Fiche 1 — Décrire et modéliser une transformation chimique

Table des matières

1	La n	La matière en transformation 1				
	1.1	De l'observation au modèle	1			
	1.2	Qu'est-ce qu'un système physico-chimique?	2			
	1.3	Transformation physique ou chimique?	2			
	1.4	Modélisation microscopique	4			
2	Décrire un système physico-chimique					
	2.1	Variables d'état	6			
	2.2	Equation d'état	8			
	2.3	Composition chimique	10			
	2.4	Exemples à connaître, cf cours complet	11			
3	Modéliser et quantifier une transformation chimique					
	3.1	L'équation de réaction : écriture mathématique généralisée	13			
	3.2	Le curseur des transformations chimiques : avancement	14			
	3.3	Établir un tableau d'avancement	14			
	3 4	Calcul d'un rendement	15			

Fiche 1 — Décrire et modéliser une transformation chimique

Objectifs:

- Distinguer une **transformation physique** d'une **transformation chimique**.
- Identifier les constituants physico-chimiques d'un système
- Savoir modéliser une transformation chimique à l'aide d'une **équation-bilan** équilibrée.
- Utiliser la notion d'avancement pour suivre l'évolution des quantités de matière.
- Construire et exploiter un tableau d'avancement pour décrire et prévoir une transformation.

1 La matière en transformation

1.1 De l'observation au modèle

Définition

Une transformation (physique ou chimique) est modélisée par une **équation de réaction**. Celle-ci nous informe sur :

- Les formules chimiques des réactifs et des produits.
- Leur état physique (solide, liquide, espèce dissoute, etc.)
- La stœchiométrie : les proportions dans lesquelles les réactifs réagissent et les produits se forment.

L'équation de réaction est une **abstraction**. Elle représente un "bilan comptable" à l'échelle macroscopique, mais ne décrit pas le mécanisme microscopique.

Fusion du glaçon (transformation physique) :

$$H_2O(s) \, \to H_2O(l)$$

— Cuivre et acide nitrique (transformation chimique) :

$$Cu(s) + 4 \, HNO_3(aq) \, \rightarrow Cu(NO_3)_2(aq) + 2 \, NO_2(g) + 2 \, H_2O(l)$$

 Comprimé effervescent (transformation chimique simplifiée) : production de CO₂ par réaction acide-base, par exemple :

$$NaHCO_3(s) + H^+(aq) \rightarrow Na^+(aq) + CO_2(g) + H_2O(l)$$

Fiche 1 : Décrire et modéliser une transformation chimique

1.2 Qu'est-ce qu'un système physico-chimique?

Sytème fermé - système ouvert - système isolé

Définition

Un **système physico-chimique** est une portion de matière, délimitée par une frontière réelle ou fictive, dont on étudie les propriétés ou l'évolution. On distingue selon les échanges possibles avec le milieu extérieur :

- **Système ouvert** : échange de matière et d'énergie.
- Système fermé : échange d'énergie uniquement.
- **Système isolé** : aucun échange.

Constituant physico-chimique - espèce chimique - entité

Définition

Entité chimique : objet microscopique identifiable (atome, molécule, ion, etc.). *Exemple* : une molécule H_2O isolée.

Espèce chimique : ensemble macroscopique d'entités chimiques identiques. *Exemple* : l'eau (H_2O) désigne l'ensemble des molécules H_2O présentes dans un échantillon.

Constituant physico-chimique : espèce chimique localisée dans une phase donnée. Exemples: l'eau liquide $H_2O(l)$, la glace $H_2O(s)$.

1.3 Transformation physique ou chimique?

La réponse : l'équation de réaction!

🔑 Point Méthode

Une **transformation physique** est un changement dans l'état ou l'organisation de la matière sans modification des espèces. C'est le contenu de la parenthèse qui change!

$$H_2O(s) \longrightarrow H_2O(l)$$
 (fusion de la glace : changement d'état) $C_{12}H_{22}O_{11}(s) \longrightarrow C_{12}H_{22}O_{11}$ (aq) (dissolution du sucre dans l'eau) (transition allotropique du carbone)

Une **transformation chimique**, au contraire, entraîne l'*apparition de nouvelles espèces chimiques* : la structure moléculaire ou atomique des entités est modifiée.

$$2 H_2(g) + O_2(g) \longrightarrow 2 H_2O(l)$$
 (synthèse de l'eau)

A Attention

Limite de cette approche : Le critère proposé repose sur l'analyse d'une équation chimique... qui est déjà une modélisation théorique!

