude de la chimie dans l'enseignement post-baccalauréat.

2. PRÉSENTATION DE LA MÉTHODE

Nous allons en faire la description lors de son application à un exercice élémentaire d'écriture d'équation-bilan de la réaction du dihydrogène sur le dioxygène, selon différents cas de stœchiométrie des réactifs. Bien que l'exemple choisi ne concerne qu'un mélange de deux réactifs, les raisonnements et leurs conséquences s'appliquent à des mélanges de plusieurs réactifs.

2.1. Écriture et signification de l'équation-bilan

2.1.1. Écriture de l'équation-bilan.

L'écriture de l'équation-bilan est réalisée en «équilibrant la réaction» : le nombre d'atomes de chaque élément chimique doit être le même de chaque côté de la flèche.

$$2 H_2 + O_2 \rightarrow 2 H_2O$$

Les coefficients de l'équation, placés devant les espèces chimiques sont appelés nombres stœchiométriques (anciennement coefficients stœchiométriques) et seront choisis préférentiellement de manière à ce que le plus petit d'entre eux soit égal à 1.

L'écriture de l'équation-bilan est symbolique et ne présume en rien de la quantité de matière mise en jeu (les nombres de moles). Elle suppose que la réaction est totale dans le sens gauche-droite. Elle permet de connaître les proportions relatives des réactifs et des produits.

2.1.2. Signification quantitative de l'équation-bilan

L'équation-bilan s'exprime de la manière suivante :

2 moles de dihydrogène réagissent avec 1 mole de dioxygène et il se forme 2 moles d'eau.

On peut généraliser sous la forme :

2k moles de dihydrogène réagissent avec 1k moles de dioxygène et il se forme 2k moles d'eau.

2.2. Cas d'une réaction effectuée dans les proportions stœchiométriques

2.2.1. Expression du bilan molaire dans les proportions stœchiométriques

Le bilan molaire permet d'effectuer le lien entre les quantités de matière réellement utilisées et l'équation-bilan.

2.2.2. Définition du bilan-molaire associé à une équation-bilan

Le bilan-molaire exprime quantitativement l'état initial (E.I.) et l'état final (E.F.) d'une réaction chimique, c'est-à-dire les quantités de matière de réactifs à l'état initial et de produits à l'état final.

2.2.3. Définition d'un mélange de réactifs stoechiométrique

Un mélange de réactifs stœchiométrique est un mélange de réactifs qui respecte en quantité les proportions indiquées par l'équation-bilan.

Reprenons l'exemple de la réaction du dihydrogène sur le dioxygène, d'équation-bilan :

$$2 H_2 + O_2 \rightarrow 2 H_2O$$

et envisageons la réaction à partir d'un mélange ainsi constitué :

- $-n_1$, quantité de dihydrogène, H_2
- $-n_2$, quantité de dioxygène, O_2

Si le mélange est stœchiométrique, on a : $\frac{n_1}{2} = \frac{n_2}{1}$

On conviendra par la suite d'appeler k_i ce quotient :

$$k_i = \frac{quantit\'e~de~l'~esp\`ece~i~consid\'er\'ee}{nombre~stœchiom\'etrique~dans~l'~\'equation - bilan}$$

Comme le mélange est stœchiométrique, ce quotient k_i prend ici la même valeur k pour les deux réactifs : $k_1=k_2=k$

La signification quantitative de l'équation-bilan peut s'exprimer ainsi : $\ll 2k$ moles de H_2 réagissent avec k moles de O_2 et il se forme 2k moles de H_2O ».

Le bilan-molaire du mélange de réactifs stœchiométrique s'écrit alors de manière générale sous la forme :

		$2H_2$	+	O_2	\rightarrow	$2H_2O$	
		n_1		n_2		n_3	(mol)
Bilan molaire	E.I.	2k		1k		0	(mol)
	E.F.	0		0		2k	(mol)

Exemples de bilans molaires dans les conditions stœchiométriques :

	cas n°1			cas n°2			cas n°3		
	H_2	O_2	H ₂ O	H_2	02	H ₂ O	H_2	02	H ₂ O
E.I. (mol)	0.064	0.032	0	106	53	0	2	1	0
E.F. (mol)	0	0	0.064	0	0	84	0	0	2
$k_i \ (mol)$	$\frac{0,064}{2}$	0,032	$\frac{0,064}{2}$	$\frac{106}{2}$	<u>53</u> 1	$\frac{106}{2}$	$\frac{2}{2}$	$\frac{1}{1}$	$\frac{2}{2}$
	= 0,032	= 0,032	= 0,032	= 53	= 53	= 53	= 1	= 1	= 1

