# Chapitre 1 — Décrire et modéliser une transformation chimique

# Table des matières

1	La n	natière en transformation	1
	1.1	De l'observation au modèle	2
	1.2	Qu'est-ce qu'un système physico-chimique?	4
	1.3	Transformation physique ou chimique?	6
	1.4	Modélisation microscopique	8
2	Déc	rire un système physico-chimique	13
	2.1	Variables d'état	13
	2.2	Equation d'état	15
	2.3	Composition chimique	17
	2.4	Exemples à connaître	18
3	Mod	déliser et quantifier une transformation chimique	22
	3.1	L'équation de réaction : écriture mathématique généralisée	22
	3.2	Le curseur des transformations chimiques : avancement	22
	3.3	Établir un tableau d'avancement	24
	3 4	Calcul d'un rendement	26

# Chapitre 1 — Décrire et modéliser une transformation chimique

« Rien ne naît du néant, ni ne retourne au néant. »

Démocrite (Ve siècle av. J.-C.)

La chimie commence par une observation : un solide qui disparaît dans un liquide, une flamme qui jaillit, une couleur qui s'évanouit ... Autant de phénomènes visibles qui traduisent des transformations invisibles, profondes, au cœur de la matière.

Comment passer de l'observation intuitive à la compréhension scientifique? Comment décrire rigoureusement ce qui change, ce qui reste, ce qui se conserve? Pour cela nous aurons besoin de construire un **modèle scientifique** : une représentation simplifiée — sur le papier — de ce qui se produit dans le monde réel, dans un **système chimique**.

Dans un second temps, nous introduirons des **variables** (grandeurs physiques mesurables) pour décrire l'état d'un système, avant d'aborder des outils de **quantification** de l'évolution chimique, comme l'**avancement** et le **tableau d'avancement**.

Cette capacité à modéliser et mathématiser les transformations de la matière n'a pas surgi d'un coup : elle est le fruit d'un lent mûrissement historique, étalé sur plusieurs siècles, que nous évoquerons au fil du chapitre.

#### **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

Depuis la domestication du feu, l'humain observe la matière se modifier — cuire, fondre, brûler, se colorer – et cherche à en comprendre les mécanismes. Ces interrogations sont à l'origine non seulement des sciences expérimentales, mais aussi des premières spéculations philosophiques. Les premiers penseurs, de Héraclite à Aristote, étaient hantés par ces questions : de quoi est fait le monde, qu'est-ce qui change vraiment? Qu'est-ce qui demeure? Et qu'est-ce qui relève de l'illusion?

#### Observation

#### Des solides qui disparaissent

Un glaçon fond dans un verre, un comprimé effervescent dans l'eau, un morceau de cuivre est rongé par l'acide nitrique ...

- Dans chaque cas on observe une transformation. Mais une transformation de quoi? Ces transformations sont-elles de même nature?
- Quelles sont les espèces impliquées?
- Comment passer d'une **description intuitive** à un **modèle scientifique**?

#### 1.1 De l'observation au modèle

Les penseurs antiques soupçonnaient que la matière ne disparaît ni ne naît du néant : elle se transforme. Nos solides ne disparaissent pas : c'est leur structure qui change, se réarrange. Au XVIII<sup>e</sup> siècle, Lavoisier se base sur cette idée antique pour en faire une procédure systématique. Grâce à des pesées précises, il montre que dans toute réaction chimique la masse totale se conserve. Son idée décisive : introduire en chimie le symbole du signe =.

On peut alors décrire nos transformation par une **équation de réaction** (équation bilan) : une phrase mathématique qui exprime quels réactifs deviennent quels produits, sans entrer dans les détails du mécanisme microscopique. Ainsi, pour nos solides qui "disparaissent" on modélisera les transformations par les équations de réaction suivantes :

Fusion du glaçon (transformation physique) :

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

Cuivre et acide nitrique (transformation chimique) :

$$Cu(s) + 4\,HNO_{3}(aq)\, \rightarrow Cu(NO_{3})_{2}(aq) + 2\,NO_{2}(g) + 2\,H_{2}O\left(l\right)$$

 Comprimé effervescent (transformation chimique simplifiée): production de CO<sub>2</sub> par réaction acide-base, par exemple :

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

#### Définition

Une transformation (physique ou chimique) est modélisée par une équation de réac**tion**. 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.

#### Remarque

#### Quel symbole utiliser dans les équations de réaction?

Il existe plusieurs usages, selon le contexte, le domaine (chimie analytique ou synthèse) et . . . les habitudes de votre enseignant!!! Alors il faut une réponse précise une fois pour toutes.

- Flèche simple "→": utilisé lorsque la transformation considérée est quantitative (quasi-totale). On suggère un "sens naturel" de la réaction (on précisera cela dans le prochain chapitre).
- Signe "=" : utilisé pour représenter uniquement la stœchiométrie d'une transformation, et traduire la conservation de la matière, sans préjuger de son avancement. On ne sait pas toujours à l'avance si la réaction est totale...
- Double flèche à simples pointes : "

  " : utilisée lorsque la transformation est limitée et conduit à un équilibre entre réactifs et produits.

