

L'ESSENTIEL DU COURS

A- NOTION D'AVANCEMENT D'UNE REACTION CHIMIQUE.

- * Une entité chimique est tout individu moléculaire, ionique ou atomique.
- * Une espèce chimique est tout corps pur à l'état atomique ou moléculaire.
- * Une transformation chimique est tout processus au cours duquel il y a modification de la quantité de matière de certains ou de tous les constituants du système chimique avec apparition de nouveaux constituants.
- * L'avancement, x , d'une transformation chimique est le nombre de fois que la réaction a avancé (ou marché) depuis l'état initial exprimé dans le système international d'unité en mol.
- * Tableau d'avancement du système chimique (ou tableau descriptif d'évolution d'un système chimique)

Equation chimique		$aA + bB \longrightarrow cC + dD$			
Etat du système	Avancement.	Quantité de matière en mol			
Etat initial ($t=0$)	0	$n_{0/A}$	$n_{0/B}$	0	0
En cours de réaction ($0 < t < t_f$)	x	$n_{t/A} = n_{0/A} - ax$	$n_{t/B} = n_{0/B} - bx$	cx	dx
Etat final ($t=t_f$)	x_f	$n_{f/A} = n_{0/A} - ax_f$	$n_{f/B} = n_{0/B} - bx_f$	cx_f	dx_f

- x_f : C'est l'avancement final, c'est l'avancement de la transformation à la fin de la réaction.
- A et B sont les réactifs de la transformation. C et D sont les produits de la transformation.
a, b, c et d sont les coefficients stœchiométriques de l'équation qui modélise la transformation.
- Pour le réactif A :

$n_{0/A}$: Nombre de mole initial du réactif A.

ax : nombre de mole de A réagit à un instant de date t.

$n_{t/A} = n_{0/A} - ax$: Nombre de mole de A présent dans le système chimique à l'instant de date t.

- Expression de l'avancement x :

$$x = \frac{n_{0/A} - n_A}{a} = \frac{n_{0/B} - n_B}{b} = \frac{n_C}{c} = \frac{n_D}{d}$$

- * Si la transformation chimique se produit à volume constant, dans un système formé d'une seule phase, on définit l'avancement volumique, y , de la transformation comme étant le quotient de l'avancement, x , par le volume v de la solution.

$$\text{mol.L}^{-1} \longrightarrow y = \frac{x}{v} \longleftarrow \begin{matrix} \text{mol} \\ \text{L} \end{matrix}$$

* Tableau d'avancement du système chimique en fonction de l'avancement volumique de la transformation chimique :

Equation chimique		aA	+	bB	→	cC	+	dD
Etat du système	Avancement volumique mol.L ⁻¹	Concentration molaire (mol.L ⁻¹)						
Etat initial (t=0)	0	$[A]_{0/mél}$		$[B]_{0/mél}$		0		0
En cours de réaction (0 < t < t _f)	y	$[A] = [A]_{0/mél} - ay$		$[B] = [B]_{0/mél} - by$		cy		dy
Etat final (t=t _f)	y _f	$[A]_f = [A]_0 - ay_f$		$[B]_f = [B]_{0/mél} - by_f$		cy _f		dy _f

- Pour le réactif A : $[A]_0 = \frac{C_A \cdot V_A}{V}$: Concentration molaire initiale du réactif A dans le mélange.

C_A et V_A sont respectivement la concentration molaire initiale et le volume de la solution contenant le réactif A.

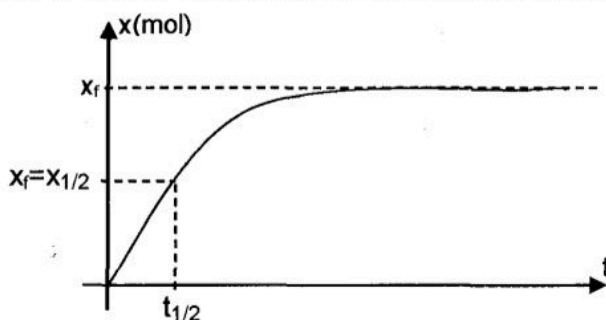
V : Volume total du système chimique.

$[A] = [A]_{0/mél} - a \cdot y$: Concentration molaire du réactif A dans le mélange à l'instant de date t.

* Le temps de demi réaction, $t_{1/2}$, est la durée au bout de laquelle l'avancement de la réaction, $x_{1/2}$ atteint la moitié de sa valeur finale.