3. CAS D'UNE RÉACTION EFFECTUÉE DANS DES PROPORTIONS NON-STŒCHIOMÉTRIQUES

3.1. Écriture et signification de l'équation-bilan

$$2 H_2 + O_2 \rightarrow 2 H_2O$$

L'équation-bilan s'écrit exactement comme dans le cas d'un mélange stœchiométrique. La signification quantitative de l'équation-bilan s'énonce de la même manière : $\underbrace{^2k \text{ moles}}_{2}$ de H_{2} réagissent avec \underline{k} moles de H_{2} et il se forme \underline{k} moles de H_{2} O».

3.2. Analyse d'un mélange de réactifs non-stœchiométrique

3.2.1. Définition d'un mélange de réactifs non stœchiométrique

Un mélange de réactifs non stœchiométrique est un mélange de réactifs qui ne respecte pas en quantité les proportions indiquées par l'équation-bilan.

On utilise les mêmes notations que précédemment, à savoir :

 $-n_1$, la quantité initiale de dihydrogène, H_2

- $-n_2$, la quantité initiale de dioxygène, O_2
- $-n_3$, la quantité d'eau formée, H_2O

Pour différents mélanges non stœchiométriques, calculons le quotient k_i associé à chacun des réactifs des 3 mélanges considérés :

	cas n°1			cas n°2			cas n°3		
	H_2	O_2	H ₂ O	H_2	O_2	H ₂ O	H_2	O_2	H_2O
E.I. (mol)	6	2	0	866	321	0	4	4	0
$k_i \ (mol)$	$\frac{6}{2}$	$\frac{2}{1}$		$\frac{866}{2}$	$\frac{321}{1}$		$\frac{4}{2}$	$\frac{4}{1}$	
	= 3	= 2		= 433	= 321		= 2	= 4	

On constate que, dans chacun des cas : $k_1 \neq k_2$

3.2.2. Conclusion

Un mélange de réactifs est non stœchiométrique si, et seulement si, les valeurs des quotients k_i sont différentes pour chaque réactif.

3.3. Établissement du bilan molaire

Deux cas sont possibles, selon qu'il y a un excès de dioxygène (soit un défaut de dihydrogène), ou un excès de dihydrogène (soit un défaut de dioxygène).

3.3.1. Excès de dihydrogène : $k_1 > k_2$

Si H_2 est en excès, la totalité de O_2 réagit, c'est-à-dire $n_2 = 1k_2$ mol.

 \Rightarrow O_2 est en <u>défaut</u>, c'est le <u>réactif en défaut</u> ou <u>réactif limitant</u>.

La signification quantitative de l'équation-bilan ne peut pas être exprimée à partir de la quantité de dihydrogène, car ce réactif est en excès (la totalité des $n_1 = 2k_1 \ mol$ de H_2 ne réagit pas). On l'exprime à partir du réactif limitant puisqu'il est entièrement consommé :

«1 k_2 mol de O_2 réagissent avec $2k_2$ mol de H_2 et il se forme $2k_2$ mol de H_2O ».

Comme il y avait $2k_1$ mol de H_2 introduites, il reste donc en excès :

$$2k_1 - 2k_2 = 2(k_1 - k_2) \text{ mol de } H_2$$

Le bilan molaire se présente sous la forme :

<u>Remarque très importante</u>: C'est le réactif en défaut (encadré dans le tableau) qui détermine la signification quantitative de l'équation-bilan.

3.3.2. Excès de dioxygène : $k_2 > k_1$

Si O_2 est en excès, la totalité de H_2 réagit, c'est-à-dire $n_1 = 2k_1$ mol.

 \Rightarrow H_2 est en défaut, c'est le réactif en défaut ou réactif limitant.

La signification quantitative de l'équation-bilan ne peut pas être exprimée à partir de la quantité de dioxygène, car ce réactif est en excès (la totalité des $n_2 = 1k_2$ mol de O_2 ne réagit pas). On le fait avec le dihydrogène, réactif limitant.