Il n'y a pas de règle figée! MAIS : en chimie analytique, en chimie des solutions, on ne sait pas à l'avance si la réaction est quantitative ou limitée. D'ailleurs cette distinction elle-même, nous le verrons, est artificielle. Toute transformation est en réalité un équilibre, même s'il est parfois fortement déplacé dans un sens (nous y reviendrons au prochain chapitre). Il est donc d'usage, dans la littérature, d'utiliser le signe "=". En chimie organique, on aime préciser si une réaction est totale ou limitée, et décrire nettement le sens des réactions. On utilisera alors des flèches!

### Repère historique

On l'apprend dès le collège : « Rien ne se perd, rien ne se crée, tout se transforme ». Cette phrase, attribuée à Lavoisier, remonte pourtant à l'Antiquité! Démocrite, le père du concept d'atome, en faisaient déjà un **principe cosmologique fondamental** : rin ne surgit du néant, rien ne disparaît tout à fait. La matière éternelle se transforme, se combine, se dissocie — mais elle ne s'anéantit jamais.

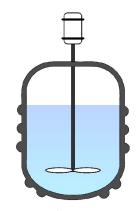
Lavoisier n'a pas « inventé » cette loi : il l'a mesurée, instrumentée, systématisée. Fermier général, chargé de prélever l'impôt pour le roi — donc comptable — il maniait la balance la plus précise d'Europe. Il eut l'idée décisive de traiter chaque expérience chimique comme un bilan : comme on équilibre les comptes d'une entreprise, il traque les masses de matière avant et après réaction. Ce raisonnement le conduit à introduire en chimie un symbole nouveau : le signe =. Ce principe de conservation de la masse impose de penser les transformations non comme des disparitions ou créations, mais comme des réarrangements d'espèces chimiques.

Au XIX<sup>e</sup> siècle, cette approche se formalise : les chimistes s'efforcent de représenter les substances et leurs réactions **sur le papier**. Le chimiste suédois Berzelius, par exemple, a l'idée de représenter les éléments par des lettres pour faciliter la compréhension de la chimie par ses élèves. Équations, formules, tableaux : ces outils deviennent peu à peu des **modèles**, dont le statut est débattu — tantôt vus comme le **reflet fidèle** d'une réalité microscopique, tantôt comme **des fictions**, utiles mais trompeuses.

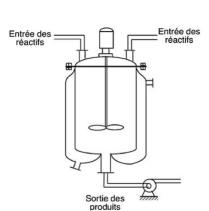
# 1.2 Qu'est-ce qu'un système physico-chimique?

#### Sytème fermé - système ouvert - système isolé

Pour étudier une transformation, il faut savoir *de quoi* on parle. Cela suppose de savoir définir un **système** chimique, d'en comprendre les limites et les interactions avec l'extérieur.



Réacteur fermé (schéma)



Réacteur ouvert (schéma)



Réacteur fermé (photo)



Réacteur ouvert (photo)

Différents types de réacteurs en laboratoire et dans l'industrie

### 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. Ce système peut comporter une ou plusieurs phases contenant des espèces chimiques identifiables. Sa description repose sur l'observation de la matière (états, transformations, échanges) sans préiuger de sa structure microscopique. On distingue selon les échanges pos-

sans préjuger de sa structure microscopique. 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.

### Remarque

L'enceinte dans laquelle on produit transformation chimique se nomme le **réacteur**.

- En laboratoire, les réactions chimiques sont conduites sur de petites quantités de matière et les réactions n'échangent pas de matière avec le milieu extérieur, les réacteurs sont fermés. Ces réacteurs nécessitent le processus séquentiel : charge, démarrage, fonctionnement, décharge.
- Dans l'industrie, les réactions chimiques, menées sur de grandes quantités, utilisent souvent des réacteurs ouverts.

#### Constituant physico-chimique - espèce chimique - entité

Pour décrire précisément la composition d'un système, il faut identifier les **constituants physico-chimiques** présents. Prenons notre exemple le plus simple, le glaçon qui fond dans un verre. Cette transformation est modélisée par l'équation de réaction suivante :

$$H_2O(s) \rightarrow H_2O(1)$$

Pendant cette transformation le système est donc composé de deux constituants physicochimiques :  $H_2O(s)$  et  $H_2O(l)!$  ... Cela peut paraître paradoxal : parle-t-on réellement de deux choses différentes? L'eau liquide et la glace ne sont-elles pas constituées des mêmes molécules  $H_2O$ ?

Nous devons donc faire très attention à notre vocabulaire. L'eau liquide et la glace correspondent à la même **espèce chimique**, l'eau, mais dans deux états différents : l'état solide (glace) et l'état liquide. D'un point de vue macroscopique il s'agit de deux "choses" différentes, avec des propriétés spécifiques, qu'il faut donc nommer (entre parenthèses) pour rendre compte de la transformation. D'un point de vue microscopique, nous verrons à la section suivante que ces deux états correspondent à des agencements différents des molécules d'eau. Les molécules d'eau sont des **individus** (comme un être humain) et ce que l'on nomme en chimie "l'eau" et que l'on note  $H_2O$  dans une équation est **l'espèce** (comme l'espèce humaine). Un constituant physico chimique correspond à une espèce chimique dans un certain état. Par exemple la glace, notée  $H_2O(s)$ .