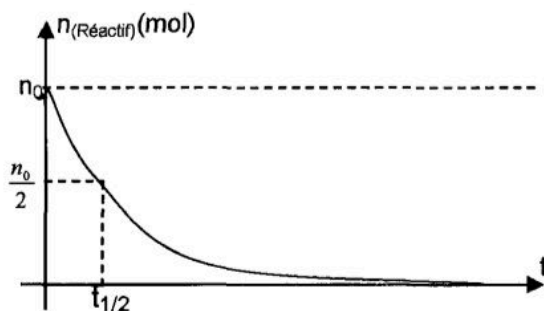
- Détermination graphique de $t_{1/2}$:

- D'après la courbe d'évolution d'avancement de la transformation :

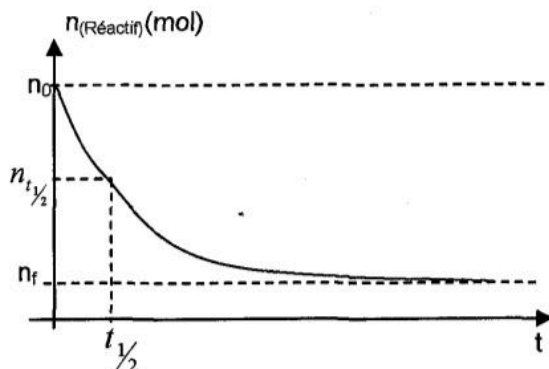


- D'après la courbe d'évolution de la quantité de matière d'un réactif:

* Si le réactif est limitant :



*Si le réactif est en excès :



$$n_{t_{1/2}} = n_0 - n_{\text{réactif}}(t_{1/2}) = n_0 - \frac{(n_0 - n_f)}{2} = \frac{n_0 + n_f}{2}$$

* L'avancement maximal, $x_{\max}$, d'une transformation chimique est l'avancement d'une transformation chimique à la fin de la réaction tout en supposant qu'elle est totale.

- Pour une réaction totale (le réactif limitant disparaît entièrement à la fin de la réaction): $x_f = x_{\max}$.

- Pour une réaction limitée (coexistence en quantité de matière constante, de tous les constituants du mélange réactionnel) : $x_f < x_{\max}$.

- Détermination de $x_{\max}$:

En supposant que cette transformation est totale : $aA + bB \longrightarrow cC + dD$

A partir du réactif A : $n_{0/A} - ax \geq 0$ alors $x \leq \frac{n_{0/A}}{a}$.

A partir du réactif B : $n_{0/B} - bx \geq 0$ alors $x \leq \frac{n_{0/B}}{b}$.

$$x_{\max} = \text{Inférieur}\left(\frac{n_{0/A}}{a}, \frac{n_{0/B}}{b}\right).$$

* Le taux d'avancement final d'une transformation chimique, τ_f , est égal au quotient de son avancement final, x_f , par son avancement maximal $x_{\max}$.

Formule de τ_f : $\tau_f = \frac{x_f}{x_{\max}}$ (Sans unité).

- Expression de τ_f en fonction de l'avancement volumique : $\tau_f = \frac{x_f}{x_{\max}} = \frac{\frac{v}{v_{\max}}}{\frac{v_{\max}}{v}} = \frac{y_f}{y_{\max}}$.

• Si $\tau_f = 1$ alors $x_f = x_{\max}$: D'où la réaction est totale.

• Si $\tau_f < 1$ alors $x_f < x_{\max}$: D'où la réaction est limitée.

- * Une transformation chimique est dite totale si l'un, au moins, des réactifs réagit totalement.
- * Une transformation chimique est dite limitée si les réactifs ne réagissent pas totalement à la fin de la transformation.

B- VITESSE D'UNE REACTION CHIMIQUE.

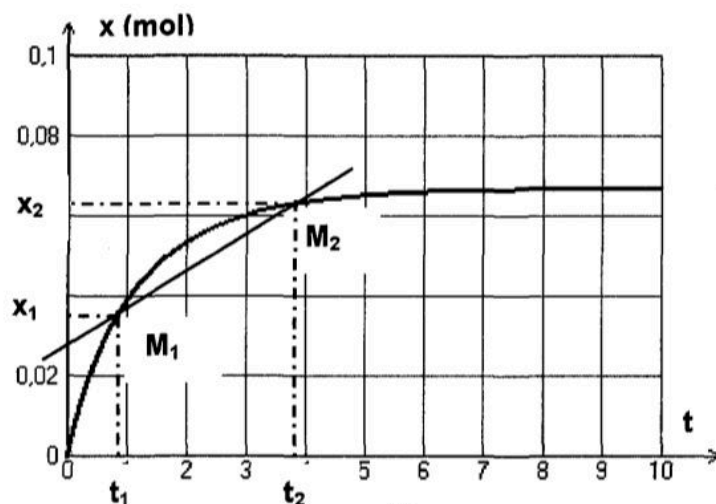
- * La vitesse moyenne d'une réaction chimique entre les dates t_1 et t_2 , notée $V_{\text{moy}}(t_1, t_2)$ est une grandeur qui renseigne sur la variation de son avancement x , dans l'intervalle de temps (t_1, t_2) par unité de temps