« $2k_1$ mol de H_2 réagissent avec $1k_1$ mol de O_2 et il se forme $2k_1$ mol de H_2O ».

Comme il y avait k_2 mol de O_2 introduites, il reste donc en excès :

$$(k_2 - k_1) mol de O_2$$

Le bilan molaire se présente sous la forme :

<u>Remarque très importante</u>: C'est toujours le réactif en défaut (encadré dans le tableau) qui détermine la signification quantitative de l'équation-bilan.

Reprenons les trois mélanges évoqués dans les cas 1, 2 et 3 du paragraphe 3.2.1., et écrivons le bilan molaire :

	cas n°1 (O ₂ en défaut)			cas n°2 (O ₂ en défaut)			cas n°3 (H ₂ en défaut)		
	H_2	02	H ₂ O	H_2	02	H ₂ O	H_2	02	H ₂ O
E.I. (mol)	6	2	0	866	321	0	4	4	0
$k_i \text{ (mol)}$	3	2		433	321		2	4	
E.F. (mol)	2	0	4	224	0	642	0	2	4

3.3.3. Conclusion

Le bilan-molaire permet de déterminer la quantité de matière de chaque composé participant à la réaction chimique.

Il suffit de connaître la valeur du quotient k pour un mélange de réactifs stœchiométrique et des quotients k_i pour un mélange de réactifs non-stœchiométrique.

3.4. Résumé des bilans molaires dans les différents cas de stœchiométrie du mélange :

		2 H ₂	+ 02	\rightarrow	2 H ₂ O
Bilan-molaire	E.I. (mol)	2 k ₁	1 k ₂		0
$k_1 = k_2$	E.F. (mol)	0*	0*		$2 k_1 = 2 k_2$
$k_2 < k_1$	E.F. (mol)	$2(k_1 - k_2)$	0*		$2 k_2$
$k_1 < k_2$	E.F. (mol)	0*	$1(k_2 - k_1)$		2 k ₁

^{* (}ces cases correspondent au réactif limitant)

4. LES DIFFÉRENTES ÉTAPES D'APPLICATION DE LA MÉTHODE [3]

Méthodologie de la détermination de la quantité de matière de chaque corps participant à une réaction chimique :

- 1. compréhension de la nature du (ou des) phénomène(s) chimique(s);
- 2. écriture de l'équation-bilan (ou des équations-bilan);
- 3. signification quantitative de l'équation-bilan;

- 4. calcul des quotients k_i pour déterminer la stœchiométrie du mélange;
- 5. établissement du bilan molaire.

5. EXERCICES ILLUSTRANT LA MÉTHODOLOGIE

On fait éclater une étincelle dans un mélange gazeux constitué de $v_1 = 44.8 \text{ cm}^3$ de dihydrogène et $v_2 = 33.6 \text{ cm}^3$ de dioxygène (volumes déterminés dans les conditions normales de température et de pression (C.N.T.P.)). Quelle est la composition du mélange obtenu après réaction (volumes des gaz déterminés dans les C.N.T.P.)?

5.1. Compréhension du phénomène chimique

Le dihydrogène et le dioxygène réagissent pour former de l'eau.

5.2. Écriture de l'équation-bilan

indices (1) (2) (3)
$$2H_2 + O_2 \rightarrow 2H_2O$$

Les nombres stœchiométriques sont 2 pour H_2 , 1 pour O_2 et 2 pour H_2O .

5.3. Analyse du mélange des réactifs.

Le mélange des réactifs est imposé par le texte de l'énoncé. Est-il stœchiométrique ?

Pour répondre à la question «est-il stœchiométrique ? », calculons k_1 et k_2 en utilisant le volume molaire V_0 .

dihydrogène:

$$V_0 = \frac{V_1}{2k_1}$$
 \Rightarrow $k_1 = \frac{v_1}{2V_0} = \frac{44.8}{2 \times 22400} = 0,00100 \ mol$

dioxygène:

$$V_0 = \frac{V_2}{k_2}$$
 \Rightarrow $k_2 = \frac{v_2}{V_0} = \frac{33,6}{22400} = 0,00150 \ mol$

 $k_1 \neq k_2$: le mélange est non-stœchiométrique.