#### Définition

**Entité chimique** : objet microscopique identifiable (atome, molécule, ion, etc.). *Exemple* : une molécule H<sub>2</sub>O 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. *Exemple* : dans un verre contenant de la glace et de l'eau liquide, **l'eau liquide**  $H_2O(l)$  et **la glace**  $H_2O(s)$  sont deux constituants physico-chimiques distincts, bien qu'ils correspondent à la même espèce chimique  $H_2O$ .

# 1.3 Transformation physique ou chimique?

#### La réponse : l'équation de réaction!

On sait que toutes les transformations ne sont pas de même nature. La fonte d'un glaçon n'est pas une transformation chimique, c'est un changement d'état. Un premier moyen — simple — de les distinguer consiste tout simplement (si on la connaît) de regarder l'équation de réaction! Reprenons nos 3 exemples :

Fusion du glaçon :  $H_2O(s) \longrightarrow H_2O(l)$ 

Cuivre et acide nitrique :  $Cu(s) + 4 HNO_3(aq) \longrightarrow Cu(NO_3)_2(aq) + 2 NO_2(g) + 2 H_2O(l)$ 

**Comprimé effervescent**: NaHCO<sub>3</sub>(s) + H<sup>+</sup>(aq)  $\longrightarrow$  Na<sup>+</sup>(aq) + CO<sub>2</sub>(g) + H<sub>2</sub>O(l)

La fusion n'implique pas de changement d'espèce chimique : seul le contenu de la parenthèse est affecté (l'état physique). Les deux autres transformations impliquent des modifications plus "profondes" car les espèces chimiques sont modifiées.

#### 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)

$$C(diamant) \longrightarrow C(graphite)$$
 (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)

#### 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.

Pour juger rigoureusement du type de transformation, il est indispensable de :

- savoir **identifier les phases et les espèces** à partir des observations;
- comprendre les interactions entre entités à l'échelle microscopique;
- donner un sens précis à la notion de **changement de nature** : rupture ou conservation des **liaisons chimiques**.

#### 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.

#### Observation

Eau + glace à 0 °C forment un système diphasé : phase solide et phase liquide coexistent.

Lorsqu'un comprimé effervescent (ex. vitamine C) est plongé dans l'eau, on observe une transformation rapide accompagnée d'un dégagement gazeux.

- Avant réaction : système biphasé solide/liquide.
- **Pendant réaction** : apparition de bulles (CO<sub>2</sub>), système triphasé.
- Après réaction : dissolution complète, système liquide homogène avec gaz dissous + bulles résiduelles.

## 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).

### Remarque

Un système peut comporter plusieurs phases même s'il ne contient qu'une seule espèce chimique : c'est le cas de l'eau liquide et de la glace dans un verre. À l'inverse, un mélange homogène de plusieurs espèces (comme l'air) ne présente qu'une seule phase.

La chimie des systèmes dispersés est omniprésente dans notre quotidien. Voici quelques exemples concrets :

- Une crème cosmétique est souvent une émulsion : un mélange de deux phases liquides non miscibles, stabilisé par des agents tensioactifs.
- Une **peinture** est composée de particules solides (pigments, charges) *dispersées* dans un liquide. A cela s'ajoute à un liant, souvent une dispersion aqueuse de polymère.
- La **mousse au chocolat** est un système multiphasique : de fines bulles de gaz ( $N_2$  ou  $CO_2$ ) dispersées dans une phase continue (chocolat fondu + crème).

### ? 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.

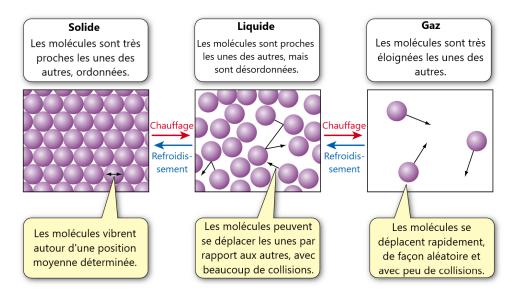


FIGURE 2 – Modélisation microscopique des trois états de la matière.

#### Cas des gaz

Les entités (molécules, atomes) sont très espacées et en mouvement libre rapide. Elles disposent de suffisamment d'énergie thermique pour échapper aux forces d'attraction de leurs voisines. L'état gazeux est donc un état dispersé et désordonné.

# 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

Les entités sont proches mais désordonnées, en mouvement constant. Elles peuvent se déplacer par rapport à leurs voisines, mais sans pouvoir leur échapper totalement. L'état liquide est compact (ou condensé) mais désordonné.

#### Définition

À ce stade, il est essentiel de distinguer deux types d'interactions :

- 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.).
  - Nous étudierons ces interactions en détail dans le chapitre 8.

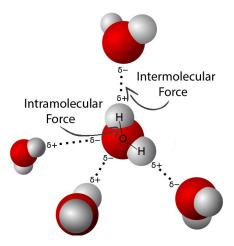


FIGURE 3 – Liaisons chimiques et liaisons hydrogène intermoléculaires dans le cas de l'eau.