$$\text{mol.s}^{-1} \longrightarrow V_{\text{moy}}(t_1, t_2) = \frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{x(t_2) - x(t_1)}{t_2 - t_1} \quad \leftarrow \begin{matrix} \text{mol} \\ \text{s} \end{matrix}$$

- Détermination graphique d'une vitesse moyenne d'une réaction chimique.

$V_{\text{moy}}(t_1, t_2) = \frac{\Delta x}{\Delta t}$: Coefficient directeur de la droite passant par les points M_1 et M_2 de la courbe $x=f(t)$

d'abscisses respectives t_1 et t_2 . $V_{\text{moy}}(t_1, t_2) = \frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{x_2 - x_1}{t_2 - t_1}$.



- Si le mélange réactionnel est à volume constante et homogène, il est commode de définir une vitesse volumique moyenne de réaction entre deux dates t_1 et t_2 notée $V_{V\text{moy}}(t_1, t_2)$.

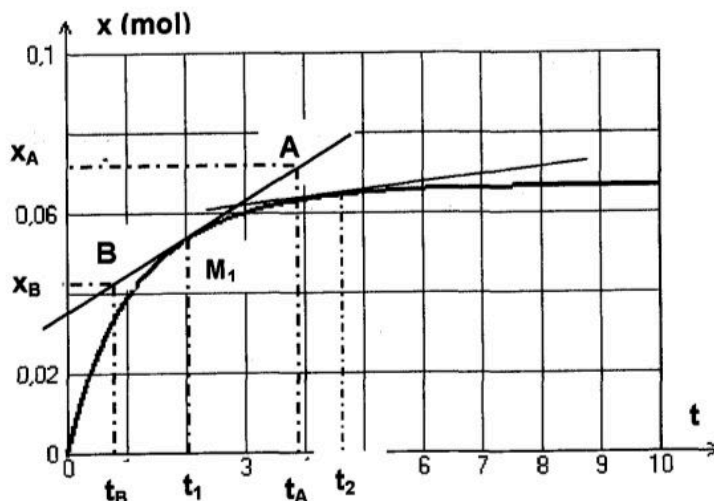
$$\text{mol.L}^{-1}.\text{s}^{-1} \longrightarrow V_{V\text{moy}}(t_1, t_2) = \frac{1}{V} V_{\text{moy}}(t_1, t_2) = \frac{y(t_2) - y(t_1)}{t_2 - t_1} = \frac{\Delta y}{\Delta t} \quad \leftarrow \begin{matrix} \text{mol.L}^{-1} \\ \text{s} \end{matrix}$$

- * La vitesse instantanée d'une réaction chimique à un instant de date t_1 , notée $V(t_1)$, est la limite vers laquelle tend la vitesse moyenne de la réaction entre les instants de dates t_1 et t_2 lorsque t_2 tend vers t_1 .

$$V(t_1) = \lim_{t_2 \rightarrow t_1} V_{\text{moy}}(t_1, t_2) = \lim_{\Delta t = t_2 - t_1 \rightarrow 0} \frac{\Delta x}{\Delta t} = \left(\frac{dx}{dt} \right)_{t_1}$$

- Détermination graphique d'une vitesse instantanée d'une réaction chimique.

$$V(t_1) = \left(\frac{dx}{dt} \right)_{t_1} : \text{Coefficient directeur de la tan à la courbe } x=f(t) \text{ au point } M_1 \text{ d'abscisse } t_1. \quad V(t_1) = \frac{x_A - x_B}{t_A - t_B}$$



- La vitesse volumique instantanée de la réaction en $\text{mol.L}^{-1}.\text{s}^{-1}$ est exprimée par: $V_V(t_1) = \frac{1}{V} V(t_1) = \left(\frac{dy}{dt} \right)_{t_1}$.

- * Autres expressions de la vitesse moyenne d'une réaction chimique.