 $k_2 > k_1$: le dioxygène est en excès. H_2 est en défaut : c'est le réactif limitant.

5.4. Établissement du bilan molaire

5.4.1. Signification quantitative de l'équation-bilan.

Le dihydrogène est le réactif limitant, il détermine la signification quantitative de l'équation-bilan.

«2k moles de H_2 réagissent avec k moles de O_2 et il se forme 2k moles de H_2O »

5.4.2. Bilan molaire

* *H*₂ est le réactif limitant :

il a été entièrement consommé. Il ne reste plus de dihydrogène dans le mélange final.

* O2 est en excès :

comme il y avait k_2 moles de dioxygène introduites, il reste donc $(k_2 - k_1)$ mol de O_2 .

* Il se forme $2k_1$ moles d'eau :

5.5. Calcul de la composition du mélange final

* Volume de O_2 en excès :

$$V_0 = \frac{v_2'}{k_2 - k_1} \qquad v_2' = (k_2 - k_1)V_0 = (0,0015 - 0,0010) \times 22400 \ cm^3$$
$$v_2' = 11,2 \ cm^3$$

* Quantité d'eau formée :

$$2k_1 = 0.002 \ mol$$

Le lecteur avisé peut prendre un exemple avec un mélange contenant un défaut de \mathcal{O}_2 et faire lui-même le calcul.

Remarque:

Les volumes des deux gaz, O_2 et H_2 , sont mesurés dans les même conditions de température et de pression. Dans l'hypothèse des gaz parfaits, il y a donc proportionnalité entre le volume des gaz et la quantité de matière des réactifs.

On peut donc établir un bilan volumique pour les gaz :

Pour savoir si le mélange des réactifs est stœchiométrique, il suffit de calculer v et v'.

$$v_1 = 2v$$
 \Rightarrow $v = \frac{v_1}{2} = 22,4 \text{ cm}^3$
 $v_2 = v'$ \Rightarrow $v' = 33,6 \text{ cm}^3$

v < v', donc H_2 est le réactif limitant.

Bilan volumique:

6. EXEMPLES D'APPLICATION

6.1. Exercice 1 : Dosage en retour de l'éthanol par les ions dichromate

<u>Énoncé</u>: Dans un erlenmeyer, verser v_1 ml de solution d'anion dichromate de concentration c_1 , de l'eau distillée, puis v_2 ml de solution d'éthanol à doser (en défaut par rapport au dichromate). Après réaction, titrer le dichromate qui n'a pas réagi par une solution de fer(II) à la concentration c_3 . Le volume de la solution de fer ferreux versé à l'équivalence est v_3 . Calculer la concentration c_2 de la solution d'éthanol.

<u>Remarque</u>: Nous utiliserons dans cet exercice des variables autres que k_1 , k_2 , k_3 , etc. (par exemple a, b, d, e, etc.), à l'exclusion de variables traditionnellement affectées aux concentrations (c), aux quantités globales de réactifs (n), aux volumes (v), aux masses (m), afin de moins formaliser l'écriture.

Dans un premier temps, tout l'éthanol initialement présent en solution (réactif limitant) a réagi avec les ions dichromate versés en excès. Evaluons la quantité d'ions dichromate en excès.

L'équation-bilan et le bilan molaire s'écrivent :

$$2 Cr_2 O_7^{2-} + 3 C_2 H_5 O H + 16 H_3 O^+ \rightarrow 4 Cr^{3+} + 3 C H_3 C O_2 H + 27 H_2 O$$
 (1)

E.I.
$$2a$$
 $3b$ excès
E.F. $n_1 = 2(a-b)$ 0

Dans un deuxième temps, les ions dichromate en excès, $n_1 = 2(a-b)$, sont dosés par les ions Fe^{2+} . L'équation-bilan et le bilan molaire s'écrivent :

$$Cr_2 O_7^{2-} + 6Fe^{2+} + 14H_3O^+ \rightarrow 2Cr^{3+} + 6Fe^{3+} + 21H_2O$$
 (2)

E.I.
$$d$$
 6e excès

A l'équivalence, le mélange des réactifs est stœchiométrique :

$$\Rightarrow$$
 $d = e$ \Rightarrow $n_1 = d = 2(a - b) = e$ équation (I)