#### Cas des solides

L'état solide est également une phase condensée. Mais contrairement au cas des liquides, dans lesquels les entités peuvent se déplacer les unes par rapport aux autres, celles-ci conservent une position fixe autour de laquelle elle peuvent vibrer selon le niveau d'agitation thermique. Cette faible amplitude de mouvement confère aux solides leur cohésion et leur rigidité.

Un solide n'est pas forcément organisé, il peut se présenter sous différentes formes dont nous distinguons les suivantes :

- Dans un solide cristallin, les entités sont organisées dans un ordre défini, engendré par la répétition périodique d'un atome ou d'un groupe d'atomes suivant les trois directions de l'espace : il existe un ordre à longue distance.
- Dans un **solide amorphe**, les entités ne se structurent pas de manière organisée. La structure d'un solide amorphe ressemble à la structure à un instant figé d'un liquide.

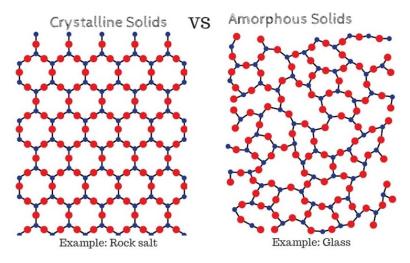


FIGURE 4 – Silice à l'état cristallin et à l'état amorphe

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**.

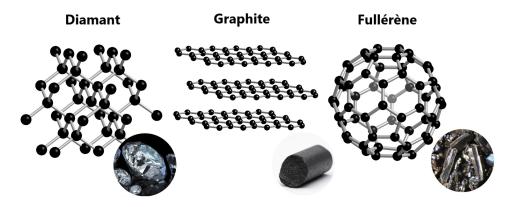


FIGURE 5 – Différentes variétés allotropiques du carbone

L'état solide se distingue par l'existence de liaisons ou d'interactions assurant la cohésion entre les entités constitutives. Ces interactions peuvent être de nature très différente selon le type de solide :

- 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, SiO<sub>2</sub>.
- **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.

La diversité des comportements macroscopiques (température de fusion, dureté, conductivité...) découle directement de la nature et de la géométrie de ces interactions.

## M Coming Soon

Ce lien entre *structure microscopique* et *propriétés physiques* sera étudié en détail dans le chapitre consacré à la cristallographie et aux solides (chapitre 4 du second semestre).

#### 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)	
<b>Liaison covalente</b> (liaison simple C–H,	Chimique	200 – 500	
H–H, etc.)	orani que		
Liaison ionique (NaCl, MgO, etc.)	Chimique	400 – 1000	
<b>Liaison métallique</b> (Al, Cu, Fe, etc.)	Chimique	100 - 800	
Liaison covalente coordinative	Chimique	100 – 300	
(complexes, NH <sub>3</sub> –BF <sub>3</sub> )	Ciminque	100 – 300	
Liaison hydrogène (H <sub>2</sub> O, NH <sub>3</sub> )	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

Nous pouvons donc interpréter la différence entre transformations physiques et transformations chimiques d'un point de vue microscopique :

- Lors d'une transformation physique, il n'y a ni formation, ni disparition d'espèces chimiques nouvelles. Le plus souvent les liaisons rompues ou formées sont des interactions intermoléculaires (liaisons physiques) dont l'ordre de grandeur est de quelques dizaines de kJ⋅mol<sup>-1</sup>. Ces transformations peuvent être des *changements d'état* (fusion, vaporisation, sublimation...); des *dissolutions sans réaction chimique*; des *transformations allotropiques* (ex. : graphite ↔ diamant).
- Une transformation chimique implique une réorganisation des atomes d'une ou plusieurs entités. On observe la rupture et la formation de nouvelles liaisons chimiques entre les atomes. Ordre de grandeur des interactions mises en jeu : quelques centaines de kJ·mol<sup>-1</sup>.

#### Attention

Une transformation physique peut parfois impliquer des ruptures de liaisons chimiques dans certains cas limites (fusion de solides covalents, transitions allotropiques), sans qu'il y ait pour autant apparition de nouvelles espèces chimiques.

**Cette distinction est un outil de classification pour l'esprit**. Elle ne correspond pas à une différence de nature profonde. D'ailleurs la thermodynamique traite les transformation physiques et chimique dans un cadre unique : elles correspondent toutes à un **changement d'état du système**.

#### 🖰 Repère historique

#### Réaction ou transformation?

On tend à préférer aujourd'hui le terme "transformation chimique" plutôt que "réaction chimique" (qui en désigne la cause).

Le mot « réaction » signifie « action en retour ». Son usage scientifique remonte au XVII<sup>e</sup> siècle dans des contextes variés (physique, médecine), mais il acquiert un sens spécifique en chimie à la fin du XVIII<sup>e</sup> siècle.

Au début du XIX<sup>e</sup> siècle, grâce à la formalisation de la stœchiométrie par Richter et Berzelius, le mot « réaction » entre pleinement dans le langage technique de la chimie. Il désigne alors une transformation identifiable par une équation chimique, mettant en jeu des quantités définies de réactifs et de produits.