Or, ce que l'on observe réellement, ce sont des phénomènes macroscopiques : couleurs, gaz dégagés, changements d'état, etc.

Etats physiques de la matière et notion de phase

Définition

Un **état physique** (ou *état d'agrégation*) désigne la forme sous laquelle se présente la matière selon les conditions de température et de pression : solide, liquide ou gaz.

Les principaux états de la matière sont les suivants :

- **Solide** : forme propre, volume propre; c'est un état condensé, généralement modélisé état incompressible, indilatable et indéformable.
- Liquide: pas de forme propre, volume propre; un liquide prend la forme de son contenant. C'est également un état condensé (modélisé comme incompressible et indilatable) mais fluide (il est déformable).
- Gaz : ni forme ni volume propres. C'est un état fluide généralement modélisé par le modèle du gaz parfait (voir plus bas).

Définition

Une **phase** est une région de l'espace dans laquelle toutes les propriétés physiques et la composition sont uniformes.

A Attention

Il ne faut pas confondre *état physique* (solide, liquide, gaz) et *phase* : un même état peut comporter plusieurs phases (ex. deux liquides non miscibles).

Homogène vs hétérogène :

- Un système est **homogène** s'il ne contient qu'une seule phase (ex : air, solution salée).
- Il est **hétérogène** s'il présente plusieurs phases (ex : eau + glace, eau + huile).

? À vous de jouer

- Quelles sont les phases présentes dans un verre de lait non homogénéisé?
- Et dans une solution sucrée saturée?

1.4 Modélisation microscopique

Etats de la matière et transformations physiques

L'état d'un système peut être interprété à l'échelle microscopique par la distance entre les particules, leur niveau d'agitation thermique et la nature des interactions interparticulaires.

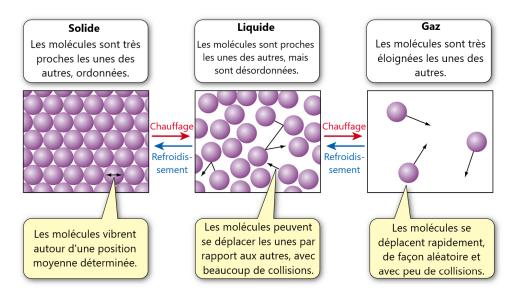


FIGURE 1 – Modélisation microscopique des trois états de la matière.

Cas des gaz

Définition

Le modèle du **gaz parfait** correspond à une situation où les entités sont considérées comme ponctuelles et sans interaction entre elles. Il constitue une bonne approximation pour la plupart des gaz à des pressions pas trop élevées.

Cas des liquides

Définition

- Les **liaisons chimiques**, responsables de la structure des molécules (comme la liaison covalente O–H dans une molécule d'eau).
- Les interactions intermoléculaires (ou liaisons physiques) responsables de l'organisation entre les molécules (comme les liaisons hydrogène entre molécules d'eau). Ces dernières sont généralement plus faibles que les liaisons chimiques et expliquent les propriétés physiques d'un liquide (tension de vapeur, point d'ébullition, etc.).

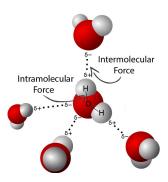


FIGURE 2 – Liaisons chimiques et liaisons hydrogène intermoléculaires dans le cas de l'eau.

Cas des solides

Le solide peut se présenter sous différentes formes dont nous distinguons les suivantes :

- **Solide cristallin** : ordre défini, engendré par la répétition périodique d'un atome ou d'un groupe d'atomes suivant les trois directions de l'espace.
- **Solide amorphe** : Non organisé, ressemble à la structure à un instant figé d'un liquide.

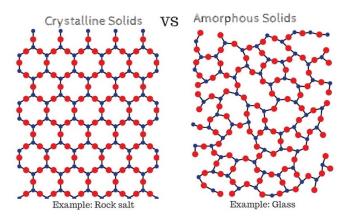


FIGURE 3 – Silice à l'état cristallin et à l'état amorphe

Un corps pur peut exister à l'état solide sous plusieurs formes cristallines, appelées **variétés allotropiques**. Un corps pur qui présente un phénomène d'allotropie est dit **polymorphe**.