On considère l'équation de la réaction chimique symbolisée par l'équation suivante :



$$V_{\text{moy}}(t_1, t_2) = \frac{\Delta x}{\Delta t} = -\frac{1}{a} \frac{\Delta n_A}{\Delta t} = -\frac{1}{b} \frac{\Delta n_B}{\Delta t} = \frac{1}{c} \frac{\Delta n_C}{\Delta t} = \frac{1}{d} \frac{\Delta n_D}{\Delta t}$$

$$V_{V\text{moy}}(t_1, t_2) = \frac{\Delta y}{\Delta t} = -\frac{1}{a} \frac{\Delta [A]}{\Delta t} = -\frac{1}{b} \frac{\Delta [B]}{\Delta t} = \frac{1}{c} \frac{\Delta [C]}{\Delta t} = \frac{1}{d} \frac{\Delta [D]}{\Delta t}$$

- * Autres expressions de la vitesse instantanée d'une réaction chimique à t_1 .

$$V(t_1) = \left(\frac{dx}{dt} \right)_{t_1} = -\frac{1}{a} \frac{dn_A}{dt} = -\frac{1}{b} \frac{dn_B}{dt} = \frac{1}{c} \frac{dn_C}{dt} = \frac{1}{d} \frac{dn_D}{dt} \Big|_{t_1}$$

$$V_V(t_1) = \left(\frac{dy}{dt} \right)_{t_1} = -\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} \Big|_{t_1} = -\frac{1}{b} \frac{d[B]}{dt} \Big|_{t_1} = \frac{1}{c} \frac{d[C]}{dt} \Big|_{t_1} = \frac{1}{d} \frac{d[D]}{dt} \Big|_{t_1}$$

- * Justification graphique de la diminution de la valeur instantanée d'une réaction chimique.

$$a_1 = \left(\frac{dx}{dt} \right)_{t_1} : \text{Coefficient directeur de la tg } \Delta_1$$

$$a_2 = \left(\frac{dx}{dt} \right)_{t_2} : \text{Coefficient directeur de la tg } \Delta_2$$

Graphiquement, on constate que $a_1 > a_2$ d'où la vitesse de la réaction diminue au cours du temps, elle est maximale à $t=0$ et s'annule à la fin de la réaction.

* Les facteurs cinétiques.

Un facteur cinétique est un paramètre qui influe sur la vitesse d'une réaction chimique.

Les principaux facteurs cinétiques sont :

- Concentration des réactifs.

La vitesse d'une réaction chimique croît lorsqu'on augmente la concentration des réactifs et inversement.

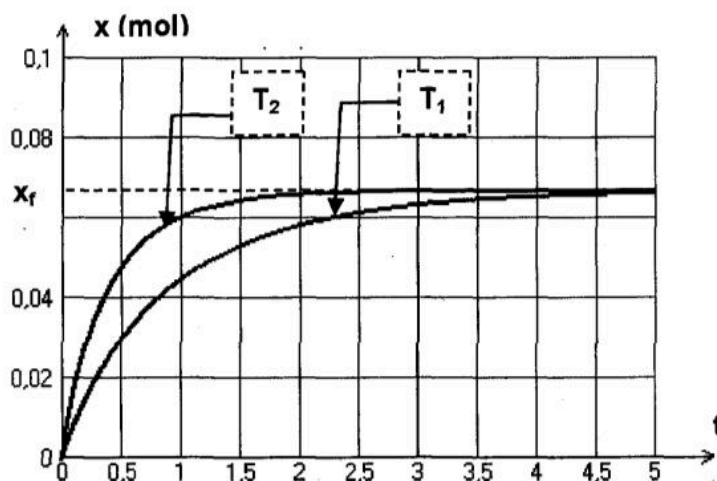
La vitesse d'une réaction est maximale à la date de début de la réaction, car la concentration des réactifs est maximale.

La vitesse d'une réaction décroît au cours du temps, car la concentration des réactifs diminue au cours du temps.

- Température.

La vitesse d'une réaction chimique croît lorsqu'on augmente la température et inversement.

Dans le cas d'une réaction totale ou limitée et athermique, avec $T_2 > T_1$, on représente les deux courbes suivantes.



- Catalyseur.

Un catalyseur est une entité chimique utilisée en faible quantité, capable d'augmenter la vitesse d'une réaction chimique, possible spontanément, sans être consommé.

- * Les facteurs cinétiques qui influent suite à l'addition de l'eau glacée dans un mélange réactionnel sont la température et la concentration des réactifs.