Le mot est resté et est encore utilisé pour désigner l'action d'une espèce sur une autre espèce : on parle de réaction acide-base et non transformation acide-base. La transformation résulte de la réaction entre l'acide et la base. Il est donc plus adapté, en se situant à l'échelle de l'observation, avant d'entrer dans l'interprétation et la modélisation.

Le mot transformation a l'avantage d'être plus générique, il s'applique à tout changement de la matière, qu'il soit physique ou chimique. La réaction en est la modélisation, à travers l'équation de réaction.

# 2 Décrire un système physico-chimique

#### 2.1 Variables d'état

Un **état macroscopique** d'un système physico-chimique est défini par un ensemble de grandeurs physiques mesurables appelées **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  $\theta$  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  $\rho$ , 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.

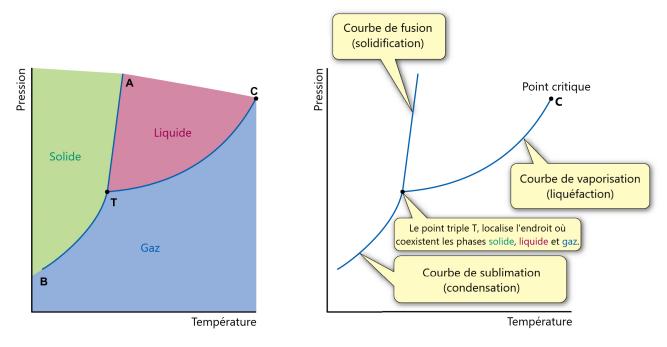


FIGURE 6 – Diagramme de phase classique d'un corps pur

Dans le cas où un corps pur présente plusieurs variétés allotropiques, chacune d'entre elle correspond à une zone du diagramme de phases (P,T). On a alors des courbes de transition de phase supplémentaires.

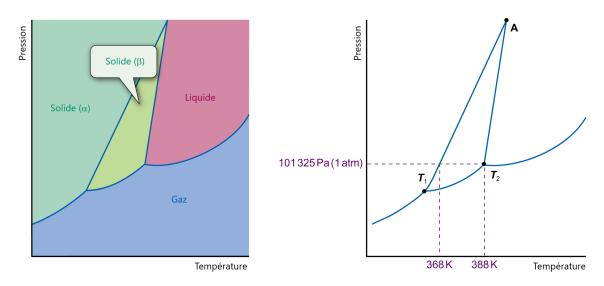
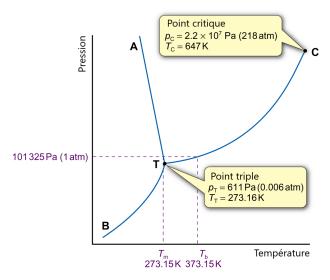
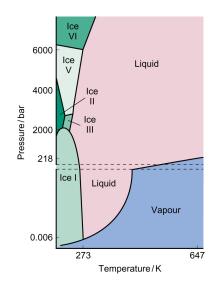


FIGURE 7 – Diagramme de phase classique d'un corps pur

#### 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.





- (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 8 – Diagrammes de phases de l'eau

# 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

Lorsqu'un gaz est très dilué, il est possible de négliger le volume global des entités microscopiques qui le composent, ainsi que les interactions attractives entre ces entités (interaction intermoléculaires). Seuls les chocs entre ces entités interviennent. Le gaz parfait est un modèle théorique dans lequel les molécules du gaz sont supposées ponctuelles; les interactions entre molécules sont nulles en dehors des chocs.

#### Définition

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

$$PV = nRT$$

avec:

- *P* : pression du gaz (Pa)
- V: volume occupé (m<sup>3</sup>)
- *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)

Cette équation est issue de nombreuses expériences et observations. Il est aujourd'hui possible de la démontrer dans le cadre de la mécanique statistique.

# ? 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

Dans le cas des phases condensées (liquides et solides), 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. Dans ce cas, il n'existe pas de relation liant P, V et T, car V est constant et indépendant de P et T dans les limites d'approximation 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 (m<sup>3</sup>·mol<sup>-1</sup>), 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 · L<sup>-1</sup>. Elle dépend de la quantité de matière n et du volume total V.

— La concentration massique :

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

exprimée en g · L<sup>-1</sup>. 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).

Considérons une solution aqueuse chlorure de sodium ( $M = 58.5 \,\mathrm{g \cdot mol}^{-1}$ ) obtenue en dissolvant 5 g de NaCl(s) dans 100 g d'eau ( $M = 18 \,\mathrm{g \cdot mol}^{-1}$ ).

Espèce	Formule	Masse (g)	Quantité (mol)	Fraction molaire
Chlorure de sodium	NaCl	5.00	$n_1 = \frac{5,00}{58.5} \approx 0,085$	$x_1 \approx 0.0015 (0.15 \%)$
Eau	$H_2O$	100.00	$n_2 = \frac{100,00}{18,0} \approx 5,56$	$x_2 \approx 0.9985 \ (99.85 \ \%)$
Total	_	105.00	$n_{\mathrm{tot}} \approx 5,645$	$x_1 + x_2 = 1$

TABLE 2 – Tableau de composition d'une solution aqueuse de NaCl.