Liaisons solides:

- **Solides ioniques** : réseau d'ions liés par des interactions électrostatiques fortes (liaisons ioniques), ex. : NaCl.
- Solides covalents : réseau tridimensionnel d'atomes liés par des liaisons covalentes, ex. : diamant, SiO₂.
- **Solides métalliques** : structure compacte de cations baignant dans un gaz d'électrons délocalisés (liaison métallique), ex. : Cu, Fe.
- **Solides moléculaires** : entités neutres maintenues par des interactions faibles (liaisons hydrogène, Van der Waals), ex. : glace, diiode solide.

Liaisons chimiques, liaisons physiques - Récapitulatif

TABLE 1 – Classification des interactions chimiques et physiques

Type d'interaction	Classification	Ordre de grandeur de l'énergie (kJ/mol)	
Liaison covalente (liaison simple C–H,	Chimique	200 – 500	
H–H, etc.)	Criminque		
Liaison ionique (NaCl, MgO, etc.)	Chimique	400 – 1000	
Liaison métallique (Al, Cu, Fe, etc.)	Chimique	100 - 800	
Liaison covalente coordinative	Chimique	100 – 300	
(complexes, NH ₃ –BF ₃)	Ciminque	100 – 300	
Liaison hydrogène (H ₂ O, NH ₃)	Physique	10 – 50	
Interaction dipôle-dipôle (mol. polaires)	Physique	5 – 20	
Interaction ion-dipôle (solvatation)	Physique	20 – 100	
Forces de London (dispersion)	Physique	0.1 – 10	

Transformations physiques vs transfomations chimiques

- Transformation physique : les liaisons rompues ou formées sont des interactions intermoléculaires (liaisons physiques) dont l'ordre de grandeur est de quelques dizaines de $kJ \cdot mol^{-1}$.
- Transformation chimique : rupture et la formation de nouvelles liaisons chimiques entre les atomes. Ordre de grandeur des interactions mises en jeu : quelques centaines de $kJ \cdot mol^{-1}$.

2 Décrire un système physico-chimique

2.1 Variables d'état

Définition

Une variable d'état est une grandeur physique qui permet de décrire l'état d'un système à un instant donné, indépendamment de son histoire ou de son évolution. Elle est mesurable macroscopiquement. On distingue :

- **Variables Intensives** : indépendantes de la taille du système (ex. : *T*, *P*, densité). Elles se mesurent localement, en un point.
- **Variables Extensives** : proportionnelles à la quantité de matière (ex. : *V*, *m*). Elles se mesurent pour la globalité du système.

? À vous de jouer

Compléter le tableau suivant :

Nom	Symbole	Unité SI	Extensif / Intensif
Quantité de matière			
Masse			
Masse molaire			
Volume			
Masse volumique			
Densité			
Pression			
Température			

Questions associées :

- 1. Rappeler la conversion entre la température T en K et la température θ en $^{\circ}C$.
- 2. Rappeler la relation entre la quantité de matière n et la masse m.
- 3. Rappeler la relation entre la masse volumique ρ , la masse et le volume.
- 4. Définir la densité d'un corps pur en distinguant corps pur gazeux et corps pur en phase condensée.

Diagramme d'état (P,T)

Un diagramme d'état, ou diagramme de phases est un graphique qui indique la phase la plus stable d'un corps pur en fonction de la pression et de la température.

Observation

Les diagrammes d'état de l'eau et de quelques autres espèces présentent une courbe de fusion dont la pente est négative. Cela est lié au fait que pour ces espèces, l'état solide a un volume molaire plus grand (donc une masse volumique plus faible) que l'état liquide.

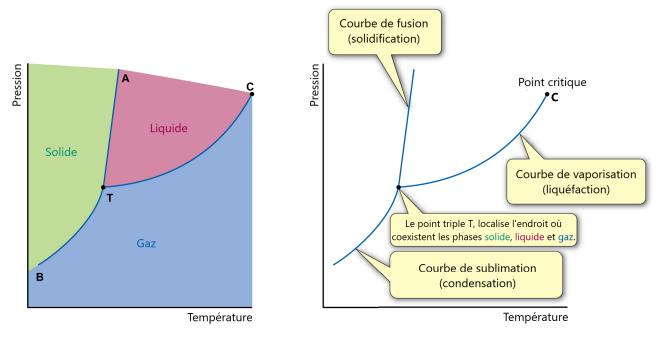


FIGURE 4 – Diagramme de phase classique d'un corps pur

2.2 Equation d'état

Définition

On appelle **équation d'état** d'un système l'équation qui relie les différentes variables d'état à l'équilibre thermodynamique.