A ce stade de la résolution de l'exercice, la compréhension du phénomène chimique est terminée. Effectuons les calculs :

$$c_2 = \frac{3b}{v_2} \qquad \Rightarrow \qquad b = \frac{c_2 v_2}{3}$$

$$\left[C r_2 O_7^{2-} \right]_0 = c_1 = \frac{2a}{v_2} \qquad \Rightarrow \qquad a = \frac{c_1 v_1}{2}$$

$$\left[F e^{2+} \right]_0 = c_3 = \frac{6e}{v_3} \qquad \Rightarrow \qquad e = \frac{c_3 v_3}{6}$$

remplaçons a, b, et e dans l'équation (I) :

$$2\left(\frac{c_1v_1}{2} - \frac{c_2v_2}{3}\right) = \frac{c_3v_3}{6}$$

On a alors:

$$c_2 = \frac{6c_1v_1 - c_3v_3}{4v_2}$$

6.2. Exercice 2 : Concours Kiné TOULOUSE 1989 (niveau second cycle).

<u>Énoncé</u>: On introduit $m_1 = 1,27$ g de cuivre dans v = 100 mL d'une solution de nitrate d'argent. La réaction terminée, il reste un résidu solide que l'on sépare par filtration. Le résidu solide, lavé et séché a une masse m = 2,4 g.

- 1. Écrire l'équation-bilan et montrer que le cuivre est en excès.
- 2. Déterminer la masse d'argent contenue dans le résidu.
- 3. Déduire la concentration molaire volumique de la solution de nitrate d'argent.

Solution:

1. Équation-bilan.

indices (1) (2) (3) (4)
$$Cu + 2Ag^{+} \rightarrow Cu^{2+} + 2Ag$$

Traduisons le bilan-molaire en admettant Cu en excès, c'est-à-dire Ag^+ réactif limitant.

$$Cu$$
 + $+2Ag^{+}$ \rightarrow Cu^{2+} + $2Ag$
E.I. $1a$ $2b$ 0 0
E.F. a - b 0 $1b$ $2b$

La compréhension du phénomène chimique est terminée. Effectuons les calculs. Pour démontrer que Cu est en excès, il suffit de prouver que (a-b) > 0.

Exploitons les deux informations du texte :

masse de Cu, $m_1 = 1,27 g$,

masse du résidu $m_1' + m_2 = 2.4 g$ ($m_1' =$ masse de cuivre ; $m_2 =$ masse d'argent).

En appliquant la définition de la masse molaire :

$$M_1 = \frac{m_1}{a} \quad \Rightarrow \quad a = \frac{m_1}{M_1}$$
 relation (1)

$$M_1 = \frac{m'_1}{a-b}$$
 \Rightarrow $m'_1 = M_1 \cdot (a-b)$

$$M_2 = \frac{m_2}{2b} \implies m_2 = M_2 \cdot 2b$$

d'où la masse du résidu : $m = M_1 \cdot (a - b) + M_2 \cdot 2b$ relation (2)

Les relations (1) et (2) forment un système de deux équations à deux inconnues :

$$b = \frac{m - m_1}{2M_2 - M_1}$$

$$a - b = \frac{m_1}{M_1} - \frac{m - m_1}{2M_2 - M_1} \implies a - b = 1,26 \left[g.g^{-1}.mol = mol\right]$$

a - b > 0: le cuivre est bien en excès.

2. Calcul de la masse d'argent présente dans le résidu

Appliquons la définition de la masse molaire pour l'argent.

$$M_2 = \frac{m_2}{2b} \Rightarrow m_2 = M_2.2b = M_2.2\frac{m - m_1}{2M_2 - M_1} = 2(m - m_1)\frac{M_2}{2M_2 - M_1} \Rightarrow m_2 = 1,6g$$

3. Calcul de la concentration molaire volumique de la solution de nitrate d'argent : c

$$c = [Ag^+] = \frac{2b}{v} = \frac{1}{v} \left(2\frac{m - m_1}{2M_2 - M_1} \right) \implies c = 0.15 \text{ mol. } L^{-1}$$

7. EXTENSION DE LA MÉTHODE

7.1. Cas d'une réaction totale

Revenons à la réaction entre le dihydrogène et le dioxygène. Le bilan-molaire associé à la réaction effectuée à partir d'un mélange de réactifs stœchiométrique se présente sous la forme :