# ? À 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

Dans un mélange de gaz parfaits, chaque gaz est sans interaction avec ses voisins. Ainsi, il exerce une pression propre égale à celle qu'il exercerait s'il était seul dans le récipient.

#### 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

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

Dans le commerce, l'acide chlorhydrique est disponible sous forme d'une solution aqueuse dite "concentrée", contenant environ 37 % de chlorure d'hydrogène HCl en masse. Cette in-

formation est une **fraction massique** : elle indique que 100 g de solution contiennent 37 g de soluté (HCl).

Notre objectif est de déterminer la **concentration molaire** *C* de cette solution, c'est-à-dire la quantité de matière de HCl dissoute par litre de solution.

#### Données

- Fraction massique : w = 0.37
- Masse molaire de HCl :  $M = 36.5 \,\mathrm{g \cdot mol}^{-1}$
- Densité de la solution : d = 1.18 (soit  $\rho = 1.18$  g · mL<sup>-1</sup> = 1180 g · L<sup>-1</sup>)

#### Point Méthode

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

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

**Conclusion** La solution commerciale d'acide chlorhydrique concentré à 37 % a une concentration molaire d'environ  $12 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ .

#### Exemple 2 : dilution d'une solution mère

Lorsqu'une solution est trop concentrée pour une utilisation pratique (ex. dosage, spectro-photométrie), on réalise une **dilution**. Cela consiste à ajouter du solvant (souvent de l'eau) pour obtenir une solution fille moins concentrée, sans changer la nature du soluté.

**Problème** On dispose d'une solution mère d'acide chlorhydrique de concentration  $C_1 = 1.0 \,\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$ . On souhaite préparer  $100 \,\text{mL}$  d'une solution fille dix fois moins concentrée :  $C_2 = 0.010 \,\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$ .

Quelle est le **volume de solution mère** à prélever pour effectuer cette dilution?

#### 🔑 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

# Application numérique

$$V_1 = \frac{C_2 \times V_2}{C_1} = \frac{0.010 \times 100 \,\mathrm{mL}}{1.0} = 1.0 \,\mathrm{mL}$$

#### Procédure expérimentale

- Prélever 1.0 mL de solution mère à l'aide d'une pipette jaugée.
- Introduire dans une fiole jaugée de 100 mL.
- Compléter jusqu'au trait de jauge avec de l'eau distillée.
- Homogénéiser.

**Conclusion** Pour obtenir une solution 100 fois moins concentrée, il suffit de prélever un centième du volume final à partir de la solution mère. Ici : 1.0 mL de solution mère diluée à 100 mL. Dans ce cas, on dit qu'on a dilué 100 fois la solution mère. Le facteur de dilution vaut *F*= 100.

#### 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

La dissolution d'un solide dans un solvant permet de préparer une solution de concentration connue. Le sel de Mohr, ou sulfate de fer(II) ammoniacal hexahydraté, est un solide stable utilisé comme source de cations Fe<sup>2+</sup>.

**Problème** On souhaite préparer 250 mL d'une solution contenant des ions  $Fe^{2+}$  à une concentration de  $0.0200 \, \text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$ , en dissolvant du sel de Mohr (FeSO<sub>4</sub> · (NH<sub>4</sub>)<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> · 6 H<sub>2</sub>O).

Quelle masse de solide faut-il peser?

#### Données

- Formule du sel de Mohr :  $FeSO_4 \cdot (NH_4)_2SO_4 \cdot 6H_2O$
- Masse molaire :  $M = 392.1 \,\mathrm{g \cdot mol}^{-1}$
- Volume de solution à préparer :  $V = 250 \,\mathrm{mL} = 0.250 \,\mathrm{L}$
- Concentration cible en Fe<sup>2+</sup> :  $C = 0.0200 \,\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$

#### Point Méthode

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

$$FeSO_4 \cdot (NH_4)_2SO_4 \cdot 6 H_2O_{(s)} \longrightarrow Fe^{2+}_{(aq)} + 2 NH_4{}^{+}_{(aq)} + 2 SO_4{}^{2-}_{(aq)} + 6 H_2O_{(l)}$$

On observe que 1 mole de solide libère 1 mole de Fe<sup>2+</sup>.

### Étapes de résolution

1. Déterminer la quantité de matière nécessaire en Fe<sup>2+</sup> :

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

2. Déterminer la masse correspondante de sel de Mohr :

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

# Procédure expérimentale

- Peser 1.96 g de sel de Mohr.
- Dissoudre dans un petit volume d'eau distillée.
- Transférer dans une fiole jaugée de 250 mL.
- Compléter jusqu'au trait de jauge avec de l'eau distillée.
- Homogénéiser.

**Conclusion** Dissoudre 1.96 g **de sel de Mohr** permet de préparer 250 mL d'une solution contenant des ions  $Fe^{2+}$  à la concentration souhaitée de  $0.0200 \, \text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$ .