Cas du gaz parfait

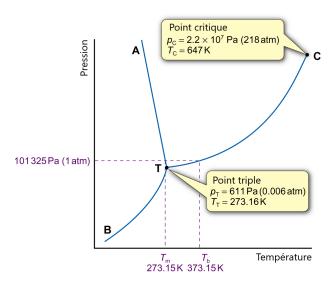
Définition

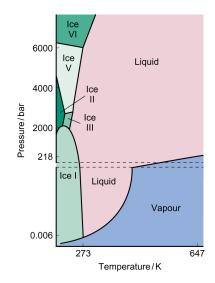
L'équation d'état d'un gaz parfait est :

$$PV = nRT$$

avec:

- *P* : pression du gaz (Pa)
- V: volume occupé (m³)
- *n* : quantité de matière (mol)
- $R = 8.31 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$: constante des gaz parfaits
- *T* : température absolue (K)





- (a) Diagramme de phases simplifié de l'eau, présentant une courbe de fusion à pente négative
- (b) Diagramme de phases plus complet, avec les différentes variétés allotropiques de la glace

FIGURE 5 – Diagrammes de phases de l'eau

? À vous de jouer

Données:

— Température : T = 273,15 K

— Pression : $P = 1,013 \cdot 10^5 \text{ Pa}$

— Masse molaire de l'air : $M_{\text{air}} = 29,0 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$

En supposant l'air assimilable à un gaz parfait, déterminer :

- 1. son volume molaire dans les conditions normales;
- 2. sa masse volumique.

Cas des phases condensées

Les variations de volume avec la pression ou la température sont en général très faibles. On les suppose donc **incompressibles** et **indilatables** dans les conditions usuelles. L'équation d'état se réduit alors à une relation linéaire simple entre le volume et la quantité de matière :

$$V = nV_m$$

où:

- *n* : quantité de matière (mol),
- V_m : volume molaire de la phase (m³·mol⁻¹), supposé constant.

2.3 Composition chimique

Un **corps pur** est constitué d'une seule espèce chimique (ex : H_2O , NaCl...). A ne pas confondre avec **corps simple**, constitué d'un seul élément (H_2 , C, Fe, etc.). Un mélange (solution ou bien mélange hétérogène) est constitué de plusieurs espèces, et peut alors être décrit par des grandeurs de composition.

Grandeurs de composition

Pour quantifier la répartition des différentes espèces dans un système, on utilise des grandeurs de composition. Les plus courantes sont :

— La **concentration molaire** :

$$C = \frac{n}{V}$$

exprimée en mol \cdot L⁻¹. Elle dépend de la quantité de matière n et du volume total V.

— La concentration massique :

$$C_m = \frac{m}{V} = C \cdot M$$

exprimée en g \cdot L⁻¹. Elle dépend de la masse m et du volume total V.

— La fraction molaire :

$$x_i = \frac{n_i}{n_{\text{tot}}}$$

qui représente la proportion d'une espèce i dans le mélange. Cette grandeur est sans unité mais peut être exprimé en % (pourcentage) ou en ppm (parties par million).

— La fraction massique :

$$w_i = \frac{m_i}{m_{\text{tot}}}$$

Cette grandeur est sans unité mais peut être exprimé en % (pourcentage) ou en ppm (parties par million).

A vous de jouer

Une solution contient 5 g de sel dissous dans 100 g d'eau :

- Calculer la fraction massique de sel.
- Calculer la concentration massique (en g \cdot L $^{-1}$) si le volume total est de 105 mL.
- En déduire finalement la concentration molaire.

Cas des mélanges gazeux

Définition

La pression P_i exercée par le gaz A_i considéré individuellement est appelée **pression** partielle du gaz A_i .

La **pression totale** *P* du mélange gazeux est alors la somme des pressions partielles :

$$P = \sum_{i} P_{i}$$

∓ À retenir

Loi de Dalton

On peut calculer la pression partielle P_i d'un gaz A_i dans un mélange à partir de sa fraction molaire x_i et de la pression totale du mélange P:

$$P_i = x_i \cdot P$$

À vous de jouer

- 1. Démontrer la loi de Dalton.
- 2. Calculer la pression partielle de H_2 dans un mélange gazeux constitué de CO (5 mol), H_2 (10 mol) et H_2O (15 mol) dont la pression totale vaut 10 bar.