	$2H_2$	+	O_2	\rightarrow	$2H_2O$
	n_1		n_2		n_3
E.I.	2k		1 <i>k</i>		0
E.F.	0		0		2k

Les relations entre les rapports des quantités de matière mises en jeu nous ont permis de poser (vide supra) :

$$\frac{n_1}{2} = \frac{n_2}{1} = \frac{n_3}{2} = k$$

Généralisation

Comparons ce quotient à l'avancement maximum de réaction [4,5]. Pour une équation-bilan écrite sous la forme généralisée :

$$0 = \sum_{i} v_i B_i$$

avec : v_i = nombre stechiométrique algébrique (négatif pour les réactifs, positif pour les produits), on définit l'avancement maximum $\xi_{(max)}$ ainsi :

$$\xi_{\text{(max)}} = \frac{n_{i(E.F.)} - n_{i(E.I.)}}{v_i}$$

soit ici:

$$\xi_{\text{(max)}} = \frac{n_{1(E.F.)} - n_{1(E.I.)}}{-2} = \frac{n_{2(E.F.)} - n_{2(E.I.)}}{-1} = \frac{n_{3(E.F.)} - n_{3(E.I.)}}{2}$$

Lorsque la réaction est effectuée dans les conditions stœchiométriques et qu'elle est totale :

$$\xi_{\text{(max)}} = \frac{-n_1}{-2} = \frac{-n_2}{-1} = \frac{n_3}{2}$$

et:

$$k = \frac{n_1}{2} = \frac{n_2}{1} = \frac{n_3}{2}$$

$$\xi_{(\text{max})} = k$$

Lorsque la réaction est effectuée dans des conditions non stœchiométriques, par exemple $k_1 < k_2$ (défaut de dihydrogène) :

$$\xi_{(E.F.)} = \xi_{max} = \frac{0 - 2k_2}{-2} = \frac{(k_2 - k_1) - k_2}{-1} = \frac{2k_1}{2} = k_1$$

$$\xi_{(max)} = k_1$$

L'avancement maximum est imposé par le réactif en défaut.

7.2. Cas d'une réaction conduisant à un équilibre

<u>Exemple</u>: la réaction de synthèse de l'ammoniac NH_3 en phase gazeuse à partir de N_2 et H_2 .

* A partir d'un mélange stœchiométrique des réactifs :

Si on compare les rapports des quantités de matière respectivement, consommées pour les réactifs, formée pour le produit, on a la relation :

$$\frac{n_0 - n_e}{1} = \frac{3(n_0 - n_e)}{3} = \frac{2n_e}{2} = \xi_e$$

Ce rapport commun est l'avancement à l'équilibre, et on présentera le bilan-molaire de manière classique :

	N_2	+	$3H_2$	\rightarrow	$2NH_3$
E.I.	n_0		$3n_0$		0
E.F. (équilibre)	$n_0 - \xi_e$		$3(n_0 - \xi_e)$		$2\xi_e$

* A partir d'un mélange non-stœchiométrique des réactifs :

on écrira de même :

$$\frac{n_1 - n_{1,e}}{1} = \frac{n_2 - n_{2,e}}{3} = \frac{n_{3,e}}{2} = \xi_e$$

et le bilan-molaire se présentera ainsi :

La sensibilisation précoce à la notion d'avancement de réaction ne peut qu'être très profitable au moment d'aborder dans l'enseignement supérieur l'étude de la réaction chimique sous les aspects thermodynamique et cinétique.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] C. Garnier-Cousin, BUP n° 803, Avril 1998, page 641.
- [2] A. GILLES, BUP n° 785, Juin 1996, page 1141.
- [3] Un ouvrage d'exercices de chimie, niveau classe de seconde, est en cours d'élaboration. Il présente les énoncés (et les corrigés correspondants) d'exemples de différents niveaux de complexité, permettant ainsi d'illustrer toute l'efficacité de la méthode. Sa parution fera l'objet d'une annonce dans le BUP.
- [4] M. Laffite et F. Roucayrol, BUP n° 704, Mai 1988, page 559.
- [5] A.GRUGER, «Thermodynamique et équilibres chimiques», 1997, Dunod, ISBN 2-10-002752-2