# 3 Modéliser et quantifier une transformation chimique

# 3.1 L'équation de réaction : écriture mathématique généralisée

Lorsque l'on introduit du dihydrogène H<sub>2</sub> et du dichlore Cl<sub>2</sub> dans un récipient, une réaction a lieu avec formation de chlorure d'hydrogène HCl :

$$H_2(g) + Cl_2(g) \longrightarrow 2 HCl(g)$$

Ce bilan exprime que les quantités de matière évoluent selon un rapport fixe : un mole de  $H_2$  réagit avec une mole de  $Cl_2$  pour former deux moles de HCl. Nous l'avons vu plus haut, cette **équation de réaction**, ne traduit qu'un bilan macroscopique sans préjuger de ce qui se passe vraiment à l'échelle moléculaire. Elle respecte deux principes fondamentaux :

- La conservation des éléments chimiques (nombre d'atomes de chaque espèce);
- La conservation de la charge électrique, si des ions sont en jeu.

# 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 :

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

Cette notation est particulièrement utile en **thermodynamique** et en **cinétique**, où elle permet une modélisation mathématique plus générale des bilans de matière.

Pour la réaction :  $2 \text{ Na (s)} + \text{Cl}_2(g) \longrightarrow 2 \text{ NaCl (s)}$ , on a :

$$0 = -2 \text{ Na (s)} - \text{Cl}_2(g) + 2 \text{ NaCl (s)}$$

# ? 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

Lorsqu'une transformation chimique a lieu, les quantités de matière des espèces présentes dans le système évoluent. Pour modéliser cette évolution de manière rigoureuse, on introduit une grandeur appelée **avancement**.

Lorsqu'une transformation chimique se produit, les quantités de matière de chaque espèce évoluent en respectant les proportions imposées par l'équation-bilan. Considérons par exemple la transformation modélisée par l'équation :

$$H_2(g) + Cl_2(g) \longrightarrow 2 HCl(g)$$

On observe que:

- pour 1 mole de dihydrogène consommée, il faut 1 mole de dichlore,
- et cela produit 2 moles de chlorure d'hydrogène.

On souhaite donc introduire une grandeur qui **mesure l'évolution globale** du système au cours du temps, tout en respectant ces proportions.

Imaginons que l'on suive l'évolution de la transformation par une sorte de "curseur" commun à toutes les espèces : à chaque instant t, ce curseur nous indiquerait de combien la transformation a « progressé ».

C'est l'idée de la **grandeur avancement**  $\xi(t)$  calculée comme suit :

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

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.

# Remarque

Cette relation indique que toutes les espèces évoluent en synchronisation, comme si leur évolution était pilotée par une même commande  $\xi(t)$ . Cette synchronisation est justement ce que garantit l'équation de réaction.

# 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 :

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

# Remarque

Cette formule permet de calculer  $\xi(t)$  en observant l'évolution d'une seule espèce du système. Tous les autres  $n_j(t)$  peuvent ensuite être retrouvés à l'aide de l'équation  $n_j(t) = n_j(0) + \nu_j \xi(t)$ .

Considérons la réaction :

$$H_{2}\left( g\right) +Cl_{2}\left( g\right) \longrightarrow 2\,HCl\left( g\right)$$

L'équation chimique donne les coefficients :  $\nu_{\text{H}_2} = -1$ ,  $\nu_{\text{Cl}_2} = -1$ ,  $\nu_{\text{HCl}} = +2$ . Alors, si on appelle  $\xi(t)$  l'avancement, les quantités de matière sont :

$$n_{\rm H_2}(t) = n_{\rm H_2,0} - \xi(t)$$
  
 $n_{\rm Cl_2}(t) = n_{\rm Cl_2,0} - \xi(t)$   
 $n_{\rm HCl}(t) = n_{\rm HCl,0} + 2\xi(t)$ 

#### **A** Attention

L'avancement est une grandeur continue en temps t, mais sa valeur maximale possible est déterminée par le **réactif limitant** : on la précisera plus loin.

#### 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

L'écriture directe des quantités de matière en fonction de l'avancement peut devenir fastidieuse dès que plusieurs espèces sont en jeu. Pour organiser le calcul et faciliter le raisonnement, on utilise un outil fondamental : le **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  $\xi$ .

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  $\xi$ .

Considérons la synthèse de l'ammoniac :

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

Le tableau d'avancement molaire s'écrit alors :

mol.	$N_2$	+	$3H_2$	=	$2NH_3$
État initial (mol)	n <sub>1,0</sub>		$n_{2,0}$		n <sub>3,0</sub>
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  $\xi$ .

# ? À vous de jouer

Établissez le tableau d'avancement pour la réaction suivante, en fonction de  $\xi$ :

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

avec  $n_0(Na) = 0.30$  mol et  $n_0(Cl_2) = 0.20$  mol.

#### Attention

Le tableau d'avancement ne donne pas accès à la vitesse de réaction ni au temps nécessaire pour atteindre un état donné. Pour cela, il faudra introduire des notions de cinétique (chapitre 4).

# Tableau d'avancement volumique

Lorsqu'une réaction se fait à volume constant, dans un milieu homogène, il est souvent plus aisé de travailler en concentration. Pour cela, il suffit de diviser toutes les cellules par le volume, et d'utiliser l'avancement volumique x.