2.4 Exemples à connaître, cf cours complet

Exemple 1 : calcul d'une concentration molaire d'une solution commerciale à partir de sa fraction massique

Point Méthode

Pour calculer la concentration molaire, on raisonne sur un volume de 1 L de solution.

1. Masse de 1 L de solution :

$$m_{\text{solution}} = \rho \times V = 1180 \,\text{g} \cdot \text{L}^{-1} \times 1.00 \,\text{L} = 1180 \,\text{g}$$

2. Masse de HCl dans ce volume :

$$m_{\text{HCl}} = w \times m_{\text{solution}} = 0.37 \times 1180 \,\text{g} = 436.6 \,\text{g}$$

3. Quantité de matière de HCl:

$$n_{\text{HCl}} = \frac{m_{\text{HCl}}}{M} = \frac{436.6 \,\text{g}}{36.5 \,\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}} \approx 11.96 \,\text{mol}$$

4. Concentration molaire:

$$C = \frac{n_{\text{HCl}}}{V} = \frac{11.96 \,\text{mol}}{1.00 \,\text{L}} = 11.96 \,\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$$

Exemple 2 : dilution d'une solution mère

Point Méthode

La dilution repose sur la conservation de la quantité de matière :

$$n_{\text{avant}} = n_{\text{après}} \quad \Rightarrow \quad C_1 V_1 = C_2 V_2$$

où:

- C_1 , V_1 : concentration et volume de la solution mère
- C_2 , V_2 : concentration et volume de la solution fille

Définition

Le **facteur de dilution**, noté F, est le rapport entre la concentration de la solution mère et celle de la solution fille, c'est le "nombre de fois" que l'on a dilué la solution mère :

$$F = \frac{C_1}{C_2} = \frac{V_2}{V_1}$$

Exemple 3 : dissolution d'un solide — préparation d'une solution de sel de Mohr

🔑 Point Méthode

Équation de dissolution Le sel de Mohr est un **solide ionique hydraté** qui se dissocie totalement dans l'eau selon :

$$FeSO_{4}\cdot (NH_{4})_{2}SO_{4}\cdot 6\,H_{2}O_{(s)} \longrightarrow Fe^{2+}_{(aq)} + 2\,NH_{4}{}^{+}{}_{(aq)} + 2\,SO_{4}{}^{2-}{}_{(aq)} + 6\,H_{2}O_{(l)}$$

On observe que 1 mole de solide libère 1 mole de Fe²⁺.

Étapes de résolution

1. Déterminer la quantité de matière nécessaire en Fe²⁺ :

$$n = C \times V = 0.0200 \times 0.250 = 5.00 \times 10^{-3} \,\text{mol}$$

2. Déterminer la masse correspondante de sel de Mohr :

$$m = n \times M = 5,00 \times 10^{-3} \times 392,1 = 1.96 \,\mathrm{g}$$

3 Modéliser et quantifier une transformation chimique

3.1 L'équation de réaction : écriture mathématique généralisée

Écriture mathématique généralisée

Pour généraliser le formalisme, on introduit des **nombres stœchiométriques algébriques** v_i :

- $\nu_i > 0$ si A_i est un produit,
- $\nu_i < 0$ si A_i est un réactif.

On peut alors écrire l'équation-bilan sous forme compacte :

$$0 = \sum_{i} \nu_i A_i$$

? À vous de jouer

Écrivez, sous la forme mathématique généralisée, l'équation-bilan de la réaction : $H_2(g) + Cl_2(g) \longrightarrow 2 \, HCl(g)$.

3.2 Le curseur des transformations chimiques : avancement

Définition

L'avancement $\xi(t)$ d'une transformation chimique est une grandeur scalaire qui mesure l'état d'avancement du système à un instant donné. Elle s'exprime en moles. Elle s'exprime à partir de l'équation bilan selon l'expression suivante :

$$\xi(t) = \frac{n_i(t) - n_i(0)}{\nu_i}$$

Elle permet d'écrire l'évolution des quantités de matière de chaque espèce sous la forme :

$$n_i(t) = n_i(0) + \nu_i \, \xi(t)$$

où:

- $n_i(0)$ est la quantité initiale de l'espèce A_i ,
- $n_i(t)$ est sa quantité à l'instant t,
- v_i est son coefficient stœchiométrique *algébrique* dans l'équation-bilan (positif pour les produits, négatif pour les réactifs),
- $\xi(t)$ est l'avancement : une grandeur commune à toutes les espèces.

Avancement volumique x

Dans le cas d'un système **homogène** et **de volume constant**, par exemple pour une réaction en solution aqueuse, on utilise plutôt l'**avancement volumique**, noté x, et exprimé en mol· L^{-1} :

$$x = \frac{\xi}{V}$$

3.3 Établir un tableau d'avancement

Tableau d'avancement en quantités de matière

Définition

Un **tableau d'avancement** est une représentation ordonnée des quantités de matière des espèces chimiques impliquées dans la transformation, à différents instants clés (état initial, évolution, état final), exprimées en fonction de l'avancement ξ .

Ce tableau repose sur l'équation-bilan, qui apparaît comme première ligne, avec les coefficients stœchiométriques associés. Les quantités sont exprimées en fonction de l'avancement ξ .

Considérons la synthèse de l'ammoniac :

$$N_2(g) + 3H_2(g) = 2NH_3(g)$$

Le tableau d'avancement **molaire** s'écrit alors :

mol.	N_2	$+$ 3 H_2	= 2 NH ₃
État initial (mol)	n _{1,0}	n _{2,0}	n _{3,0}
État final (mol)	$n_{1,0} - \xi$	$n_{2,0} - 3\xi$	$n_{3,0} + 2\xi$

Chaque quantité évolue selon son coefficient stœchiométrique. L'évolution des quantités est modélisée de façon synchrone par l'unique variable ξ .

À vous de jouer

Établissez le tableau d'avancement pour la réaction suivante, en fonction de ξ :

$$2 \text{ Na (s)} + \text{Cl}_2(g) = 2 \text{ NaCl (s)}$$

avec $n_0(Na) = 0.30 \text{ mol et } n_0(Cl_2) = 0.20 \text{ mol.}$

Tableau d'avancement volumique

Dans le cas de la synthèse de l'ammoniac on aurait ainsi :

$$mol.L^{-1}$$
 N_2
 +
 $3 H_2$
 =
 $2 NH_3$

 État initial (mol·L⁻¹)
 $c_{1,0}$
 $c_{2,0}$
 $c_{3,0}$

 État final (mol·L⁻¹)
 $c_{1,0} - x$
 $c_{2,0} - 3x$
 $c_{3,0} + 2x$

3.4 Calcul d'un rendement

Déterminer le réactif limitant

Définition

Le **réactif limitant** est l'espèce chimique qui est *entièrement consommée la première* au cours d'une transformation. Sa disparition détermine l'**état final** du système et fixe la **valeur maximale de l'avancement**, notée ξ_{max} .

🔑 Point Méthode

Pour chaque réactif A_i , on calcule l'avancement ξ_i pour lequel sa quantité devient nulle :

$$\xi_i = -\frac{n_i(0)}{\nu_i} \quad (\text{avec } \nu_i < 0)$$

L'avancement maximal possible est :

$$\xi_{\max} = \min(\xi_i)$$

Le réactif correspondant est alors le réactif limitant.

À vous de jouer

Pour la réaction Fe (s) + S (s) \longrightarrow FeS (s), déterminer le réactif limitant si on introduit 0,20 mol de fer et 0,15 mol de soufre. En déduire l'avancement maximal ξ_{max} et les quantités finales.

Calculer un rendement d'une synthèse

Définition

Le **rendement** d'une réaction est le rapport, exprimé en pourcentage, entre la quantité de matière effectivement obtenue d'un produit et la quantité maximale théorique que l'on aurait obtenue si la réaction avait été totale. On le note η :

$$\eta = 100 \times \frac{n_{\rm obtenu}}{n_{\rm max~th\acute{e}orique}} \quad (\%)$$

Expression à partir de l'avancement Soit A_i un produit d'intérêt. On note :

- $\Delta n_i = n_i^{\text{final}} n_i^0$: quantité obtenue expérimentalement,
- $\Delta n_{i,\text{max}} = \nu_i \cdot \xi_{\text{max}}$: quantité maximale théorique, issue du tableau d'avancement.

Alors le rendement s'exprime aussi comme :

$$\eta = 100 imes rac{\Delta n_i}{
u_i \, \xi_{
m max}} = 100 imes rac{\xi_{
m r\'eel}}{\xi_{
m max}}$$

? À vous de jouer

Une réaction permet la synthèse d'un produit P selon l'équation : $A + 2B \longrightarrow 3P$. On introduit 0,10 mol de A et un excès de B. En fin d'expérience, on isole 0,25 mol de P. Quel est le rendement de cette synthèse?