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

$mol.L^{-1}$	$N_2$	$+$ 3 $H_2$	= 2 NH <sub>3</sub>
État initial (mol $\cdot$ L <sup>-1</sup> )	c <sub>1,0</sub>	c <sub>2,0</sub>	c <sub>3,0</sub>
État final (mol $\cdot$ L <sup>-1</sup> )	$c_{1,0} - x$	$c_{2,0} - 3x$	$c_{3,0} + 2x$

#### 3.4 Calcul d'un rendement

#### Déterminer le réactif limitant

Dans une transformation chimique, les réactifs ne sont pas toujours présents en proportions stœchiométriques. Lorsque l'un d'eux vient à s'épuiser, la réaction s'interrompt : on parle alors de **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  $\xi_{\text{max}}$ .

#### Point Méthode

Pour chaque réactif  $A_i$ , on calcule l'avancement  $\xi_i$  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.

# Remarque

L'équation utilisée ci-dessus repose sur les coefficients stœchiométriques algébriques  $v_i$  (négatifs pour les réactifs), ce qui garantit que  $\xi_i$  est une quantité positive.

Soit la réaction :

$$2\,H_{2}\left(g\right)+O_{2}\left(g\right)\longrightarrow2\,H_{2}O\left(g\right)$$

avec  $n_0(H_2)=3$ ,0 mol et  $n_0(O_2)=1$ ,0 mol. Les coefficients algébriques sont :  $\nu_{H_2}=-2$ ,  $\nu_{O_2}=-1$ .

On calcule:

$$\xi_{\text{H}_2} = -\frac{3.0}{-2} = 1.5$$
 ;  $\xi_{\text{O}_2} = -\frac{1.0}{-1} = 1.0$ 

Donc :  $\xi_{\text{max}} = 1.0 \text{ mol et } O_2 \text{ est le réactif limitant.}$ 

$$2H_2 + O_2 = 2H_2O$$
  
État initial (mol) 3,0 1,0 0  
État final (mol) 3,0 - 2 1,0 - 1 2,0

#### **A** Attention

Un réactif en excès n'implique pas que la transformation soit incomplète : une réaction peut être totale tout en ayant des réactifs excédentaires.

# 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  $\xi_{max}$  et les quantités finales.

### Calculer un rendement d'une synthèse

Lorsqu'une réaction chimique est menée expérimentalement, la quantité de produit obtenu est souvent inférieure à celle attendue théoriquement. On introduit pour cela une grandeur fondamentale : le **rendement**.

#### 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  $\eta$ :

$$\eta = 100 \times \frac{n_{\text{obtenu}}}{n_{\text{max th\'eorique}}} \quad (\%)$$

**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,
- $\Delta n_{i,\text{max}} = v_i \cdot \xi_{\text{max}}$ : quantité maximale théorique, issue du tableau d'avancement.

Alors le rendement s'exprime aussi comme :

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

Lors de la synthèse de l'ammoniac :

$$N_{2}\left( g\right) +3\,H_{2}\left( g\right) \longrightarrow 2\,NH_{3}\left( g\right)$$

on a introduit  $n_0(N_2)=1.0$  mol et  $n_0(H_2)=3.0$  mol. La réaction est menée jusqu'à l'épuisement du  $H_2$ , réactif limitant :

$$\xi_{\text{max}} = \frac{3.0}{3} = 1.0 \text{ mol}$$

Mais la quantité de NH<sub>3</sub> obtenue en fin de réaction est 1,2 mol.

On a donc:

$$\Delta n_{\rm NH_3} = 1.2 \; {\rm mol} \qquad \Delta n_{\rm NH_3, \, max} = 2 \cdot 1.0 = 2.0 \; {\rm mol}$$

D'où un rendement:

$$\eta = 100 \times \frac{1.2}{2.0} = 60\%$$

# Remarque

Un rendement inférieur à 100% peut être dû à :

- des pertes mécaniques lors de la manipulation,
- une réaction incomplète (réaction limitée),
- des réactions secondaires non souhaitées.

## Attention

Un rendement supérieur à 100% est **impossible** : cela indiquerait une erreur de mesure ou la présence d'impuretés dans le produit isolé (produit mal séché par exemple).

# ? 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?

# Synthèse du chapitre

# Tableau récapitulatif des notions clés

Notion	Définition	Exemple
Système Variable d'état	Portion de matière étudiée Grandeur macroscopique	Soda en bouteille T, P, V
Phase	Domaine homogène	$H_2O(s) + H_2O(l)$ (glace + eau liquide)
Espèce chimique	Entités identiques	$Na^+$ , $H_2O$
Quantité de matière	$n = \frac{m}{M}$	n(NaCl) = 5/58.5
Fraction molaire	$x_i = \frac{n_i}{n_{\text{tot}}}$	$Air: x_{O_2} \approx 0.21$
Concentration molaire	$C = \frac{n}{V}$	Solution de NaCl

# Compétences visées

- **Savoirs**: phase, espèce, dissolution, concentration
- **Savoir-faire** : lecture étiquette, conversions, représentations
- Savoir-être : rigueur, modélisation, esprit critique

# **Annexes et prolongements**

Prendre de nombreux exemples (chapitre 1 Janson) avec des images de composés à l'échelle macroscopique et le modèle microscopique.